

# Modelamiento de la sostenibilidad en comunidades ecológicas utilizando redes de reacciones

Tesis  
entregada a la  
Universidad Tecnológica Metropolitana  
en cumplimiento parcial de los requisitos  
para optar al grado de

*Magíster en Biomatemática*

Facultad de Ciencias Naturales, Matemática y del Medio Ambiente

Por Gabriel Herrera Hernández

junio, 2025

Director de Tesis Dr. Tomás Veloz González

Co-Director de Tesis Dr. Ramiro Bustamante Araya

**Facultad de Ciencias Naturales,  
Matemática y del Medio Ambiente  
Universidad Tecnológica Metropolitana**

**Informe de Aprobación  
Tesis de Magíster**

Se informa a la *Escuela de Postgrado* de la *Facultad de Ciencias Naturales, Matemática y del Medio Ambiente* que la Tesis de Magíster presentada por el candidato

Gabriel Herrera Hernández

Ha sido aprobada por la comisión de Evaluación de la tesis como requisito para optar al grado de *Magíster en Biomatemática*, en el examen de Defensa Privada de Tesis rendido el día 18 de junio de 2025.

Director de Tesis

Dr. Tomás Veloz González

Co-Director de Tesis

Dr. Ramiro Bustamante Araya

Comisión de Evaluación de la Tesis

Dr. Claudio Ramírez

Dr. Juan Francisco Marín

*“La ciencia no es una búsqueda para conocer el mundo tal como es, sino un esfuerzo por entender sus infinitas posibilidades y sus fracturas internas.”*

– B. Labatut, *Un Verdor Terrible*, 2020.

*“Je est un autre.”*

– A. Raimbaud, *Carta a Georges Izambard, 13 de mayo de 1871.*

*“Recuerda bien: esta es la séptima y la última...”*

– Gas, *Poesía Inconclusa II, Sin publicar, en edición.*

Dedicada a Eva...  
....Por crear todo este “*Infinito Universo*”.

## Agradecimientos

Expreso mi más profundo agradecimiento al Dr. Tomás Veloz, mi tutor de tesis, por su invaluable orientación, dedicación y apoyo constante durante todo el desarrollo de este trabajo. Su compromiso riguroso y su paciencia han sido fundamentales para superar los desafíos académicos y personales que implicó esta investigación.

Destaco permitirme integrar sus equipos de trabajo, participando en el FONDECYT Iniciación N 11241020, “*Modeling multidimensional disturbances and stability in ecology with reaction networks*”, así como en el Concurso Interno de Fomento a la I+D+i o Creación 2023 - UTEM de la Vicerrectoría de Investigación y Posgrado, Proyecto de Continuidad de Líneas de Investigación de la Dirección de Investigación, *LCLI23-01, “Modelamiento de fenómenos interdisciplinarios complejos utilizando redes de reacciones”*.

Quiero agradecer encarecidamente al Dr. Ramiro Bustamante, co-tutor de esta tesis, por su calidad profesional y humana excepcional, su dedicación constante y el ánimo inagotable que me brindó durante todo el proceso compartido. Sus observaciones acertadas y sugerencias críticas, junto con su apoyo cercano y alentador, fueron un pilar fundamental que enriqueció y motivó cada etapa de esta investigación.

También quiero manifestar mi especial gratitud al Dr. Claudio Ramírez, cuyo apoyo técnico y asesoramiento experto en el desarrollo del modelo *RN\_AEP* fueron esenciales para la correcta implementación y validación de esta herramienta dentro del estudio.

Agradezco sinceramente al Dr. Marcelo Rivas por brindarme un espacio idóneo en el Laboratorio de Biología Computacional, el cual fue crucial para desarrollar ampliamente la escritura de esta tesis. Espacio determinante para llevar a cabo este proceso en un entorno académico propicio y estimulante.

A cada uno de ustedes, les reconozco no solo por su colaboración académica, sino como pilares en este camino, por sobre todo a su inspiradora calidad humana por lo que les estaré siempre profundamente agradecido.

Además, agradezco al Dr. Juan Francisco Marín, miembro de la comisión de esta tesis, por sus valiosas observaciones y retroalimentación detallada. Su análisis crítico y constructivo contribuyó de manera significativa a fortalecer la calidad y profundidad de este trabajo. Aprecio profundamente su tiempo y dedicación para acompañar este proceso académico.

Finalmente, a todxs y cada unx quienes han hecho posible que (aún) exista.

Gabriel Herrera Hernández  
*Gas*

# Índice general

<b>I Redes de reacciones en comunidades ecológicas</b>	<b>17</b>
1. Modelamiento de comunidades ecológicas	21
1.1. Definiciones preliminares . . . . .	22
1.1.1. Definiciones matemáticas . . . . .	22
1.1.2. Ejemplo de cálculo de organizaciones de una red de reacciones . . . . .	37
1.1.3. Teoría del orden y Representación visual de las Organizaciones . . . . .	40
1.2. Construcción de modelo de una comunidad ecológica teórica con RN+COT . .	43
1.2.1. Definiciones ecológicas . . . . .	45
1.2.2. Modelamiento matemático de interacciones ecológicas . . . . .	47
1.2.3. Integración interdisciplinaria . . . . .	48
1.2.4. Ejemplo de modelamiento de una comunidad ecológica con redes de reacciones . . . . .	50
2. Modelamiento de interacciones complejas: Interacción áfidos, parasitoides y endosimbiontes en plantas.	53
2.1. Definiciones: . . . . .	54
2.2. Modelo áfidos, parasitoides y endosimbiontes en plantas ( <i>RN_AEP</i> ) . . . . .	55
2.2.1. Narrativa ecológica . . . . .	56
2.2.2. Red de reacciones áfidos, endosimbiontes y parasitoides . . . . .	57
2.3. Resolución analítica del modelo <i>RN_AEP</i> . . . . .	59
2.3.1. Sistema de EDOs del modelo <i>RN_AEP</i> . . . . .	60
2.4. Resolución numérica del modelo <i>RN_AEP</i> . . . . .	73
2.5. ¿Coherencia entre análisis estructural y dinámico? . . . . .	77
2.6. Introducción de perturbaciones en comunidades ecológicas . . . . .	78
2.6.1. Perturbaciones y persistencia ecológica . . . . .	78
<b>II Sostenibilidad en comunidades ecológicas reales</b>	<b>87</b>
3. Modelamiento de comunidades ecológicas reales	91
3.1. Modelo de una comunidad ecológica real: Isla Navarino. . . . .	92

3.1.1. Análisis de la modelación ecológica tradicional en Isla Navarino . . . . .	92
3.1.2. Procedimiento de modelado con RN de la comunidad ecológica Isla Na- varino . . . . .	93
3.1.3. Narrativa ecológica . . . . .	93
3.1.4. Red de reacciones Isla Navarino ( <i>RN_IN</i> ) . . . . .	96
<b>4. Sostenibilidad estructural y dinámica</b>	<b>101</b>
4.1. Potenciales perturbaciones de la <i>RN_IN</i> . . . . .	101
4.2. Cuantificación de la sostenibilidad de comunidades ecológicas . . . . .	102
4.2.1. Algoritmo de cálculo de la sostenibilidad en comunidades ecológicas . .	102
4.2.2. Descripción general metodológica del análisis computacional . . . . .	102
4.2.3. La sostenibilidad de la comunidad ecológica <i>RN_IN</i> . . . . .	104
4.3. La sostenibilidad de la comunidad ecológica <i>RN_IN</i> . . . . .	109
<b>5. Consideraciones finales</b>	<b>117</b>
5.1. Recomendaciones para otros estudios . . . . .	117
5.2. Evaluación de las implicaciones del estudio . . . . .	118
5.3. Vinculación de los resultados con investigaciones existentes . . . . .	118
5.4. Limitaciones de la investigación . . . . .	119
5.5. Importancia y significado de la investigación . . . . .	120
5.6. Resultados inesperados . . . . .	121
<b>A. Apéndice</b>	<b>129</b>
A.1. <i>Script de Python</i> <sup>TM</sup> para la simulación numérica del modelo <i>RN_AEP</i> con la inclusión de perturbaciones . . . . .	129
A.2. <i>Script de Python</i> <sup>TM</sup> para la cuantificación de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales . . . . .	132
A.3. Gráficas complementarias . . . . .	152
A.3.1. Exploración estructural . . . . .	152
A.3.2. Exploración Dinámica . . . . .	154
<b>B. Apéndice</b>	<b>159</b>
B.1. Sobre la librería pyCOT. . . . .	159

# Índice de figuras

1.	Gráfica ONU del ODS 15 (United Nations, 2024a) . . . . .	9
2.	Gráfica ONU del ODS 13 (United Nations, 2024b) . . . . .	10
3.	Esquema de desarrollo sostenible según la Doctora Gro Harlem Brundtland (Wikimedia Commons contributors, 2023) . . . . .	13
1.1.	Visualización de la Red de reacciones del ejemplo 1.1. . . . .	23
1.2.	Diagrama de Hasse de las organizaciones de la red de reacciones 1.1. . . . .	41
1.3.	Flujo conceptual desde la RN hacia la dinámica sistémica usando COT. . . . .	42
1.4.	Esquema metodológico. Elaboración propia. . . . .	44



# Índice de cuadros

1. Comparativa de características entre lenguajes tradicionales de modelación. . . . .	6
2. Comparativa de características entre diferentes lenguajes de modelación inclui- do RN+COT. . . . .	7
1.1. Parámetros utilizados para las simulaciones dinámicas de la RN en el ejemplo 1.1. . . . .	30
1.2. Simulaciones dinámicas para distintas C.I.s del sistema de EDOs (1.15). Ela- boración propia en <i>Python<sup>TM</sup></i> , librería pyCOT (Veloz, 2025). . . . .	31
1.3. Resumen de conclusiones de las simulaciones dinámicas en el cuadro 1.2. . . . .	32
1.4. Comparación entre modelos de poblaciones y modelos de comunidades. . . . .	46
1.5. Mecanismos ecológicos típicos y su traducción al lenguaje de reacciones utili- zado en RN. . . . .	47
1.6. Nomenclatura utilizada en el ejemplo 1.1. . . . .	50
1.7. Mecanismos ecológicos definibles para el ejemplo 1.1. . . . .	50
2.1. Especies bióticas y abióticas del modelo <i>RN_AEP</i> . . . . .	58
2.2. Interacciones ecológicas del modelo <i>RN_AEP</i> y su relación con las hipótesis ecológicas. . . . .	58
2.3. Resumen de resultados de la resolución del sistema de EDOs simplificado 2.2. .	72
2.4. Comparación entre los dos enfoques analíticos aplicados al sistema <i>RN_AEP</i> . .	73
2.5. Simulaciones dinámicas para distintas Condiciones iniciales de $[A](0)$ , $[P](0)$ y $[P_p](0)$ del sistema (2.36). Elaboración propia en <i>Python<sup>TM</sup></i> , librería pyCOT (Veloz, 2025). . . . .	75
2.6. Simulaciones dinámicas para distintas Condiciones iniciales de $AE(0)$ , $[P](0)$ y $[P_p](0)$ del sistema (2.37). Elaboración propia en <i>Python<sup>TM</sup></i> , librería pyCOT (Veloz, 2025). . . . .	76
2.7. Comparativa para simulaciones dinámicas con y sin perturbación, para distintas Condiciones iniciales de $[A](0)$ , $[P](0)$ y $[P_p](0)$ del sistema (2.36). Cálculos en <i>Python<sup>TM</sup></i> Apéndice A.1). . . . .	80
2.8. Resumen cuadro comparativo de los resultados del Cuadro 2.7 de simulaciones dinámicas con y sin perturbación. . . . .	81

2.9. Comparativa para simulaciones dinámicas con y sin perturbación, para distintas Condiciones iniciales de $AE(0)$ , $[P](0)$ y $[P_p](0)$ del sistema (2.37). Cálculos en <i>Python<sup>TM</sup></i> Apéndice A.1). . . . .	82
2.10. Resumen cuadro comparativo de los resultados del Cuadro 2.9 de simulaciones dinámicas con y sin perturbación. . . . .	84
3.1. Especies bióticas y abióticas consideradas para el modelo RN. . . . .	96
3.2. Interacciones definidas para el modelo. . . . .	97
4.1. Comparativa de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	105
4.2. Comparativa de Distribución porcentual de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	106
4.3. Comparativa de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	107
4.4. Comparativa de Distribución porcentual de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	108
4.5. Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	111
4.6. Comparativa de estabilidad de estados por probabilidad de permanencia en Lf entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	112
4.7. Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	113
4.8. Continuación de Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	114
4.9. Comparativa de estabilidad de estados por probabilidad de permanencia en Lf entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	115
A.1. Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas (Exploración estructural). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	152
A.2. Comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	153

A.3. Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas. Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	154
A.4. Continuación de Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas. Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	155
A.5. Comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	156
A.6. Continuación de comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en <i>Python<sup>TM</sup></i> (ver Apéndice A.2). . . . .	157



## **Resumen**

La presente investigación busca dar respuesta a la necesidad de comprender la sostenibilidad en comunidades ecológicas por medio de utilizar redes de reacciones como marco de modelamiento de las interacciones complejas entre los componentes de este tipo de sistemas. Los conceptos que se destacan con mayor importancia son la biodiversidad y cómo mediante perturbaciones, se puede influenciar la persistencia y la resiliencia de las comunidades ecológicas.

Los objetivos propuestos son validar un modelo basado en redes de reacciones para una comunidad ecológica teórica con interacciones complejas y, posteriormente, aplicar la validación de modelamiento con redes de reacciones en una comunidad ecológica real. Se buscará construir una red de reacciones que represente el sistema seleccionado, identificar regímenes de persistencia y analizar la respuesta del sistema ante perturbaciones, proponiendo una medida de la sostenibilidad para el modelo.

La principal problemática implicada en la investigación radica en la dificultad del modelamiento de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales, considerando la alta cantidad de especies interactuantes, las interrelaciones complejas y las perturbaciones que pueden influir en su dinámica. Como hipótesis de la investigación, se propone que las comunidades ecológicas reales se comportan como redes de reacciones.

Para dar respuesta a los objetivos definidos y la problemática identificada, se propone un enfoque metodológico que incluye la generación de modelos a partir de una narrativa ecológica, la validación de redes de reacciones en colaboración con expertos. Asimismo, se utilizarán simulaciones para proponer una métrica de la sostenibilidad de comunidades ecológicas reales permitiendo una comprensión más profunda de la sostenibilidad en el contexto ecológico.



# Introducción

La ecología es la rama de la biología que estudia las relaciones de los diferentes seres vivos entre sí y su relación con el entorno: “la biología de los ecosistemas” (Margalef, 1974). Estudia cómo estas interacciones entre los organismos y su ambiente afectan a propiedades como la distribución o la abundancia. En el ambiente se incluyen las propiedades físicas y químicas que pueden ser descritas como la suma de factores abióticos locales, como el clima y la geología, y los demás organismos que comparten ese hábitat (factores bióticos). La comprensión de cómo la biodiversidad afecta a la función ecológica es un área importante enfocada en los estudios ecológicos. Por tanto, la ecología es un campo interdisciplinario que incluye a la biología y las ciencias de la Tierra.

Entender más cabalmente las relaciones e interacciones que se generan en los sistemas ecológicos (ecosistemas), y sus distintos componentes como, específicamente, las comunidades ecológicas, ha ampliado la interdisciplinariedad que contempla la ecología hacia comprender cómo las comunidades ecológicas pueden ser sostenibles. Sin embargo, la conceptualización de sostenibilidad aún es difusa. Se considera que la sostenibilidad está relacionada con conceptos como resiliencia, capacidad de adaptación y vulnerabilidad. Sus factores de cambio medioambientales y culturales (económicos, sociales) están sujetos a influencias mutuas (retroalimentaciones, dependencias y solapamientos) y propagan complejas relaciones causales desde escalas locales a globales (Kovacs et al., 2020). Por lo que al estudiar comunidades ecológicas es necesario considerar que estas se comportan como sistemas complejos.

El modelamiento de comunidades ecológicas desde una perspectiva no compleja ha sido dominado históricamente por enfoques deterministas y reduccionistas, los cuales representan los componentes de los sistemas ecológicos mediante estructuras matemáticas formales, como ecuaciones diferenciales, con el objetivo de describir las interacciones entre componentes individuales. Este enfoque ha permitido avances importantes en la comprensión de procesos básicos como la dinámica poblacional o los flujos de materia y energía. Sin embargo, presenta serias limitaciones al intentar capturar propiedades emergentes como la resiliencia, la autoorganización o la capacidad adaptativa de las comunidades ecológicas, ya que estas propiedades surgen de interacciones contextuales, múltiples bucles de retroalimentación y contextos cambiantes. Como resultado, los modelos convencionales tienden a simplificar en exceso la dinámica real

de las comunidades ecológicas, dificultando la predicción de su comportamiento ante perturbaciones o transiciones críticas (Levin, 1998; Folke et al., 2010; DeAngelis and Grimm, 2020; Moore and Trosper, 2021). Esta situación ha impulsado el surgimiento de nuevas aproximaciones que reconocen la complejidad como una característica central de los sistemas ecológicos, y las comunidades ecológicas, aunque su desarrollo aún se encuentra en desarrollo.

Como marco de modelamiento para sistemas complejos, ha sido ampliamente utilizada la aproximación desde Redes de Reacciones (Veber et al., 2008). Una Red de Reacciones es una especificación formal del proceso contextual de transformación que puede posiblemente pasar en un entorno molecular (o *in silico*) determinado, mediante un conjunto de reacciones. Cada reacción describe la formación de un contexto de interacción, representado por una colección de entidades denotadas como reactantes (por ejemplo: especies moleculares, energía, etc.) y sus transformaciones en otra colección de especies moleculares denotadas como productos (Feinberg, 2019).

Un formalismo para analizar sistemas complejos y autoorganizados que se utiliza en el modelamiento mediante redes de reacciones es la Teoría de la Organización Química. Esta teoría plantea que las redes se componen de subredes invariantes denominadas “Organizaciones Químicas”. Las organizaciones químicas se caracterizan por ser conjuntos de entidades cerrados (no se introducen nuevos elementos) y automantenidos (no se pierden elementos existentes). (Heylighen et al., 2024). A partir de este punto, los términos “Organizaciones Químicas”, “organizaciones” y “conjuntos de especies químicas persistentes” se utilizarán de forma equivalente para aludir a una misma entidad conceptual, cuya definición se ha establecido previamente.

## Antecedentes

En ecología, la biodiversidad se refiere a la variedad de vida en todas sus formas, niveles y combinaciones, abarca la diversidad de ecosistemas, comunidades ecológicas, especies y genes, así como los procesos ecológicos que los soportan. En este sentido, la resiliencia estructural de una comunidad ecológica se vincula estrechamente con la organización funcional de sus interacciones, lo cual puede resultar en una mayor eficiencia en procesos ecosistémicos fundamentales. Entre estos se incluyen la productividad primaria y secundaria, así como la generación de servicios ecosistémicos críticos, tales como el reciclaje de nutrientes, la polinización y la regulación bioclimática (Cardinale et al., 2012).

De la definición anterior de biodiversidad emerge el concepto de la Resiliencia Ecológica como la capacidad de la dinámica de una comunidad ecológica de mantenerse en el largo plazo y encontrar un estado de persistencia. Por lo que, el estudio de las funciones de las comunidades ecológicas en estados alejados del equilibrio se vuelve un punto crítico. Asimismo, emerge el concepto de Complejidad Ecológica, que se manifiesta internamente debido a que en el sistema son múltiples las entidades participantes y las interacciones entre ellas las que se ponen en juego y externamente, por la influencia de la actividad humana y fenómenos como el cambio climático.

Por lo tanto, como plantearon Veloz et al. en 2023, al estudiar la evolución de la Resiliencia y Complejidad ecológicas de las comunidades ecológicas mediante el marco de modelamiento con redes de reacciones, es preciso considerar aspectos como:

- **Perturbaciones:** eventos o influencias que modifican la estructura de las configuraciones persistentes y desencadenan procesos de transición entre diferentes estructuras dentro de la red de reacciones.
- **Incertezas:** falta de certeza o predictibilidad en el comportamiento de las configuraciones persistentes, especialmente en respuesta a perturbaciones o cambios en el entorno y las perturbaciones en el contexto de la evolución estructural.
- **Régimen con incertezas:** en referencia a un estado o modo de operación de las configuraciones persistentes en el que la presencia de incertidumbre es un factor determinante en su comportamiento y evolución.
- **Sostenibilidad:** capacidad de las configuraciones persistentes para mantener su estructura y funciones a lo largo del tiempo, incluso frente a perturbaciones y cambios en el entorno.

Cabe destacar que los conceptos de Resiliencia ecológica, Complejidad Ecológica, sostenibilidad y Régimen con incertidumbres plantean la necesidad de un cambio en el abordaje de las problemáticas que se presentan en las comunidades ecológicas. Cambio epistemológico que

se viene desarrollando hace años en distintas investigaciones como las de Veloz and Razeto-Barry (2017a), Veloz and Razeto-Barry (2017b), Veloz (2020), Kovacs et al. (2020), Veloz and Flores (2021a), Veloz and Flores (2021b) y Veloz et al. (2023b).

## Justificación del estudio

### Antecedentes teóricos

En el Modelamiento Ecológico, el debate sobre complejidad y persistencia en las comunidades ecológicas aún está abierto. Uno de los principales problemas de la ecología teórica es resolver cómo responden características de las comunidades ecológicas como la resiliencia, la resistencia, la robustez o, en términos más amplios, la persistencia, a los cambios en la diversidad de especies, la riqueza, la conectividad o, más ampliamente, la complejidad (Veloz, 2020).

Por tanto, podemos decir que el principal problema en el modelado de comunidades ecológicas radica en la incapacidad de los lenguajes tradicionales para abordar la complejidad de la sostenibilidad. Esto se refleja en el cuadro 1, que presenta los principales lenguajes tradicionales de modelado utilizados en sistemas complejos y, por ende, con potencial para el estudio de comunidades ecológicas. Además, se destacan las principales características de cada uno.

Lenguaje de modelación	Cantidad de Entidades	Cantidad de Interacciones	Evolución Dinámica	Mecanismo	Herramientas analíticas
Ecuaciones Diferenciales	Pocas	Pocas	Sí	Sí	Amplias
Redes	Muchas	Una	No	No	Amplias
Basado en agentes	Muchas	Muchas	Sí	Parcial	Limitadas

Cuadro 1: Comparativa de características entre lenguajes tradicionales de modelación.

Por lo tanto, aún existen limitaciones en cuanto a los mecanismos y herramientas analíticas que ofrecen estos lenguajes para el modelado de comunidades ecológicas.

### Modelamiento basado en Redes de Reacciones y la Teoría de la Organización Química

Las limitaciones expuestas en los antecedentes teóricos plantean el desafío de utilizar un lenguaje de modelamiento que permita profundizar en la comprensión de las comunidades ecológicas. Por ello, surge la alternativa del modelamiento basado en Redes de Reacciones y

la Teoría de la Organización Química.

Las Redes de Reacciones (RN, por sus siglas en inglés), en el ámbito matemático, son sistemas de reacciones químicas que pueden modelarse utilizando la teoría de redes. Este enfoque implica representar las especies químicas como nodos y las reacciones como aristas, permitiendo analizar dinámicas complejas a través de herramientas matemáticas como matrices estequiométricas y sistemas de ecuaciones diferenciales (Feinberg, 1979).

Una herramienta analítica de RN es la Teoría de la Organización Química (COT, por sus siglas en inglés). Esta teoría es un formalismo para analizar sistemas complejos y autoorganizados. Los elementos básicos de esta teoría son las especies y las reacciones. Una reacción transforma un conjunto de especies en otro, representando procesos elementales que dan lugar a redes de reacciones autoorganizadas. Estas redes se componen de subredes invariantes denominadas “Organizaciones”. Las organizaciones se caracterizan por ser cerradas (no se introducen nuevas especies) y automantenidas (no se pierden especies existentes) (Heylighen et al., 2024).

Lenguaje de modelación	Cantidad de Entidades	Cantidad de Interacciones	Evolución Dinámica	Mecanismo	Herramientas analíticas
Ecuaciones Diferenciales	Pocas	Pocas	Sí	Sí	Amplias
Redes	Muchas	Una	No	No	Amplias
Basado en agentes	Muchas	Muchas	Sí	Parcial	Limitadas
<b>RN+COT</b>	<b>Muchas</b>	<b>Muchas</b>	<b>Sí</b>	<b>Sí</b>	<b>Amplias</b>

Cuadro 2: Comparativa de características entre diferentes lenguajes de modelación incluido RN+COT.

En consecuencia, el cuadro 2 integra el modelado mediante Redes de Reacciones y la Teoría de la Organización Química, evidenciando cómo este enfoque supera las limitaciones de los mecanismos y herramientas analíticas en el modelado de comunidades ecológicas.

La capacidad de modelar sistemas complejos de manera diferenciada mediante el enfoque RN+COT ha impulsado su aplicación en diversas investigaciones sobre comunidades ecológicas. A continuación, se presenta una recopilación de estudios teóricos que confirman la aplicabilidad del modelado basado en RN+COT para el estudio de comunidades ecológicas:

- Veloz and Razeto-Barry (2017a) muestran cómo las RN pueden modelar interacciones ecológicas y utilizar COT para formalizar conceptos ecológicos, como la invasión de especies, entre otros.
- Veloz and Razeto-Barry (2017b) muestran cómo con RN+COT se pueden modelar interacciones ecológicas y los cambios estructurales que ocurren en sistemas ecológicos, destacando la identificación de módulos independientes y los cambios cualitativos en las RN.
- Veloz and Flores (2021a) presentan un modelo de RN para estudiar interacciones endosimbióticas complejas, como la simbiosis entre corales y algas. El modelo aborda niveles bioquímicos y de proliferación celular, incluyendo mecanismos de regulación multiescalares que estabilizan estas interacciones endosimbióticas, destacando la importancia del enfoque multiescalar para entender estos sistemas ecológicos complejos.
- Veloz and Flores (2021b) presentan un modelo mecanístico de interacción endosimbiótica utilizando RN. El modelo incluye tres capas de representación a diferentes escalas temporales: intracelular, intercelular y organísmica. Como ejemplo, se realiza un análisis numérico de los efectos de la interacción endosimbiótica a nivel intracelular.
- Veloz et al. (2023b) proponen un enfoque basado en RN+COT para demostrar la autoorganización en comunidades ecológicas. Este marco teórico ofrece una perspectiva novedosa para comprender la emergencia de estructuras complejas y la evolución de sistemas vivos en entornos ecológicos.

A pesar de los avances en la investigación teórica sobre el modelado de comunidades ecológicas mediante RN+COT, aún no existen aplicaciones contrastadas con el conocimiento empírico de sistemas reales proporcionado por expertos en ecología.

La modelación a través de Redes de Reacciones se fundamenta en la Teoría de la Organización Química, que describe cómo las interacciones entre especies químicas pueden dar lugar a conjuntos de especies persistentes, cerrados estructuralmente y automantenidos (u organizaciones).

La Teoría de Organizaciones Químicas (Dittrich and di Fenizio, 2007) emerge como marco conceptual para analizar sistemas reactivos complejos con dinámica constructiva. Su desarrollo se enmarca en:

- Problemas de autoorganización molecular en biología sintética (Fontana and Buss, 1996).
- Necesidad de formalizar transiciones entre estados estables en redes bioquímicas.
- Aplicaciones en biocomputación y diseño de sistemas P (Dittrich and di Fenizio, 2004).

Con el fin de profundizar en la relación entre estructura y persistencia en el marco de las Redes de Reacciones, a continuación se presentan los desarrollos matemáticos fundamentales propuestos por Peter et al. (2010), Peter and Dittrich (2011) y Peter et al. (2021), los cuales permiten formalizar estos conceptos y establecer condiciones precisas para evaluar la viabilidad y persistencia de las organizaciones en sistemas ecológicos.

Por un lado, según Peter et al. (2010) la viabilidad de estas organizaciones es crucial para entender la dinámica de los sistemas, ya que algunas organizaciones pueden no ser factibles en el espacio de concentraciones, lo que implica que no deben ser consideradas en el análisis. Por otro lado, en 2011 Peter and Dittrich se enfocaron en que la comprensión de los conjuntos de especies que pueden coexistir en un sistema químico a lo largo del tiempo es crítica. Adicionalmente, en el trabajo de Peter et al. (2021) se estableció que la identificación de conjuntos de especies persistentes es crucial para comprender la dinámica de los sistemas de reacción-difusión y su relación con la red de reacciones subyacente.

En conclusión, el estudio de la persistencia en comunidades ecológicas modeladas mediante Redes de Reacciones ha evolucionado significativamente debido al desarrollo de herramientas matemáticas orientadas a comprender la relación entre la estructura de la red y la dinámica de las especies, proporcionando una base sólida para el estudio de la persistencia ecológica desde una perspectiva matemática.

### Desafíos globales

La Organización de Naciones Unidas (ONU) definió, el 25 de septiembre de 2015, 17 Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) como una agenda común de objetivos globales para erradicar la pobreza, proteger el planeta y asegurar la prosperidad para todos (United Nations, 2024c). Para el cumplimiento de las metas específicas que cada objetivo tiene, la ONU planteó los 15 años siguientes a la fecha de su definición.

Por un lado, el ODS 15 busca gestionar sosteniblemente los bosques, luchar contra la desertificación, detener e invertir la degradación de las tierras, detener la pérdida de biodiversidad (United Nations, 2024a). Algunos de los aspectos más relevantes que señala la ONU en relación a este ODS para esta propuesta de investigación son:



Figura 1: Gráfica ONU del ODS 15 (United Nations, 2024a).

*“Los ecosistemas terrestres son vitales para el sostenimiento de la vida humana,*

*contribuyen a más de la mitad del PIB mundial e incluyen diversos valores culturales, espirituales y económicos (United Nations, 2024a).*”

*“...el mundo se enfrenta a una triple crisis del cambio climático, a la contaminación y a la pérdida de la biodiversidad...Los esfuerzos mundiales y regionales para mantener los ecosistemas forestales, así como sus funciones sociales, económicas y medioambientales, son esenciales especialmente para los países en desarrollo y los trópicos (United Nations, 2024a).”*

*“La biodiversidad y los servicios de los ecosistemas que respalda también pueden sentar las bases de las estrategias de adaptación al cambio climático y reducción del riesgo de desastres, ya que pueden generar beneficios que aumenten la resiliencia de las personas (United Nations, 2024a).”*

*“Un efecto irreversible de la actividad humana sobre el medio ambiente es la extinción de especies, lo que altera el equilibrio de la naturaleza y hace que los ecosistemas sean más frágiles y ofrezcan menos resistencia a las perturbaciones. Según un reciente informe de la ONU sobre biodiversidad, cerca de un millón de especies animales y vegetales están en peligro de extinción, en muchos casos en las próximas décadas, más que en cualquier otro momento en la historia de la humanidad (United Nations, 2024a).”*

*“Debemos ser respetuosos con la fauna y únicamente participar en actividades de ecoturismo gestionadas de forma responsable y ética para evitar perturbarla. Las áreas protegidas bien gestionadas contribuyen a la salud de los ecosistemas, lo que a su vez contribuye a la salud de las personas. Por ello, es fundamental que las comunidades locales participen en el desarrollo y la gestión de estas áreas protegidas (United Nations, 2024a).”*

Por otro lado, el ODS 13 busca adoptar medidas urgentes para combatir el cambio climático y sus efectos (United Nations, 2024b). Algunos de los aspectos más relevantes que señala la ONU en relación a este ODS para esta propuesta de investigación son:



Figura 2: Gráfica ONU del ODS 13 (United Nations, 2024b) .

*“El cambio climático afectará a todas las personas de todos los países de todos los continentes de alguna forma. Se avecina un cataclismo climático y no estamos*

*preparados para las posibles consecuencias. El cambio climático se debe a las actividades humanas y amenaza la vida en la Tierra tal como la conocemos... (United Nations, 2024b)"*

*"El cambio climático está alterando las economías nacionales y afectando a las distintas vidas y medios de subsistencia de muchas personas, especialmente las más vulnerables. Entre 2010 y 2020, las regiones altamente vulnerables en las que viven aproximadamente entre 3300 y 3600 millones de personas, experimentaron tasas de mortalidad humana por inundaciones, sequías y tormentas 15 veces superiores a las de las regiones con una vulnerabilidad muy baja (United Nations, 2024b)."*

*"...Para limitar el aumento global de la temperatura muy por debajo de los 2 [°C], o incluso de 1,5 [°C], el mundo debe transformar sus sistemas energéticos, industriales, de transporte, alimentarios, agrícolas y forestales. El mundo dio un primer paso importante en diciembre de 2015 con la adopción del Acuerdo de París, en el que todos los países firmantes se comprometieron a tomar medidas para hacer frente al cambio climático. A pesar de ello, se necesitan más medidas para cumplir los objetivos (United Nations, 2024b)."*

En consideración de lo expuesto anteriormente respecto a estos dos ODS podemos plantear que esta propuesta considera directamente el ODS 15 e indirectamente el ODS 13. Debido a que se reafirma la coherencia y necesidad de estudiar la sostenibilidad de los sistemas ecológicos, y que es posible considerar que existe una relación sistémica entre la “vida de ecosistemas terrestres” (ODS 15) y la “acción por el clima” (ODS 13).

## **Hacia Interdisciplina y sostenibilidad**

El modelado matemático requiere necesariamente compatibilidad interdisciplinaria, dado que su aplicación efectiva demanda la colaboración entre investigadores de diversas disciplinas. Según la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo de Chile (ANID), los estudios interdisciplinarios se definen como aquellos que integran diferentes disciplinas y enfoques metodológicos tanto en su objeto de estudio como en su formulación investigativa. Esta conceptualización se alinea con la propuesta de Urquiza et al. (2019), quien enfatiza que la interdisciplina surge de la interpenetración disciplinaria, que es el proceso donde los marcos teóricos y herramientas metodológicas de diferentes campos se combinan para generar nuevos enfoques analíticos.

Como se evidencia en la representación gráfica de la Figura 3, el logro de la sostenibilidad emerge precisamente en la intersección dialéctica entre las ciencias naturales y sociales. Esta convergencia disciplinar responde a la necesidad de abordar fenómenos complejos que operan en sistemas socioecológicos, donde las dinámicas ambientales y humanas interactúan de manera contextual. Por consiguiente, el análisis de tales sistemas exige metodologías que

trasciendan los límites disciplinares tradicionales, integrando modelos matemáticos con perspectivas cualitativas y cuantitativas de diversas áreas del conocimiento.

## **Sistemas socio-ecológicos**

Durante la década del 2000, diferentes autores comenzaron a utilizar el término sistemas socio-ecológicos (SSE). Los SSE son sistemas complejos integrados de comunidades humanas y sus entornos naturales, donde las interacciones y retroalimentaciones entre componentes sociales y ecológicos determinan la dinámica y el funcionamiento del sistema en su conjunto (Folke et al., 2002; Berkes et al., 2003; Ostrom, 2009).

## **Sostenibilidad socio-ecológica**

Podemos describir la sostenibilidad en SSEs como los procesos involucrados para que los sistemas biológicos y sociales se mantengan productivos con el transcurso del tiempo. Por tanto, corresponde al equilibrio de una especie con los recursos de su entorno y su permanencia en el sistema.

Específicamente, el concepto de Desarrollo Sostenible aparece en el Informe Brundtland (World Commission on Environment and Development, 1987) denominado inicialmente como “Nuestro Futuro Común”. En este informe encontramos la siguiente frase que resume el Desarrollo sostenible:

*“Satisfacer las necesidades de las generaciones presentes sin comprometer las posibilidades de las del futuro para atender sus propias necesidades. Los tres pilares que se relacionan en el desarrollo sostenible son: economía, medio ambiente y sociedad. La finalidad de su relación es que exista un desarrollo económico y social respetuoso con el medio ambiente (World Commission on Environment and Development, 1987)”.*

En los tres pilares descritos en esta frase, que describe el Desarrollo sostenible, (ver figura 3) se refleja expresamente la necesidad inminente de considerar más que solo los sistemas ecológicos para el logro de un mejor futuro.

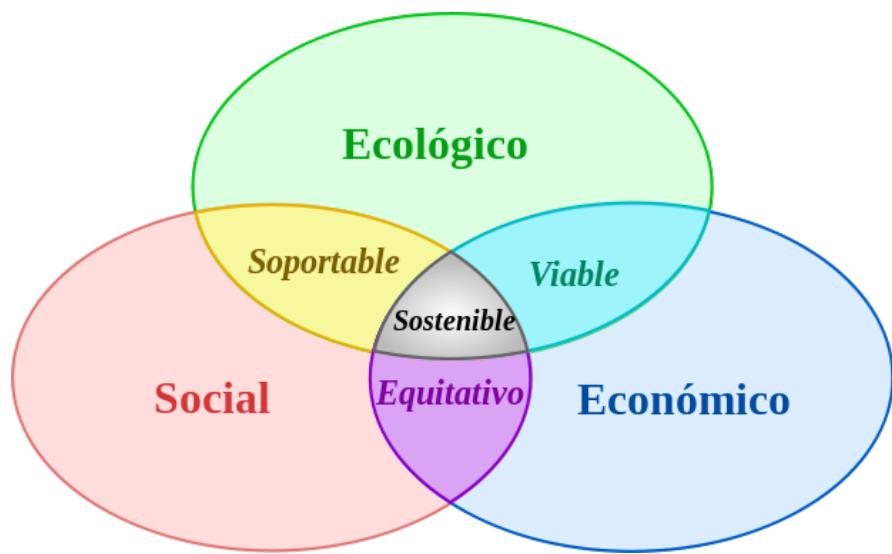


Figura 3: Esquema de desarrollo sostenible según la Doctora Gro Harlem Brundtland (Wikimedia Commons contributors, 2023) .

## Planteamiento del Problema

Durante las últimas décadas del siglo XX y las transcurridas del siglo XXI, los científicos de distintas disciplinas han modelado sistemas ecológicos (Adams, 2016), sociales y económicos, considerando las recurrentes crisis ocurridas en estos ámbitos.

Un sistema ecológico, contiene distintas comunidades ecológicas, y se caracteriza por la coexistencia persistente de numerosos tipos de especies (entidades), las que a su vez interactúan mediante múltiples mecanismos (procesos biológicos). Por esto, las Redes de Reacciones, lenguaje de representación estándar en la biología de sistemas, son precisas para el modelamiento de los procesos que ocurren en este tipo de sistemas (y sus subsistemas). En particular, sucede en comunidades ecológicas que su persistencia en el tiempo depende de la autoproducción de su propia estructura, concepto que desde la biología de sistemas se entiende como autopoiesis, y que ha sido modelado desde la Teoría de Organización Química (Heylighen et al., 2024).

Al explorar el concepto de autopoiesis de una comunidad ecológica, se puede analizar su configuración y su evolución estructural mediante perturbaciones que complejizarán el modelo, incluyendo nuevas interacciones o entidades no existentes inicialmente en el sistema, para determinar la viabilidad de que dicho sistema sea sostenible en el tiempo.

Como se planteó en la Justificación del estudio, hasta el momento las investigaciones en modelamiento ecológico basadas en Redes de Reacciones y la Teoría de la Organización Química se han centrado principalmente en comunidades ecológicas teóricas. En este contexto, la presente investigación tiene como objetivo aplicar dicho enfoque al estudio de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales, contrastando los resultados del modelamiento con el conocimiento empírico proporcionado por expertos en ecología.

Por lo tanto, al desarrollar la cuantificación de la sostenibilidad de una comunidad ecológica real ante un régimen con incertidumbres, con este abordaje será posible - sin que esta sea una lista taxativa:

- Proporcionar información sobre el comportamiento dinámico y las propiedades emergentes y jerárquicas del sistema a partir de su estructura.
- Explorar la relación entre el aspecto evolutivo y la complejidad, es decir, ¿cómo evolucionan las organizaciones en relación con su complejidad?

## **Hipótesis o pregunta de investigación y objetivos**

### **Hipótesis:**

Las comunidades ecológicas reales se comportan como redes de reacciones.

### **Objetivos**

#### **Objetivos Generales**

1. Validar un modelo basado en redes de reacciones de una comunidad ecológica teórica con interrelaciones complejas.

OE1 Construir un modelo de una comunidad ecológica específica.

OE2 Utilizar herramientas de la Teoría de la Organización Química para analizar dinámica de una comunidad ecológica.

2. Modelar la sostenibilidad de una comunidad ecológica real.

OE3 Construir una red de reacciones que represente el sistema seleccionado.

OE4 Caracterizar la persistencia del sistema y contrastar los resultados con COT.

OE5 Identificar una suite de especies, reacciones y procesos que pueden ser considerados como perturbaciones del sistema.

OE6 Analizar la respuesta del sistema ante las perturbaciones y proponer una métrica para de sostenibilidad para el modelo.



# Parte I

## Redes de reacciones en comunidades ecológicas



# Introducción

Comprender la complejidad y dinámica de las interacciones biológicas al estudiar las comunidades ecológicas ha posicionado al modelamiento matemático como una herramienta prioritaria. Por su parte, las Redes de Reacciones (RN) brindan un marco teórico sólido que permite analizar y predecir el comportamiento de distintas comunidades ecológicas complejas en este contexto. Como ejemplo de lo anterior, Veloz y Flores desarrollaron un modelo mecanístico de interacción endosimbiótica para modelar interacciones endosimbióticas complejas que integran distintos niveles organizacionales Veloz and Flores (2021b,a).

En esta parte de la investigación introduciremos el marco y formalización del modelamiento utilizando RN y la Teoría de Organización Química (COT) para su aplicación en comunidades ecológicas con interacciones complejas. En el Capítulo 1, a continuación, presentamos definiciones preliminares de las RN, COT y de ecología de sistemas con interacciones complejas. Además, ilustraremos ejemplos de apoyo a la interpretación de las definiciones. En el Capítulo 2 presentamos el vínculo entre las RN y las comunidades ecológicas con interacciones complejas. Con el objetivo de facilitar la comprensión de este vínculo, presentamos la construcción del modelamiento de la comunidad ecológica compuesta por áfidos, endosimbiontes y parásitoides (AEP) basándonos en la investigación de Oliver and Higashi (2019).



## Capítulo 1

# Modelamiento de comunidades ecológicas

En este capítulo presentamos las teorías que permitirán estudiar el modelo que desarrollaremos, introduciendo las nociones del formalismo de Redes de Reacciones necesarias para comprender los niveles de representación relacional, estequiométrico y dinámico; para posteriormente, introducir la Teoría de la Organización Química.

Las demostraciones de las definiciones matemáticas de este capítulo pueden ser consultadas en las publicaciones de Feinberg (1979), Dittrich and di Fenizio (2007), Peter et al. (2010), Peter and Dittrich (2011) y Peter et al. (2021), teoría del orden en Stanley (1997), en el libro de Birkhoff (1948) y en la tesis de magíster de Veloz González (2010).

El vínculo, a nivel teórico, entre las redes de reacciones y las comunidades ecológicas tiene como precedente, por un lado, la publicación de Veloz and Razeto-Barry (2017a), que muestra cómo las Redes de Reacciones pueden modelar interacciones ecológicas y utilizar la Teoría de la Organización Química para formalizar conceptos ecológicos, como la invasión de especies, entre otros y, por otro lado, la de Veloz and Razeto-Barry (2017b) que muestra cómo con Redes de Reacciones y la Teoría de la Organización Química se pueden modelar interacciones ecológicas y los cambios estructurales que ocurren en sistemas ecológicos, destacando la identificación de módulos independientes y los cambios cualitativos en las Redes de Reacciones.

## 1.1. Definiciones preliminares

### 1.1.1. Definiciones matemáticas

#### Redes de Reacciones

**Definición 1.1. Red de Reacciones (RN):** son sistemas de reacciones químicas que pueden modelarse utilizando la teoría de redes. Este enfoque implica representar las especies químicas como nodos y las reacciones como aristas, permitiendo analizar dinámicas complejas a través de herramientas matemáticas como matrices estequiométricas y sistemas de ecuaciones diferenciales (Feinberg, 1979).

Si  $\mathcal{M} = \{s_1, \dots, s_m\}$  es un conjunto finito de  $m$  especies reaccionando entre ellas de acuerdo a un conjunto finito de  $\mathcal{R} = \{r_1, \dots, r_n\}$  de  $n$  reacciones. Por lo tanto, una red de reacciones,  $\text{RN} = \langle \mathcal{M}, \mathcal{R} \rangle$  es definida como el par del conjunto de especies ( $\mathcal{M}$ ) y el conjunto de reacciones ( $\mathcal{R}$ ).

Desde un punto de vista teórico, una red de reacciones es un grafo bipartito dirigido en el que los nodos representan, respectivamente, moléculas y reglas de reacción, mientras que las aristas están ponderadas por coeficientes estequiométricos. Además, cabe señalar que una red de reacciones definida de este modo, con coeficientes estequiométricos enteros, es equivalente a una red de Petri (Petri, 1962).

#### Ejemplo 1.1. Red de reacciones con cinco especies y ocho reacciones.

Existen cinco especies moleculares  $\mathcal{M} = \{\text{agua, luz, planta, semilla, suelo}\}$ , que interactúan según las siguientes reacciones (o reglas de reacción):

$$\mathcal{R} = \left\{ \begin{array}{l} r_1 : \emptyset \xrightarrow{k_1} \text{agua}, \\ r_2 : \emptyset \xrightarrow{k_2} \text{luz}, \\ r_3 : \text{agua} + \text{luz} + \text{semilla} + \text{suelo} \xrightarrow{k_3} \text{planta} + \text{suelo}, \\ r_4 : \text{agua} + \text{luz} + \text{planta} + \text{suelo} \xrightarrow{k_4} \text{planta} + \text{suelo} + \text{semilla}, \\ r_5 : \text{agua} \xrightarrow{k_5} \emptyset \\ r_6 : \text{planta} \xrightarrow{k_6} \emptyset \\ r_7 : \text{semilla} + \text{agua} \xrightarrow{k_7} \emptyset \\ r_8 : \text{luz} \xrightarrow{k_8} \emptyset \end{array} \right\},$$

La representación gráfica de  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R} \rangle$  de ejemplo se presenta en la Figura 1.1.

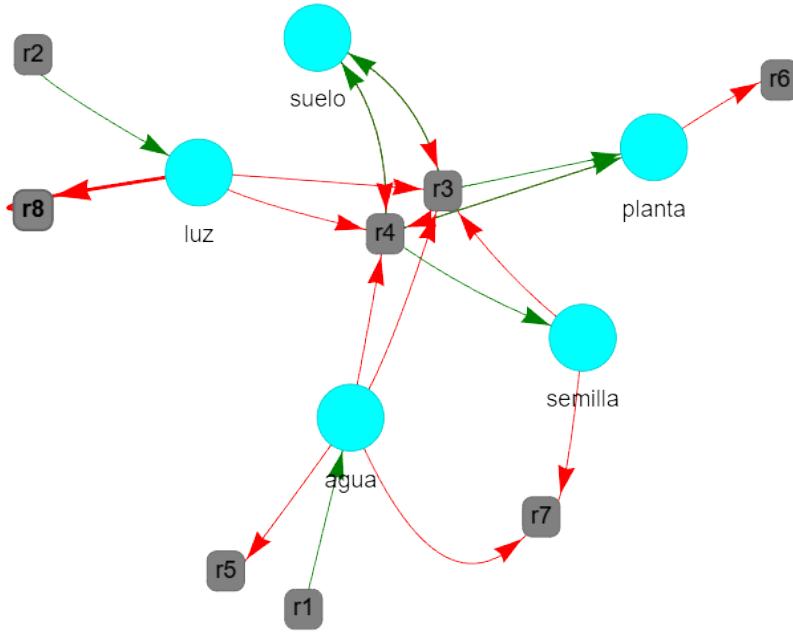


Figura 1.1: Visualización de la Red de reacciones del ejemplo 1.1.

Después de definir y ejemplificar una RN, cabe destacar que algunas reacciones pueden ocurrir con más frecuencia que otras. La especificación particular de la frecuencia en que ocurren las reacciones en una RN se denomina proceso de reacción, o proceso. En el modelamiento de RN se expresa como  $\mathbf{v}$  y suele denominarse vector de proceso. Este concepto será revisado posteriormente en más detalle para vincular la ocurrencia de las reacciones a un nivel algebraico, con  $\mathbf{v}$  como un vector, versus un nivel dinámico, con  $\mathbf{v}$  como una función del estado del sistema.

### Propiedades relacionales

Existen propiedades de una red que se basan solamente en las relaciones de producción entre las especies, sin considerar la cantidad de especies envueltas en cada reacción (también conocido como estequiometría).

En particular, para cada  $r \in \mathcal{R}$  se puede definir  $\text{supp}(r)$  como el conjunto de reactantes (soporte) y  $\text{prod}(r)$  como el conjunto de productos de  $r$ .

Es importante que ciertos conjuntos de especies  $X \subseteq \mathcal{M}$  pueden cumplir propiedades interesantes en el modo en que los reactantes y productos de sus reacciones se relacionan. Por esto, se define  $\mathcal{R}_X$  como el conjunto de reacciones que se activan por  $X$ .

**Definición 1.2.** Sea  $X \subseteq \mathcal{M}$ . Se define  $\mathcal{R}_X$  como el conjunto de todas las reacciones  $r \in \mathcal{R}$  tal que  $\text{supp}(r) \in X$ .

Notar que  $\langle X, \mathcal{R}_X \rangle$  es una sub-red de reacciones que representa la situación en que sólo las especies en  $X$  están presentes.

Para simplificar las próximas definiciones, introducimos la siguiente notación

$$\begin{aligned}\text{supp}(\mathcal{R}_X) &= \bigcup_{r \in \mathcal{R}_X} \text{supp}(r) , \\ \text{prod}(\mathcal{R}_X) &= \bigcup_{r \in \mathcal{R}_X} \text{prod}(r) .\end{aligned}\tag{1.1}$$

**Definición 1.3. Cerrado:**  $X \subseteq \mathcal{M}$  es cerrado si y solo si  $\text{prod}(\mathcal{R}_X) \subseteq X$ .

Notar que cuando  $X$  no es cerrado, su conjunto de reacciones activa nuevas especies  $s \notin X$  al sistema. Este mecanismo genera dos efectos en cascada:

- Las reacciones en  $\mathcal{R}_{X \cup \{s\}}$  no contenidas en  $\mathcal{R}_X$  pasan a estar disponibles.
- Los nuevos procesos habilitados pueden incorporar especies adicionales  $s' \notin X \cup \{s\}$ .

Cuando  $\mathcal{M}$  es finito, este proceso recursivo continúa hasta alcanzar un conjunto  $X^*$  donde  $X^*$  es cerrado, estableciendo así clausura estructural.

**Definición 1.4.** Sea  $X \subseteq \mathcal{M}$ . Se define  $GCL(X)$  como el conjunto cerrado de cardinalidad mínima que contiene a  $X$ .

**Lema 1.1.** Si  $\mathcal{M}$  es finito,  $GCL(X)$  es único para todo  $X \subseteq \mathcal{M}$ .

Desde ahora asumiremos que el conjunto  $\mathcal{M}$  es finito.

**Definición 1.5. Semi-automantención:**

$X \subseteq \mathcal{M}$  es semi-automantenido si y solo si  $\text{supp}(\mathcal{R}_X) \subseteq \text{prod}(\mathcal{R}_X)$ .

Análogamente al cierre estructural, la evolución de una red de reacciones tiende hacia conjuntos estructuralmente semi-automantidos. Cuando un conjunto  $X$  no cumple esta propiedad, existen procesos donde los reactantes consumidos por sus reacciones no son reuestos mediante otras reacciones del mismo proceso.

Este desbalance genera un consumo neto de las especies no producidas, las cuales se agotan progresivamente mediante los procesos activos en la red. La dinámica persiste hasta alcanzar un conjunto  $X^*$  donde

- No se crean nuevas especies de las reacciones (clausura).

- Toda especie consumida por alguna reacción es producida por otra reacción (semi-automantención).

Estos conjuntos, cerrados y semi-automantenidos se denominan semi-organizaciones, y computacionalmente hablando son fáciles de obtener. Sin embargo, que un conjunto de especies sea semi-organización no asegura que la producción compense el consumo en una dinámica de las especies en el tiempo.

Consideré el ejemplo  $\mathcal{R} = (a \rightarrow b, 2b \rightarrow a)$ . En este caso  $X = \{a, b\}$  es cerrado y semi-automantenido y por lo tanto una semi-organización, pero claramente no es posible sostener este conjunto de especies en el tiempo, pues el consumo de  $a$  en la primera reacción no es compensable con su producción en la segunda reacción, que utiliza  $2b$ .

### Propiedades Estequiométricas

Las propiedades estequiométricas precisan cómo se representan las reacciones y los procesos, y permiten expresar la productividad del sistema utilizando herramientas del álgebra lineal.

Una reacción  $r_i \in \mathcal{R}$  corresponde a

$$r_i = a_{i1}s_1 + \dots + a_{im}s_m \xrightarrow{k_i} b_{i1}s_1 + \dots + b_{im}s_m, \quad (1.2)$$

donde  $a_{ij}, b_{ij} \in \mathbb{N}_0$ , para  $i = \{1, \dots, n\}$  y  $j = \{1, \dots, m\}$ . Notar que  $\text{supp}(r_i)$  ( $\text{prods}(r_i)$ ) corresponde al conjunto de especies  $\{s_j\}$  tal que  $a_{ij} > 0$  ( $b_{ij} > 0$ ).

**Definición 1.6. Matriz estequiométrica:** matriz que describe cuantitativamente los cambios en las concentraciones de las especies debido a la ocurrencia de las reacciones.

Definiremos la matriz estequiométrica  $\mathbf{S} = (s_{ij})$  como la  $n \times m$  matriz asociada a la  $RN = \langle \mathcal{M}, \mathcal{R} \rangle$ .

$$s_{ij} = b_{ij} - a_{ij}, \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \text{ y } \forall j \in \{1, \dots, m\}, \quad (1.3)$$

donde  $s_{ij}$  representa la cantidad neta de especies moleculares de un tipo  $s_i$  producida por la reacción  $r_n$  ( $s_{ij}$  siendo negativo si la molécula  $s_i$  es consumida en la reacción  $r_n$ ) del conjunto  $\mathcal{M}$ .

Por lo tanto, en general, la matriz estequiométrica toma la forma:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1m} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{n1} & s_{n2} & \cdots & s_{nm} \end{pmatrix}.$$

A su vez, la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  se define como la diferencia de las matrices  $\mathbf{B}$  y  $\mathbf{A}$  con

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} \text{ y } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix},$$

donde

- $n$  es el número total de especies en el sistema.
- $m$  es el número total de reacciones en el sistema.
- $s_{ij} \in \mathbb{N}_0$  representa el número de moléculas de la especie  $s_i$  en la reacción  $r_j$ .
- $a_{ij} \in \mathbb{N}_0$  representa el número de moléculas de la especie  $s_i$  en la reacción  $r_j$  en el lado izquierdo de la ecuación de reacción (soporte).
- $b_{ij} \in \mathbb{N}_0$  representa el número de moléculas de la especie  $s_i$  en la reacción  $r_j$  en el lado derecho de la ecuación de reacción (productos).

### Ejemplo 1.2. Cálculo de una matriz estequiométrica en RN.

Consideraremos la  $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R} \rangle$  del ejemplo 1.1 para construir su matriz estequiométrica. Tomamos como referencia a  $r_3$  y aplicamos la ecuación (1.3). De lo que, obtenemos:

$$\begin{aligned} s_{31} &= b_{31} - a_{31} = 0, \\ s_{32} &= b_{23} - a_{32} = 0, \\ s_{33} &= b_{33} - a_{33} = -1, \\ s_{34} &= b_{34} - a_{34} = 1, \\ s_{35} &= b_{35} - a_{35} = 0, \\ s_{36} &= b_{36} - a_{36} = 0, \\ s_{37} &= b_{37} - a_{37} = -1, \\ s_{38} &= b_{38} - a_{38} = 0. \end{aligned}$$

Desarrollamos de la misma forma para las restantes  $r_i$  para obtener la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  del ejemplo 1.1,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \quad (1.4)$$

**Definición 1.7. Estado:** es un vector de coordenadas no negativas que corresponde al número (o concentración) de especies  $s_j$  presentes en la red,  $\forall j \in \{1, 2, \dots, m\}$ .

$$\mathbf{x} = (\mathbf{x}[1], \mathbf{x}[2], \dots, \mathbf{x}[m]) \quad \forall \mathbf{x}[j] \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m . \quad (1.5)$$

**Definición 1.8. Imagen de la Matriz  $\mathbf{A}$ :** es el conjunto de todos los vectores que se pueden obtener como combinación lineal de las columnas de la matriz  $\mathbf{A}$ . Esto incluye todos los posibles resultados de multiplicar  $\mathbf{A}$  por cualquier vector de entrada.

$$\text{Im}(\mathbf{A}) \equiv \{\mathbf{y} : \mathbf{y} = \mathbf{Ax}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^m\} . \quad (1.6)$$

**Nota 1.1.** En el contexto de sistemas de redes de reacciones, representa todas las combinaciones posibles de cambios en las concentraciones de las especies químicas. Esta imagen describe cómo las reacciones afectan las concentraciones de las especies en el sistema.

**Definición 1.9. Proceso:** es un vector que representa la ocurrencia de cada reacción  $r_i$  en la red de reacciones,  $\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$ ,

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v}[1], \mathbf{v}[2], \dots, \mathbf{v}[n]) \quad \text{con } \mathbf{v}[i] \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n . \quad (1.7)$$

**Definición 1.10. Flujo:** es un vector que representa la velocidad o tasa de ocurrencia de la reacción  $r_i$  en la red,  $\forall i \in \{1, 2, \dots, n\}$ .

$$k_i = (k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{R}_+^n . \quad (1.8)$$

Podemos observar que, para cualquier conjunto de especies  $X \subseteq \mathcal{M}$ , un proceso  $\mathbf{v}$  aplicado a  $X$  sólo puede contener reacciones de  $\mathcal{R}_X$ .

En general, podemos calcular el estado  $\mathbf{x}_v$  de la red de reacción asociado a un estado  $\mathbf{x}$  y a un proceso  $\mathbf{v}$  mediante la siguiente ecuación:

$$\mathbf{x}_v = \mathbf{x} + \mathbf{Sv}\Delta t . \quad (1.9)$$

donde  $\mathbf{x}$  es el estado del sistema (cantidad o concentración de cada especie) en algún tiempo  $t_0$ ,  $\mathbf{v}$  es el vector de proceso, donde cada componente  $\mathbf{v}[i]$  indica cuánto ocurre la reacción  $r_i$  entre  $t_0$  y un tiempo futuro  $t_1$ .  $\mathbf{Sv}$  representa entonces el vector de producción de especies generado por la aplicación de la matriz  $\mathbf{S}$  sobre el proceso  $\mathbf{v}$ , y  $\mathbf{x}_v$  representa el nuevo estado del sistema en tiempo  $t_1$ .

Esta formalización no solo permite la representación de la evolución temporal de las especies, como un cambio discreto en el estado del sistema debido a un proceso  $\mathbf{v}$ , aplicando la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$ , sino que también simplifica la identificación de puntos fijos y comportamientos dinámicos estables, lo que es fundamental para entender la sostenibilidad y el automantenimiento de las especies persistentes dentro de la red.

**Definición 1.11. Automantención:**  $X \subseteq \mathcal{M}$  es automantenido si y solo si existe  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n$  con  $\mathbf{v}[i] > 0$  para todo  $r_i \in \mathcal{R}_X$  y  $\mathbf{v}[i] = 0$  para todo  $r_i \notin \mathcal{R}_X$  que cumple

$$\mathbf{x}_v[j] \geq \mathbf{x}[j], \text{ para todo } s_j \in X , \quad (1.10)$$

o equivalentemente  $\mathbf{Sv} \geq 0$ .

### Estudiando la Dinámica

Para determinar la dinámica de sistemas, consideramos la evolución del estado del sistema en un intervalo de tiempo. La ecuación (1.9) describe cómo el estado del sistema en el tiempo  $t_1$  se obtiene sumando al estado inicial  $\mathbf{x}(t_0)$  el efecto de las reacciones representadas por la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  multiplicada por el vector de proceso  $\mathbf{v}$ . Al considerar un intervalo de tiempo infinitesimal, podemos expresar la variación del estado como  $\Delta t = t_1 - t_0$  y, al dividir ambos lados de la ecuación por  $\Delta t$ , obtenemos la tasa de cambio del estado, que se define como

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}(t_1) - \mathbf{x}(t_0)}{\Delta t} \quad (1.11)$$

Por lo tanto, cuando  $\Delta t$  tiende a 0, la ecuación (1.9) se transforma en (1.12), donde  $\mathbf{Sv}$  representa el vector de producción que cuantifica la frecuencia de las reacciones en la red, estableciendo así la relación entre la evolución temporal del estado del sistema y las interacciones que ocurren en él.

**Definición 1.12. Dinámica del sistema:** describe la evolución temporal del estado del sistema en una red de reacción, donde la velocidad de cambio del estado  $\mathbf{x}$  está determinada por la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  y el vector de proceso  $\mathbf{v}$ , es decir, el vector de producción  $\mathbf{Sv}$ ,

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{S}\mathbf{v} . \quad (1.12)$$

En la dinámica del sistema, el vector  $\mathbf{v}$  es una representación dinámica que captura cómo las interacciones entre las especies y las constantes de velocidad determinan la evolución temporal del sistema, por medio de la siguiente formalización:

$$\mathbf{v} = k \circ f(\mathbf{x}) , \quad (1.13)$$

donde  $k$  es el vector de flujo y  $f(\mathbf{x})$  es una función que describe cómo las tasas de reacción dependen de las concentraciones de las especies en el estado  $\mathbf{x}$ .

Por tanto, cada componente  $\mathbf{v}[i]$  puede ser modelado mediante una función que depende de las concentraciones de las especies y de las constantes de velocidad  $k_i$ :

$$\mathbf{v}[i] = k_i \circ f_i(\mathbf{x}) . \quad (1.14)$$

**Nota 1.2.** *La dependencia de  $\mathbf{v}$  respecto de  $\mathbf{x}$  se debe a que las velocidades de reacción son funciones de las concentraciones de las especies, que determinan la cantidad de reactivos disponibles para reaccionar y a que  $k$  influye en la rapidez con la que se produce el cambio en las concentraciones de las especies.*

El producto denotado por “ $\circ$ ” corresponde a un producto componente a componente, también conocido como producto de Hadamard (Horn and Johnson, 1991). Este producto se define entre dos vectores del mismo tamaño y genera un nuevo vector cuyas entradas son el producto de las entradas correspondientes de los vectores originales:

$$\mathbf{v} = (\mathbf{v}[i]) = k \circ f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} k_1 f_1(\mathbf{x}) \\ k_2 f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ k_n f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} ,$$

$$\mathbf{v}[i] = k_i \cdot f_i(\mathbf{x}) \text{ con } i = \{1, 2, \dots, n\} .$$

Este tipo de producto es ampliamente utilizado en modelos de cinética de masas, donde cada componente de  $\mathbf{v}$  representa la velocidad de una reacción específica, determinada por la constante de velocidad  $k_i$  y una función  $f_i(\mathbf{x})$  que describe la dependencia de dicha reacción respecto de las concentraciones de las especies involucradas.

**Nota 1.3.** *Existe un vector de flujos positivo que garantiza el mantenimiento de las concentraciones de todas las especies del conjunto. Así, el núcleo positivo se sostiene de manera estable sin intervención externa.*

**Ejemplo 1.3.** *Simulación dinámica de una comunidad ecológica modelada por RN.*

Para ejemplificar la dinámica de un sistema, utilizaremos el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs) que describe la ecuación (1.12) y la representación dinámica de  $\mathbf{v}$  presentada en (1.13) aplicada a la RN 1.1, en consideración de la ley cinética de acción de masas, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \dot{[agua]} &= k_1 - k_3[agua][luz][semilla][suelo] - k_4[agua][luz][suelo][planta] \\
 &\quad - k_5[agua] - k_7[agua][semilla] , \\
 \dot{[luz]} &= k_2 - k_3[agua][luz][semilla][suelo] - k_4[agua][luz][suelo][planta] \\
 &\quad - k_8[luz] , \\
 \dot{[semilla]} &= - k_3[agua][luz][semilla][suelo] + k_4[agua][luz][suelo][planta] \\
 &\quad - k_7[agua][semilla] , \\
 \dot{[suelo]} &= 0 , \\
 \dot{[planta]} &= k_3[agua][luz][semilla][suelo] - k_6[planta] .
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

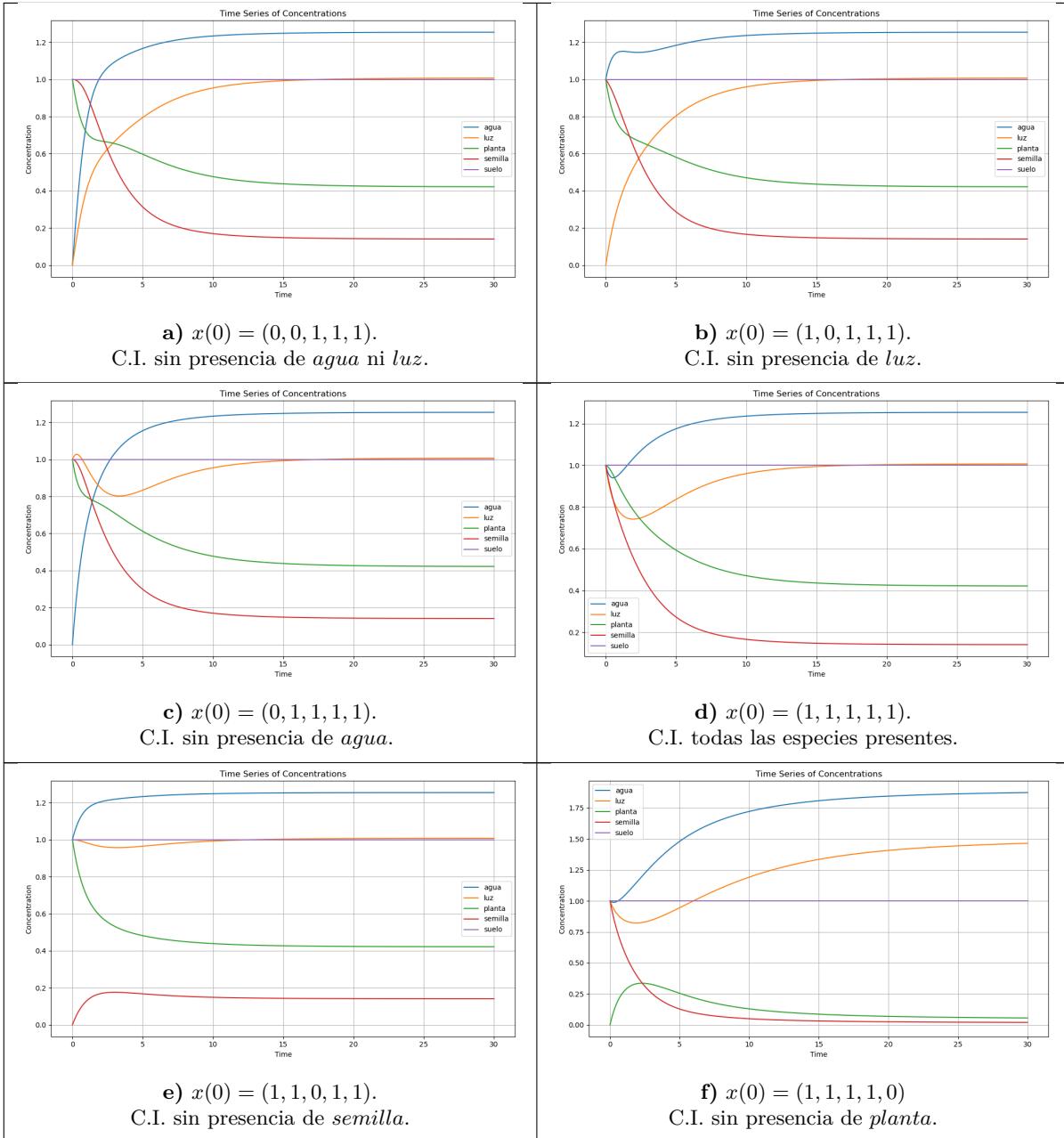
A partir del sistema de ecuaciones diferenciales (ODEs) definido en (1.15), y considerando un vector de flujo específico  $k$  que representa valores plausibles para las tasas de interacción en la red de reacciones ejemplificada en (1.1), procedimos a realizar una serie de simulaciones dinámicas. Los parámetros utilizados en estas simulaciones, incluyendo el vector de flujo y las condiciones iniciales, se detallan en el cuadro 1.1.

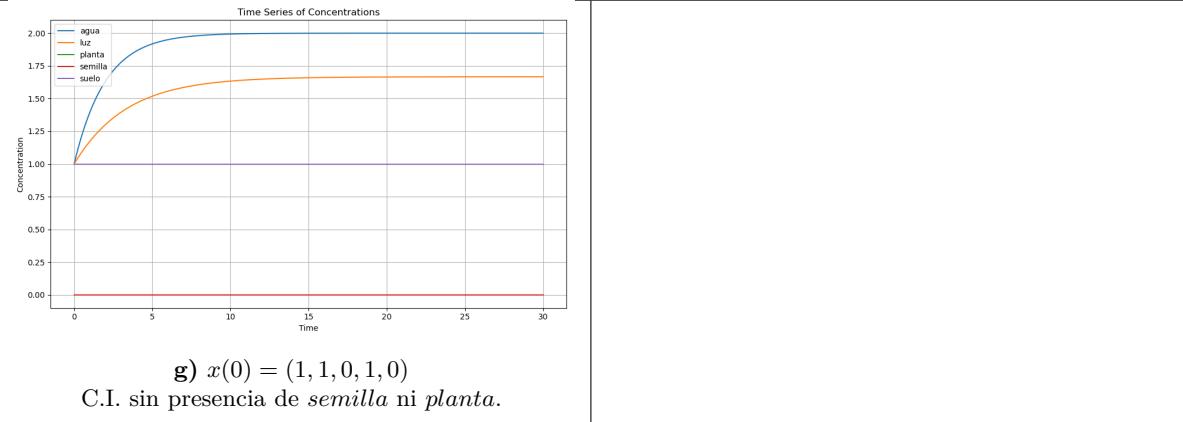
Con base en esta configuración, ejecutamos una batería de simulaciones bajo distintas condiciones iniciales (C.I.), con el objetivo de observar la evolución temporal del sistema en escenarios diversos. Cada simulación se presenta en el cuadro 1.2, donde se muestran las trayectorias dinámicas correspondientes. Debajo de cada gráfica se indica explícitamente la condición inicial utilizada, acompañada de una interpretación cualitativa del estado inicial del sistema. Este análisis permite visualizar cómo diferentes configuraciones de partida pueden influir en el comportamiento dinámico global de una comunidad ecológica modelada.

Descripción	Parámetro
Vector de flujo	$k = (1.0, 0.5, 0.5, 0.2, 0.5, 0.5, 0.1, 0.3)$
Condiciones iniciales	$\mathbf{x}(0) = (agua(0), luz(0), semilla(0), suelo(0), planta(0))$

Cuadro 1.1: Parámetros utilizados para las simulaciones dinámicas de la RN en el ejemplo 1.1.

Cuadro 1.2: Simulaciones dinámicas para distintas C.I.s del sistema de EDOs (1.15). Elaboración propia en *Python<sup>TM</sup>*, librería pyCOT (Veloz, 2025).





Para cada caso de C.I. en el cuadro 1.2 concluimos, en relación con la persistencia de las especies en el largo plazo, que:

Cuadro 1.3: Resumen de conclusiones de las simulaciones dinámicas en el cuadro 1.2.

**Condiciones iniciales a), b), c), d), e) y f):**

Estado final =  $(\text{agua}, \text{luz}, \text{semilla}, \text{suelo}, \text{planta})$

**Condición inicial g):**

Estado final =  $(\text{agua}, \text{luz}, 0, \text{suelo}, 0)$ ,

El sistema colapsa a las especies con ingreso constante (*agua*, *luz*) y *suelo*, especie que sola no activa ninguna reacción por lo que permanece constante, debido a que tampoco se consume.

**Definición 1.13.** *Formalización de la dinámica de concentraciones en sistemas reacción-difusión:*

La dinámica espacio-temporal de las concentraciones de las especies químicas (o ecológicas) puede modelarse mediante una ecuación de tipo reacción-difusión. En su forma general para cada especie  $c_i(\mathbf{x}, t)$ , se expresa como:

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{v}(c(\mathbf{x}, t)) + d_i \frac{\partial^2 c_i(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2} . \quad (1.16)$$

En esta ecuación, cada uno de los términos representa un mecanismo fundamental que rige la evolución del sistema. Donde:

$c_i(\mathbf{x}, t)$	es la concentración de la especie $i$ -ésima en la posición espacial $\mathbf{x} \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ y en el tiempo $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ .
$\frac{\partial c_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$	es la derivada temporal de la concentración, que describe la tasa de cambio de $c_i$ en el tiempo.
$\mathbf{S}$	es la matriz estequiométrica de dimensión $m \times r$ , donde $m$ es el número de especies y $r$ el número de reacciones. Cada entrada $S_{ij}$ representa el cambio neto en la especie $i$ debido a la reacción $j$ .
$\mathbf{v}(c(\mathbf{x}, t))$	es el vector de velocidades de reacción evaluado en las concentraciones locales $c(\mathbf{x}, t) = (c_1(\mathbf{x}, t), \dots, c_m(\mathbf{x}, t))$ , que incorpora la dinámica no lineal del sistema químico o ecológico, generalmente modelado mediante leyes de acción de masas u otras cinéticas.
$d_i$	es el coeficiente de difusión de la especie $i$ , que mide su capacidad de dispersarse en el espacio.
$\frac{\partial^2 c_i(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}^2}$	es el operador de Laplace aplicado a $c_i$ , que representa el flujo difusivo neto bajo el supuesto de difusión isotrópica homogénea.

Este concepto corresponde a la combinación de la dinámica temporal de las concentraciones de especies debido a reacciones químicas y el efecto de la difusión de las especies en el espacio. Esta ecuación es fundamental para entender cómo las interacciones entre especies y los efectos de su difusión influyen en la persistencia y el comportamiento a largo plazo de los sistemas biológicos. Si bien la sostenibilidad ecológica puede desarrollarse en espacios homogéneos, la inclusión del término de difusión resulta especialmente pertinente cuando se modelan sistemas con heterogeneidad espacial, dispersión de organismos o gradientes ambientales. En estos casos, los efectos espaciales pueden modular significativamente la estabilidad, coexistencia y resiliencia de las especies, extendiendo el alcance del análisis más allá de los modelos localmente acoplados. Por lo tanto, permite capturar tanto la dinámica local de las interacciones (a través del término de reacción) como la propagación espacial de las especies (a través del término de difusión), lo cual es relevante para modelar comunidades ecológicas complejas con heterogeneidad espacial.

**Definición 1.14. *Persistencia:*** Se refiere a la capacidad de un conjunto de especies para mantenerse en el sistema a lo largo del tiempo. Esta definición establece que un conjunto es persistente si puede ser observado de manera continua en el tiempo, lo que implica que no se extinguirá.

$$X \subseteq X \text{ es persistente si } F(X_\epsilon, \delta) > 0 \text{ para todo } \epsilon > 0 \text{ y } \delta > 0 , \quad (1.17)$$

donde

$$F(X_\epsilon, \delta) = \limsup_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \int_{\Omega} \{ \mathbf{x} \in \Omega : c(\mathbf{x}, t) \in X_{\epsilon, \delta} \} d\mathbf{x} dt > 0 , \quad (1.18)$$

y

$X \subseteq X$  indica que estamos interesados en un grupo específico de especies dentro del sistema.

$F(X_\epsilon, \delta)$  es la frecuencia de ocurrencia, es decir, la medición de cuán a menudo las concentraciones de las especies en el conjunto  $\mathbf{x}$  aparecen en el sistema a lo largo del tiempo. En el detalle de la ecuación (1.18). Se define como el límite superior de la proporción de tiempo en el que las concentraciones de las especies están dentro del vecindario definido por  $\epsilon$  y  $\delta$ .

$\epsilon > 0$  representa un umbral positivo que se utiliza para definir un vecindario alrededor de las concentraciones de las especies.

$\delta > 0$  define un rango en el que se considera que las concentraciones de las especies son relevantes para la persistencia.

### ¿Cómo se pueden utilizar las propiedades relacionales y estequiométricas para comprender la dinámica del sistema?

En el contexto de las redes de reacción, la interconexión entre los distintos niveles de descripción se establece a través de un marco que los integra; cada una de las descripciones aporta una perspectiva única sobre el comportamiento del sistema. Por lo que, integra la abstracción, la dinámica y la representación estructural, permitiendo un análisis coherente y riguroso del comportamiento de sistemas complejos. Este enfoque jerárquico, desde lo relacional a lo dinámico, no solo proporciona una comprensión más profunda de las interacciones en el sistema, sino que también permite la formulación de hipótesis y la realización de simulaciones que pueden ser validadas experimentalmente.

Inicialmente, describimos las propiedades relacionales que refiere a la representación abstracta de las interacciones entre especies, donde se utilizan grafos o matrices para ilustrar las relaciones de producción y consumo. Este nivel permite identificar patrones y organizaciones dentro del sistema sin entrar en detalles sobre las concentraciones o las tasas de reacción, proporcionando una visión general de la estructura del sistema.

Luego incorporamos propiedades estequiométricas para cuantificar relaciones de productividad colectivas para conjuntos de especies. Aquí, la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  juega un papel fundamental, ya que describe cómo las especies son consumidas y producidas en cada reacción. Esta descripción permite establecer una base para el análisis de la dinámica del sistema,

ya que proporciona la información necesaria para entender cómo las interacciones afectan las concentraciones de las especies a lo largo del tiempo.

En último lugar, presentamos la Descripción Cinética que se relaciona con la dinámica temporal del sistema, donde se modelan las tasas de cambio de las concentraciones de las especies mediante ecuaciones diferenciales. La ecuación de dinámica de sistemas (1.12) que conecta estos niveles al relacionar la tasa de cambio del estado del sistema ( $\dot{\mathbf{x}}$ ) con la matriz estequiométrica  $\mathbf{S}$  y el vector de proceso  $\mathbf{v}$ , que contiene la información sobre las reacciones y sus velocidades. Este nivel permite un análisis detallado de cómo las concentraciones cambian en función del tiempo y de las interacciones que ocurren en el sistema.

## Teoría de Organizaciones Químicas

A continuación, desarrollamos cómo es el vínculo entre la relación Estructural de la red de reacciones y su Dinámica, para lo cual introducimos los conceptos principales de la Teoría de la Organización Química.

La Teoría de Organización Química (COT)(Dittrich and di Fenizio, 2007) se fundamenta en el concepto de que las interacciones entre especies químicas pueden ser descritas mediante redes de reacciones, donde cada reacción representa un proceso de transformación de reactivos en productos. Esta teoría se formaliza a través de un conjunto de definiciones y ecuaciones que describen cómo las especies se organizan y mantienen en equilibrio dentro de un sistema. Además, se centra en la identificación de configuraciones persistentes de especies que pueden coexistir y ser sostenidas por las reacciones de la red (organizaciones). Estas configuraciones persistentes de especies se caracterizan por la condición de equilibrio caracterizada por el concepto de automantención.

En la ecuación (1.10), la producción neta de cada especie es mayor o igual a cero, lo que implica que las tasas de producción y consumo permiten que las especies en la organización coexistan y eventualmente se incrementen.

En este contexto, COT se ocupa de las subredes de reacciones  $(X, \mathcal{R}_X)$  contenidas en la red  $(\mathcal{M}, \mathcal{R})$  que son cerradas y automantenidas. A estas subredes se les llama organización química.

**Nota 1.4.** *Una organización representa una combinación de especies moleculares que puede persistir en el largo plazo. Un conjunto de moléculas no cerrado o no automantenido no existiría a largo plazo y no existiría durante mucho tiempo, porque aparecerán nuevas moléculas y desaparecerán otras, respectivamente.*

Para formalizar la intuición anterior, requerimos introducir algunos conceptos que vinculan el estado del sistema con las especies cuya concentración es estrictamente positiva, es decir, aquello que está y define el subespacio del espacio de fase donde se ubica el estado del sistema.

**Definición 1.15. Abstracción:** es la representación simplificada de un estado del sistema, donde se identifican las especies presentes y se ignoran los detalles específicos de sus cantidades.

Sea  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$  un sistema dinámico y  $\mathbf{x}$  un estado en  $X$ . Una **abstracción**  $\phi$  de un estado  $\mathbf{x}(t)$  se define como el conjunto de especies con concentración mayor que un umbral  $\Theta > 0$  en ese estado, y se denota como:

$$\phi : X \mapsto \mathcal{P}(\mathcal{M}), \quad \Theta > 0, \quad \phi(\mathbf{x}) = \{s_i \mid \mathbf{x}[i] > \Theta, i \in \mathcal{M}\} . \quad (1.19)$$

Esta noción permite conectar la representación del sistema con su comportamiento dinámico, ya que la abstracción proporciona una forma de identificar las instancias de un conjunto de especies  $X$  en un estado dado. Así, la abstracción juega un papel crucial en la identificación de organizaciones dentro de la red de reacción, facilitando el análisis de la estabilidad y la dinámica del sistema.

**Definición 1.16. Instancia:** representación específica de un conjunto de especies en un estado particular del sistema. Una instancia se define como un estado  $\mathbf{x}(t)$  que corresponde a un conjunto de especies  $X$  si la abstracción de  $\mathbf{x}(t)$  es igual a  $X$ .

$$\mathbf{x}(t) \text{ es una instancia de } X \iff \phi(\mathbf{x}(t)) = X , \quad (1.20)$$

donde  $\phi(\mathbf{x}(t))$  es la función de abstracción que identifica las especies presentes en el estado  $\mathbf{x}(t)$ .

Este concepto es fundamental para el análisis de la dinámica de sistemas, ya que permite identificar y estudiar las configuraciones específicas de especies que pueden ser observadas en el tiempo. Al considerar las instancias, se pueden explorar las propiedades de persistencia y automantenimiento de las organizaciones dentro de la red de reacción, facilitando así una comprensión más profunda de su comportamiento dinámico.

Por consiguiente, la relación entre Estructura y Dinámica en el contexto de redes de reacción es fundamental para comprender la dinámica y la persistencia de los sistemas biológicos y químicos modelados a través de estas redes. Para clarificar esto, introduciremos las siguientes definiciones.

**Definición 1.17. Punto fijo:**  $\mathbf{x}^*$  es un punto fijo de un sistema dinámico y se define como un vector de concentraciones de especies en el equilibrio.

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0 , \quad (1.21)$$

donde  $\dot{\mathbf{x}}$  es el vector de tasas de cambio de las concentraciones de las especies y  $\mathbf{f}(\mathbf{x})$  es una función que describe la dinámica del sistema. En este contexto,  $\mathbf{x}^*$  representa un estado de equilibrio. En consecuencia, un punto fijo se define como un estado del sistema en el cual las

concentraciones de las especies no cambian con el tiempo, es decir, es un estado de equilibrio donde la tasa de producción y consumo de cada especie se iguala.

La conexión entre estos conceptos radica en que las instancias de organizaciones pueden ser vistas como configuraciones que, bajo ciertas condiciones, pueden alcanzar un punto fijo. Es decir, una instancia de organización puede ser un punto fijo si las reacciones que la componen permiten que las tasas de cambio de las especies involucradas persistan en el tiempo.

**Teorema 1.1.** *Si  $\mathbf{x}$  es un punto fijo del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias 1.12, es decir,  $\mathbf{Sv}(\mathbf{x}, k) = \mathbf{0}$ , entonces la abstracción  $\phi(\mathbf{x})$  es una organización.*

Los puntos fijos implican las instancias dinámicamente estables más simples de un sistema de reacción, y son cruciales para determinar las características más importantes de la dinámica de un sistema. Así, el Teorema 1.1 proporciona un vínculo entre el comportamiento a largo plazo de un sistema de reacción y su red de reacciones subyacente. En palabras sencillas, demuestra que una condición necesaria para ser un punto fijo a nivel cinético es ser una organización a nivel estequiométrico (y por tanto una semi-organización a nivel relacional). Además, el Teorema 1.1 se extiende a otros comportamientos asintóticos estables como órbitas periódicas y ciclos límite. Además de estos resultados, se han explorado las condiciones necesarias para la existencia de vectores de flujo adecuados, y se han presentado estudios algorítmicos relativos al cálculo de las organizaciones de una RN.

Dichos resultados han sido recientemente generalizados a sistemas de reacción difusión Peter et al. (2021), utilizando el marco descrito. Sin embargo, no nos expandiremos en este tema pues se escapa de los límites de este trabajo.

En conclusión, los términos y definiciones presentados anteriormente son fundamentales para establecer un marco matemático que permite concluir que la relación entre la estructura de la red de reacciones y el comportamiento dinámico del sistema se convierte en una herramienta poderosa para el análisis de la sostenibilidad en sistemas ecológicos. Este enfoque se alinea con los trabajos de Stephan Peter y Peter Dittrich, quienes han explorado la teoría de organizaciones químicas y su aplicación en la dinámica de sistemas complejos (Dittrich and di Fenizio, 2007; Peter, 2008). La identificación de organizaciones en redes de reacciones proporciona una base sólida para el modelado y la predicción de comportamientos a largo plazo en sistemas ecológicos, lo que es esencial para el desarrollo de estrategias de sostenibilidad efectivas.

### 1.1.2. Ejemplo de cálculo de organizaciones de una red de reacciones

Para calcular las organizaciones de la red de reacciones del ejemplo 1.1, primero debemos identificar los conjuntos cerrados de especies que pueden ser automantenidos en equilibrio a

través de las reacciones disponibles. En este contexto, una organización se refiere a un conjunto de especies que pueden coexistir y ser sostenidas por las reacciones de la red.

**Definición 1.18.** *Catalizador: es una especie que participa en alguna  $r_i$  de la red de reacciones de tal manera que se consume y se produce con un balance estequiométrico neto igual a cero. Sin embargo, de no estar presente como reactivo, dicha reacción no puede ser activada.*

En particular, en el ejemplo 1.1 encontramos dos catalizadores (o especies catalizadoras) *suelo* y *planta*. Por un lado, en  $r_3$  y  $r_4$  la especie *suelo* es un catalizador, ya que es un reactivo y, a su vez, un producto con la misma estequiometría. Además, sin su presencia, las reacciones no pueden ser activadas. Por otro lado, en  $r_4$  la especie *planta* es catalizadora.

**Nota 1.5.** *Una especie  $s_j$  donde  $j \in \{1, 2, \dots, m\}$  según la ecuación (1.2) puede ser, indistintamente, catalizadora en una reacción o reactivo (o producto) en otra reacción.*

### Caracterización de especies y reacciones de la RN.

Las especies involucradas en la red son:

- **Especies iniciales:** *agua, luz, semilla, suelo, planta.*
- **Especies generadas:** *planta, semilla.*
- **Especies catalizadoras:** *suelo, planta.*

### Análisis de las Reacciones

#### Reacciones de Producción

- $r_1$ : Introduce *agua* al sistema.
- $r_2$ : Introduce *luz* al sistema.
- $r_3$ : Consume *agua, luz, semilla* y *suelo*; produce *planta* y *suelo*.
- $r_4$ : Consume *agua, luz, planta* y *suelo*; produce *planta, suelo* y *semilla*.

#### Reacciones de Consumo

- $r_5$ : Consume *agua*. Representa la salida del sistema de esta especie.
- $r_6$ : Consume *planta*. Representa la muerte de esta especie.
- $r_7$ : Consume *semilla* y *agua*. Representa la muerte de la *semilla* por exceso de *agua*.
- $r_8$ : Consume *luz*. Representa la disipación en el sistema de esta especie.

## Determinación de Organizaciones

Para determinar las organizaciones ( $\mathcal{O}$ ), debemos buscar conjuntos cerrados estructuralmente de especies ( $C_i$ ) que puedan ser automantenidos en equilibrio. Esto implica que el consumo de las especies de  $C_i$  por las reacciones que estas especies activan, es decir,  $\mathcal{R}_{C_i}$  debe asegurar que se produzcan todas las especies en  $C_i$ .

### Determinación de los subconjuntos cerrados estructuralmente

Los conjuntos cerrados estructuralmente identificados son los siguientes:

1.  $C_0 = \{\emptyset\}$  , es cerrado trivialmente porque no contiene especies y no puede generar nuevas.
2.  $C_1 = \{agua, luz\}$  , es cerrado porque las reacciones que activan no generan ninguna nueva especie.
  - Detalle de determinación de si el conjunto es cerrado estructuralmente:
    - Reacciones que activan:  $r_1, r_2, r_5$  y  $r_8$
    - Productos que generan:  $\{agua, luz\}$

Por lo tanto, el conjunto  $\{luz, agua\}$  es cerrado porque todos los productos de las reacciones activas que activan están contenidos en el mismo conjunto.

Para los demás conjuntos solo presentamos los resultados. Sin embargo, es preciso realizar el mismo análisis.

3.  $C_2 = \{agua, luz, suelo\}$  ,
4.  $C_3 = \{planta, agua, luz\}$  ,
5.  $C_4 = \{semilla, agua, luz\}$  ,
6.  $C_5 = \{planta, agua, luz, semilla\}$  ,
7.  $C_6 = \{agua, luz, planta, semilla, suelo\}$  .

### Verificación de automantenimiento

Los conjuntos automantenidos, entre el conjunto de cerrados estructuralmente, son:

1.  $C_0 = \{\emptyset\}$  es automantenido, trivialmente, porque no contiene ninguna especie.
2.  $C_1 = \{agua, luz\}$  ,
  - Se encontró un vector de flujo  $v$  que satisface la condición de automantención. Es decir,  $v = (1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 1)$  tal que,  $Sv \geq 0$  para todas las especies en el conjunto).

Para los demás conjuntos solo presentamos los resultados. Sin embargo, es preciso realizar el mismo análisis.

3.  $C_2 = \{agua, luz, suelo\}$  ,
4.  $C_6 = \{agua, luz, planta, semilla, suelo\}$  .

### Organizaciones Identificadas

Las organizaciones químicas de la red son:

- $\mathcal{O}_0 = \{\emptyset\}$
- $\mathcal{O}_1 = \{agua, luz\}$
- $\mathcal{O}_2 = \{agua, luz, suelo\}$
- $\mathcal{O}_3 = \{agua, luz, semilla, planta, suelo\}$

#### 1.1.3. Teoría del orden y Representación visual de las Organizaciones

La teoría del orden es un área fundamental en la combinatoria y la matemática discreta que se ocupa de la relación de orden entre elementos de un conjunto. Esta teoría proporciona un marco conceptual para entender cómo se pueden organizar jerárquicamente diferentes estructuras, lo que resulta esencial en diversas aplicaciones, entre éstas la biomatemática.

Las siguientes definiciones se enmarcan en la teoría del orden (Stanley, 1997) y permiten visualizar, de forma simple, cómo se ordenan jerárquicamente las organizaciones. A través de estas definiciones, se busca establecer una base sólida que facilite la comprensión de las interacciones y relaciones entre los elementos en un sistema, lo cual es crucial para el análisis y modelado de fenómenos biológicos complejos.

En este contexto, se explorarán conceptos claves como conjuntos parcialmente ordenados, retículos y diagrama de Hasse que son fundamentales para el desarrollo de modelos matemáticos que reflejan la estructura jerárquica de las organizaciones biológicas. La comprensión de estas relaciones no solo es teórica, sino que también tiene implicaciones prácticas en la optimización de procesos biológicos, investigación biomédica, entre otras tantas.

**Definición 1.19.** *Conjunto parcialmente ordenado o poset:* es un par  $(P, \leq)$  donde  $P$  es un conjunto y  $\leq$  es una relación de orden parcial en  $P$ , es decir, una relación binaria que cumple las siguientes propiedades para todo  $a, b, c \in P$ :

1. *Reflexividad:*  $a \leq a$ .
2. *Antisimetría:* Si  $a \leq b$  y  $b \leq a$ , entonces  $a = b$ .

3. *Transitividad: Si  $a \leq b$  y  $b \leq c$ , entonces  $a \leq c$ .*

**Definición 1.20. Diagrama de Hasse:** en la teoría del orden, es un tipo de diagrama matemático utilizado para representar un conjunto parcialmente ordenado finito, en forma de un dibujo de su reducción transitiva.

Concretamente, para un conjunto parcialmente ordenado  $(S, \leq)$ , se representa cada elemento de  $S$  como un vértice en el plano y se dibuja un segmento de línea o curva que va hacia arriba desde un vértice  $x$  a otro vértice  $y$  siempre que  $y$  contenga a  $x$  (es decir, cuando  $x \neq y$ ,  $x \leq y$  y no existe un  $z$  distinto de  $x$  y  $y$  con  $x \leq z \leq y$ ). Estas curvas pueden cruzarse entre sí, pero no deben tocar ningún vértice salvo en sus extremos. Dicho diagrama, con vértices etiquetados, determina de manera única su orden parcial.

**Ejemplo 1.4. Ejemplo del Diagrama de Hasse.**

Considerando las organizaciones en (1.1.2) y la definición 1.20 generamos el Diagrama de Hasse correspondiente a la RN de ejemplo 1.1.

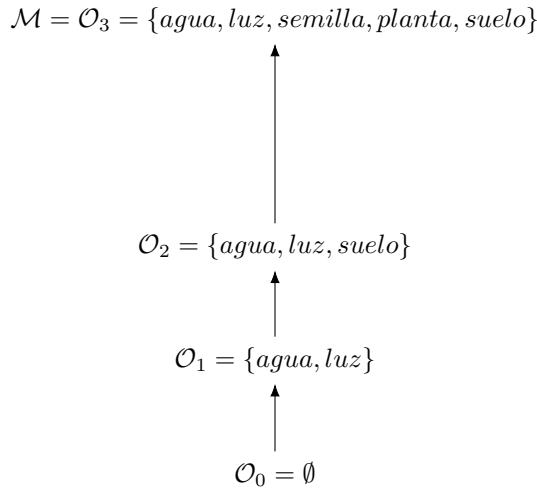


Figura 1.2: Diagrama de Hasse de las organizaciones de la red de reacciones 1.1.

**Nota 1.6.** La Figura 1.2 muestra la relación de inclusión entre las organizaciones. Por un lado, las flechas explícitas (hacia arriba) representan la relación de orden parcial por contención de conjuntos y por otro lado, la diferencia de extensión entre la fecha que va desde  $\mathcal{O}_1$  a  $\mathcal{O}_2$  y la fecha que va de  $\mathcal{O}_2$  a  $\mathcal{O}_3$  se vincula con la diferencia de cardinalidad de los conjuntos (complejidad).

La modelación por medio de redes de reacciones (RN) y la teoría de organización química (COT) implica una metodología estructurada para estudiar sistemas complejos desde una

perspectiva formal y jerárquica. En primer lugar, se define un universo de especies e interacciones en forma de red de reacciones. Luego, se identifican subconjuntos de especies que cumplen con condiciones estructurales (clausura) y funcionales (automantenimiento), denominados organizaciones.

Estas organizaciones se relacionan jerárquicamente mediante inclusiones mínimas, las que se representan en un diagrama de Hasse. Finalmente, cada organización corresponde a un subconjunto del espacio de estados que puede ser asociado a dinámicas sostenibles, como puntos fijos, ciclos límite o atractores. Este enfoque permite transitar de una descripción puramente estructural a una comprensión funcional del comportamiento sistémico.

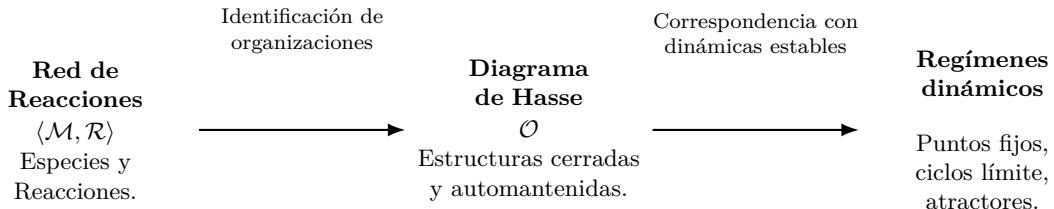


Figura 1.3: Flujo conceptual desde la RN hacia la dinámica sistémica usando COT.

Este tipo de mapeo, que transcurre desde la estructura de una red de reacciones hacia su comportamiento dinámico, representa uno de los principales beneficios de trabajar con COT. Permite una comprensión jerárquica y computacionalmente accesible del sistema, sin necesidad de resolver explícitamente las ecuaciones diferenciales que gobiernan su dinámica. Haciendo posible la identificación anticipada de qué subconjuntos de especies tienen el potencial de sostenerse en el tiempo, orientar simulaciones numéricas con mayor eficiencia y analizar de forma formal fenómenos como resiliencia, estabilidad o emergencia de comportamientos colectivos.

## 1.2. Construcción de modelo de una comunidad ecológica teórica con RN+COT

La presente investigación tiene por objetivo desarrollar un modelo de la sostenibilidad en comunidades ecológicas utilizando redes de reacciones. De esta forma, explorar el concepto de autopoiesis para caracterizar su configuración y evolución estructural desde perturbaciones que complejizan el modelo, incluyendo nuevos procesos o entidades no existentes inicialmente en la red de reacciones.

La propuesta para esta modelación es la utilización de Redes de Reacciones, las cuales describirán las interacciones que se realizan en estos sistemas. Complementariamente, el modelo será analizado estructuralmente utilizando la Teoría de Organización Química, de forma cualitativa con ecuaciones diferenciales ordinarias considerando coeficientes constantes y, posteriormente, parámetros estocásticos, que permitirán estudiar la evolución estructural del sistema por medio de la realización de perturbaciones. Finalmente, se procederá a efectuar simulaciones numéricas en distintos escenarios. La mayor parte de esta investigación considera el desarrollo de la librería PyCOT (Veloz, 2025) del lenguaje de programación *Python*<sup>TM</sup>.

Para proponer un modelo que describa la evolución estructural de la comunidad ecológica, realizamos la revisión bibliográfica de publicaciones que consideran la modelación tradicional de redes tróficas, para así generar una narrativa ecológica de la fenomenología que sustente las hipótesis que describen el comportamiento de este tipo de redes. Asimismo, literatura relacionada con Redes de Reacciones (RN), la Teoría de Organización Química (COT) y sus aplicaciones en comunidades y sistemas ecológicos.

Primero, desarrollaremos un modelo para una comunidad ecológica, en la que se presentan interacciones complejas teóricas, para validar el potencial de RN+COT como lenguaje de modelación.

Para complementar el primer modelo estudiamos, específicamente, las aplicaciones de RN+COT realizadas teóricamente por Veloz and Flores (2021b) y Veloz and Flores (2021a) en la comunidad ecológica con interacciones complejas reales que investigaron Oliver and Higashi (2019), investigación basada en interacciones entre áfidos (*Acyrthosiphon pisum*), parasitoides (*Aphidius ervi*) y endosimbiontes (*Hamiltonella defensa*).

En segunda instancia, desarrollamos un modelo, considerando la validación de la primera parte, mediante el análisis comparativo con la modelación tradicional de redes tróficas estudiada por Crego et al. (2016) en la comunidad ecológica específica de la Isla Navarino, que corresponde a una isla del archipiélago de Tierra del Fuego en el extremo sur de Chile entre los océanos Pacífico y Atlántico, para cuantificar la sostenibilidad de comunidades ecológicas.

De igual manera, se realizará el análisis cualitativo de su evolución estructural; para ello, se utilizará COT. Por tanto, se identificarán las organizaciones (conjunto de especies cerradas estructuralmente y automantenidas), es decir, que son candidatas a permanecer estables en estado estacionario.

Por último, se efectuarán simulaciones numéricas con ecuaciones diferenciales ordinarias; para esto, usaremos módulos de la librería PyCOT (Veloz, 2025) con el fin de visualizar el comportamiento descrito en el modelo y obtener gráficas que describan la evolución estructural relacionada. Además, utilizaremos parámetros estocásticos para describir gráficamente diferentes perturbaciones en el sistema.

La figura 1.4 corresponde a una esquematización metodológica que resume y describe el desarrollo de la investigación.

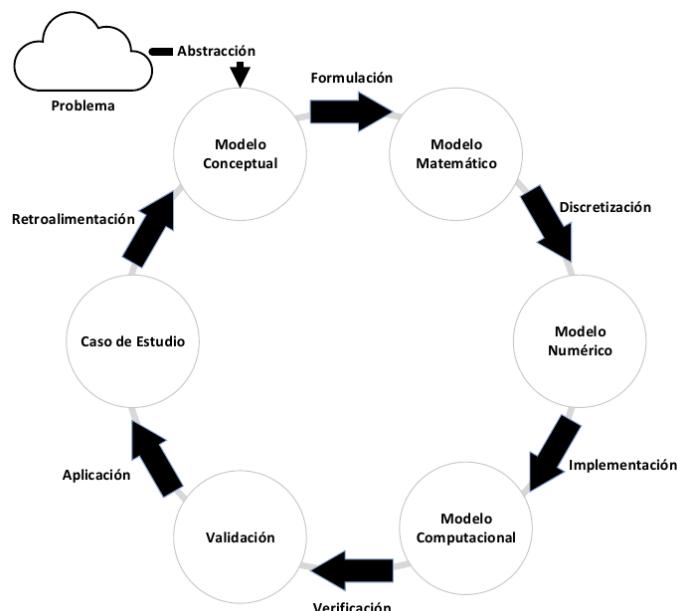


Figura 1.4: Esquema metodológico. Elaboración propia.

Esta investigación considera la modelación interdisciplinaria, por lo que consideramos, por un lado, el marco de modelamiento matemático mediante la aproximación desde redes de reacciones y, por otro lado, el modelamiento de las ciencias sociales mediante una narrativa científica. Ambas aproximaciones, en conjunto, permiten construir el modelo de la comunidad ecológica.

### 1.2.1. Definiciones ecológicas

En ecología, una red de reacciones se puede interpretar como una representación matemática de las interacciones entre múltiples componentes bióticos y abióticos de una comunidad ecológica, estructurada formalmente como un conjunto de especies y reacciones. Así como cada reacción describe transformaciones, flujos o transferencias entre especies, bajo leyes que pueden derivarse de la cinética de masas o de principios ecológicos análogos. Esta formulación permite integrar, de manera sistemática, la estructura del sistema (conectividad e intensidad de las interacciones) con su dinámica (variación temporal y espacial), lo que resulta particularmente útil para estudiar propiedades emergentes como la sostenibilidad, la resiliencia o la persistencia a largo plazo (Gross et al., 2009).

Finalmente, en relación a las definiciones ecológicas de sistemas con interacciones complejas, pueden profundizarse al consultar los artículos de Begon et al. (1986), Vet and Dicke (2002), y Levin (1998).

### Diferencias entre modelos de poblaciones y comunidades

Las principales diferencias entre modelos de poblaciones y modelos de comunidades radican en el nivel de organización biológica que abordan y en cómo representan las interacciones entre los organismos. Ambos tipos de modelos son herramientas fundamentales en ecología, pero se enfocan en aspectos diferentes del estudio de los ecosistemas.

Mientras, por un lado, los modelos de poblaciones estudian dinámicas por medio de ecuaciones diferenciales a nivel de una sola especie o población específica dentro de un área determinada. Por lo que se caracterizan por el tamaño de la población, crecimiento poblacional, interacciones intraespecíficas y factores medioambientales. Por otro lado, los modelos de comunidades (en los cuales se enfoca esta investigación) abordan interacciones entre múltiples especies dentro de un ecosistema o comunidad biológica. En lugar de centrarse en una sola especie, estos modelos analizan cómo las diferentes especies interactúan entre sí y cómo estas interacciones afectan la estructura y dinámica de la comunidad, por medio de redes. Por lo que se caracterizan por las interacciones interespecíficas, la estructura de la comunidad, la persistencia de la comunidad y se describen principalmente por medio de redes tróficas. Las diferencias más significativas se presentan en el cuadro 1.4.

Son conocidos los problemas para abordar la modelación en poblaciones y comunidades. Sin embargo, en 2020, Veloz abrió una línea de investigación teórica que generó muchas otras líneas y esta investigación se enfoca en comunidades o ecosistemas, enmarcándose en una línea particular de COT para comunidades ecológicas. Una de estas líneas fue presentada concretamente por Veloz and Ramirez en 2022.

En relación a esta línea particular de COT, es importante remarcar que en ecología de siste-

Aspecto	Modelos de Poblaciones	Modelos de Comunidades
Nivel de organización	Una sola especie o población.	Múltiples especies interactuando.
Enfoque principal	Dinámica interna de una población.	Interacciones entre especies y estructura comunitaria.
Interacciones	Intraespecíficas (dentro de la misma especie).	Interespecíficas (entre diferentes especies).
Variables clave	Tamaño poblacional, tasas de natalidad/mortalidad.	Diversidad, abundancia relativa, redes tróficas.
Aplicaciones típicas	Manejo de especies específicas.	Conservación de ecosistemas y biodiversidad.

Cuadro 1.4: Comparación entre modelos de poblaciones y modelos de comunidades.

mas, las comunidades ecológicas y ecosistemas son conceptualizados como unidades dinámicas compuestas por entidades bióticas y abióticas, cuyas interacciones determinan la estructura y función del sistema.

**Definición 1.21. Entidades bióticas:** corresponden al conjunto de organismos vivos que habitan un ecosistema, incluyendo individuos, poblaciones y comunidades de productores, consumidores y descomponedores. Estas especies interactúan entre sí mediante relaciones ecológicas como depredación, competencia, mutualismo y parasitismo, afectando directa o indirectamente la dinámica del sistema (Begon et al., 2006).

**Definición 1.22. Entidades abióticas:** engloban los factores físicos y químicos no vivos que influyen en los procesos ecológicos, tales como la temperatura, la luz solar, el agua, el pH, los nutrientes, la topografía y el tipo de suelo. Estos factores condicionan el desarrollo y la distribución de las especies, así como los flujos de energía y materia dentro del ecosistema (Chapin et al., 2011).

**Nota 1.7.** La distinción entre ambos tipos de componentes es fundamental para el modelamiento matemático de ecosistemas, y por ende, de comunidades ecológicas, ya que permite representar explícitamente las fuentes de variabilidad interna (biótica) y externa (abiótica) que influyen en la sostenibilidad del sistema.

**Definición 1.23. Interacción:** reacción entre una o más especies definidas para la RN.

**Definición 1.24. Mecanismo:** conjunto de actividades que subyacen a una interacción involucrada en una reacción.

**Definición 1.25. Relación interespecífica:** interacción ecológica que ocurre entre individuos de diferentes especies dentro de una comunidad ecológica (Begon et al., 1986).

**Definición 1.26. Sistema tritrófico:** describe las interacciones ecológicas entre tres niveles tróficos: una planta (productor), un herbívoro (consumidor primario) y un carnívoro (consumidor secundario) que se alimenta del herbívoro (Vet and Dicke, 2002).

**Definición 1.27. Interacciones complejas:** en comunidades ecológicas son interacciones que emergen de la multiplicidad de vínculos contextuales entre especies, los cuales pueden incluir competencia, depredación, mutualismo, facilitación y retroalimentaciones indirectas.

**Nota 1.8.** Estas interacciones generan dinámicas no triviales, como estabilidad multiescalar, ciclos límite o caos determinista, que no pueden ser entendidas plenamente mediante enfoques reduccionistas. El modelamiento explícito de tales relaciones, mediante estructuras como redes de reacciones o sistemas dinámicos acoplados, es esencial para capturar la naturaleza emergente y adaptativa de los ecosistemas (Levin, 1998).

### 1.2.2. Modelamiento matemático de interacciones ecológicas

En relación al modelamiento matemático, en redes de reacciones podemos describir interacciones de un sistema por medio de sistemas de reacciones químicas que pueden modelarse utilizando la teoría de redes. Este enfoque implica representar las especies químicas como nodos y las reacciones como aristas, permitiendo analizar dinámicas complejas a través de herramientas matemáticas como matrices estequiométricas y sistemas de ecuaciones diferenciales (Feinberg, 1979).

En particular, en comunidades ecológicas se utiliza la modelación de redes tróficas, que es una de las aproximaciones principales de la ecología actualmente (Pringle and Hutchinson, 2020). Sin embargo, este tipo de modelación presenta una alta complejidad y baja fidelidad de los resultados debido a que los datos utilizados para crearlas son deficientes y las interacciones que se pueden considerar están restringidas sólo a dos especies biológicas. Al utilizar RN podemos describir fácilmente las interacciones tradicionales de la modelación de redes tróficas.

Cuadro 1.5: Mecanismos ecológicos típicos y su traducción al lenguaje de reacciones utilizado en RN.

Mecanismo ecológico	Reacción en redes de reacciones
Nacimiento	$especie \rightarrow 2especie$
Muerte	$2especie \rightarrow especie$
Depredación	$presa + depredador \rightarrow 2depredador$

Mecanismo ecológico	Reacción en redes de reacciones
Parasitismo (infestación)	$parásito + hospedador \rightarrow parásito + hospedador_{infestado}$
Parasitismo (Muerte de hospedador)	$hospedador_{infestado} \rightarrow parásito$
Comensalismo	$hospedador + huésped \rightarrow hospedador + 2huésped$
Amensalismo	$huésped + hospedador \rightarrow huésped$
Mutualismo	$cooperador_1 + cooperador_2 \rightarrow 2cooperador_1 + 2cooperador_2$
Competencia	$competidor_1 + recurso \rightarrow 2competidor_1$ $competidor_2 + recurso \rightarrow 2competidor_2$

### 1.2.3. Integración interdisciplinaria

En relación al modelamiento de las ciencias sociales, una de las herramientas utilizadas es la generación de una narrativa científica. Una narrativa científica se define como un enfoque que integra el rigor metodológico y epistemológico propio de la ciencia con una estructura narrativa que permite comunicar los resultados de manera accesible y comprensible. Este enfoque busca no solo informar sobre descubrimientos y teorías científicas, sino también contextualizarlos y presentarlos de forma que sean relevantes y significativos para un público más amplio, incluyendo aquellos fuera del ámbito académico (Andes, 2024). Con base en esta definición, específicamente aplicada al contexto de la presente investigación, extenderemos su aplicación para realizar la contextualización de las especies e interacciones que se desarrollan en comunidades ecológicas como narrativa ecológica.

Específicamente, esta narrativa ecológica le dará sustento a las hipótesis que consideraremos en la construcción del modelo matemático a generar. Mediante una narrativa ecológica es posible construir reacciones de la red que consideren múltiples interacciones entre dos o más especies e inclusive considerar especies que no pueden ser contempladas en la modelación de redes tróficas.

A continuación, desarrollamos un ejemplo ilustrativo que permite concretar la propuesta metodológica descrita previamente, integrando el enfoque de RN+COT en la modelación de una comunidad ecológica teórica. Este ejemplo surge a partir de una narrativa ecológica construida con base en interacciones biológicas posibles entre especies, lo que permite formular hipótesis concretas sobre su dinámica. Así, se modelan procesos ecológicos clásicos como depredación, competencia o parasitismo, y se exploran las configuraciones estructurales que emergen del sistema bajo distintos escenarios de perturbación. El objetivo de este ejemplo es validar el potencial de RN+COT como lenguaje de modelación para representar la evolución

estructural de comunidades ecológicas complejas y, con ello, avanzar en la comprensión de su sostenibilidad.

#### ***Ejemplo 1.5. Construcción de modelo de una comunidad ecológica a partir de una de narrativa ecológica y la creación de su red de reacciones.***

Al respecto del modelamiento de comunidades ecológicas teóricas para concretar, utilizaremos el ejemplo 1.1. Primero, describiremos la narrativa ecológica de dicha comunidad y, posteriormente, analizaremos la narrativa ecológica para generar hipótesis que sustenten la generación de la red de reacciones que caracterice a la comunidad.

#### **Descripción de la narrativa ecológica**

##### ***“Las plantas y su persistencia”:***

En una comunidad ecológica (de juguete), que modelaremos mediante RN, el agua ingresa por distintas vías, que principalmente se relacionan con el ciclo del agua. A su vez, las radiaciones electromagnéticas que emite el sol ingresan constantemente como luz. En esta comunidad ecológica, el suelo se representa como un sustrato abiótico que contiene nutrientes disponibles, sobre el cual se disponen semillas de plantas que, al combinarse adecuadamente con agua y luz, germinan para producir una planta. La propagación de las plantas ocurre mediante la dispersión de semillas hacia el suelo. Parte del agua que ingresa al sistema no es aprovechada ni por las semillas ni por las plantas. Después de un tiempo, hay plantas que cumplen su ciclo de vida y mueren. Hay semillas que no logran las condiciones óptimas de germinación, por lo que no generan plantas y mueren. Parte de la luz que ingresa al sistema no es aprovechada ni por las semillas ni por las plantas.

#### **Generación de hipótesis a partir de la narrativa ecológica**

##### ***Análisis de hipótesis sobre “Las plantas y su persistencia”:***

En una comunidad ecológica (de juguete), que modelaremos mediante RN, el agua ingresa por distintas vías (**Hipótesis 1**), que principalmente se relacionan con el ciclo del agua. A su vez, las radiaciones electromagnéticas que emite el sol ingresan constantemente como luz (**Hipótesis 2**). En esta comunidad ecológica, el suelo está compuesto por material inerte que contiene nutrientes, en el que se dispone de semillas de plantas, que al combinarse adecuadamente con agua y luz, germinan para producir una planta (**Hipótesis 3**). La forma de propagación que tienen las plantas se realiza por la dispersión de semillas al suelo (**Hipótesis 4**). Parte del agua que ingresa al sistema no es aprovechada ni por las semillas ni por las plantas (**Hipótesis 5**). Después de un tiempo, hay plantas que cumplen su ciclo de vida y mueren (**Hipótesis 6**). Hay semillas que no logran las condiciones óptimas de germinación, por lo que no generan plantas y mueren (**Hipótesis 7**). Parte de la

luz que ingresa al sistema no es aprovechada ni por las semillas ni por las plantas (**Hipótesis 8**).

#### 1.2.4. Ejemplo de modelamiento de una comunidad ecológica con redes de reacciones

En esta sección elaboramos un modelo de red de reacciones para la comunidad ecológica descrita en el ejemplo 1.1. Del análisis de la narrativa ecológica presentamos las especies identificadas, en el cuadro 1.6, y las interrelaciones definidas, en el cuadro 1.7. Las que incorporaremos en el marco de modelación con redes de reacciones.

##### Descripción de las especies

Cuadro 1.6: Nomenclatura utilizada en el ejemplo 1.1.

Entidad	Descripción
<i>agua</i>	Molécula química compuesta por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno ( $H_2O$ ) unidos por un enlace covalente.
<i>luz</i>	Conjunto de radiaciones electromagnéticas emitidas por el sol.
<i>planta</i>	Organismo pluricelular vegetal compuesto principalmente de celulosa. Para el ejemplo, consideraremos del tipo fotosintético.
<i>semilla</i>	Parte de la planta que se genera en la etapa de maduración, mediante la cual se produce su propagación.
<i>suelo</i>	Parte superficial de la corteza terrestre, que contiene los nutrientes necesarios para ser sustrato de organismos vegetales.

##### Descripción de las interacciones

Cuadro 1.7: Mecanismos ecológicos definibles para el ejemplo 1.1.

Mecanismo	Ejemplo
Ingreso de <i>agua</i> al sistema	$r_1 : \emptyset \rightarrow agua$
Ingreso de <i>luz</i> al sistema	$r_2 : \emptyset \rightarrow luz$
Propagación de <i>planta</i>	$r_3 : agua + luz + semilla + suelo \rightarrow planta + suelo$
Maduración de <i>planta</i>	$r_4 : agua + luz + planta + suelo \rightarrow planta + suelo + semilla$
Salida de <i>agua</i> del sistema	$r_5 : agua \rightarrow \emptyset$

Mecanismo	Ejemplo
Muerte natural de <i>planta</i>	$r_6 : planta \rightarrow \emptyset$
Muerte natural de <i>semilla</i> por exceso de <i>agua</i>	$r_7 : semilla + agua \rightarrow \emptyset$
Pérdida de <i>luz</i> en el sistema, (no la capta <i>planta</i> ni <i>semilla</i> )	$r_8 : luz \rightarrow \emptyset$

En conclusión, la modelación con RN frente a la modelación de redes tróficas expresa un potencial, debido a que considerar este tipo de interacciones amplía la cantidad de especies que se pueden incorporar en cada una de las interacciones, de manera que el análisis que se realiza, comparativamente, es más cercano a la realidad.



## Capítulo 2

# Modelamiento de interacciones complejas: Interacción áfidos, parasitoides y endosimbiontes en plantas.

Este capítulo presenta una formalización matemática de una comunidad ecológica integrada por áfidos, parasitoides y endosimbiontes en plantas, utilizando una Red de Reacciones (*RN\_AEP*). Este enfoque facilita la simulación y análisis del sistema, alineado con el objetivo general 1 de esta investigación. La representación mediante una red de reacciones permite identificar módulos funcionales y patrones estructurales derivados de las interacciones complejas entre especies que comparten recursos, se parasitan y establecen asociaciones simbióticas.

Esta propuesta se sustenta en investigaciones previas que han aplicado Redes de Reacciones para modelar interacciones ecológicas complejas, como las relaciones endosimbióticas. Estudios previos han demostrado que este enfoque permite integrar procesos bioquímicos, proliferación celular y mecanismos de regulación en múltiples escalas, evidenciando la relevancia del enfoque multiescalar para comprender la estabilidad y dinámica emergente de las interacciones simbióticas Veloz and Flores (2021a,b).

Además, este capítulo explora el rol funcional de los endosimbiontes en la regulación de las interacciones áfido-parasitoide, permitiendo evaluar cómo las redes de interacción se adaptan a perturbaciones ecológicas, como la introducción de especies o el cambio ambiental. El formalismo de redes de reacciones se revela como una herramienta eficaz para modelar sistemas ecológicos multiescalares y dinámicos.

En las secciones 2.3 y 2.4, se aborda la dinámica del sistema áfido–endosimbionte–parasitoide

mediante dos enfoques complementarios. Realizamos un análisis analítico del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias asociado a la red de reacciones *RN\_AEP*, y simulaciones numéricas que permiten explorar su comportamiento en condiciones controladas y perturbadas. La aproximación analítica, desarrollada por medio de casos, permite identificar condiciones de equilibrio y comportamientos límite del sistema, mientras que la aproximación numérica ofrece una herramienta flexible para evaluar su evolución temporal frente a distintos escenarios ecológicos. En consecuencia, se busca comprender tanto la estructura matemática subyacente como las trayectorias dinámicas emergentes de la comunidad ecológica modelada, aportando una visión integral de los mecanismos que regulan su estabilidad y resiliencia.

## 2.1. Definiciones:

A continuación, se presentan definiciones de la ecología que permitirán una comprensión más detallada del modelo desarrollado para la comunidad ecológica estudiada y los distintos mecanismos que se llevan a cabo en ella.

**Definición 2.1. Áfidos fitófagos:** *pequeños insectos chupadores de savia de plantas, pertenecientes al orden Hemiptera, suborden Sternorrhyncha (Blackman and Eastop, 2000).*

**Definición 2.2. Partenogénesis:** *forma de reproducción asexual en la que un nuevo individuo se desarrolla a partir de un óvulo no fecundado (Normark, 2003).*

**Definición 2.3. Parasitoide:** *organismo que vive a expensas de otro organismo huésped, al que eventualmente mata para completar su desarrollo (Ebenhard, 1990).*

**Nota 2.1. Características principales de los parasitoides:**

1. **Dependencia del hospedador:** *los parasitoides necesitan un hospedador para completar su desarrollo, pero su relación no es mutualista ni simplemente parasitaria.*
2. **Muerte del hospedador:** *aunque inicialmente no matan al hospedador, eventualmente lo consumen o lo debilitan hasta causarle la muerte.*
3. **Especificidad:** *muchos parasitoides tienen una alta especificidad en cuanto a su hospedador, atacando solo ciertas especies o grupos de organismos.*
4. **Ciclo de vida:** *generalmente, las larvas del parasitoide son las que dependen del hospedador, mientras que los adultos suelen ser libres e independientes.*

**Definición 2.4. Parasitoides himenópteros:** *insectos del orden Hymenoptera cuyas larvas se desarrollan dentro o sobre el cuerpo de otro artrópodo huésped, al que eventualmente matan (Godfray, 2000).*

**Definición 2.5.** *Simbiosis: interacción persistente entre organismos de distintas especies, en la cual al menos uno de ellos obtiene un beneficio funcional. Estas asociaciones abarcan un continuo ecológico que incluye mutualismo, comensalismo y parasitismo. En el contexto microbiano, la simbiosis constituye una propiedad organizacional clave que influye en la biología y evolución de los organismos hospedadores (McFall-Ngai et al., 2013).*

**Definición 2.6.** *Endosimbiosis: Tipo de simbiosis en la que uno de los organismos vive dentro de las células o tejidos del otro organismo (Nowack and Melkonian, 2010).*

**Definición 2.7.** *Simbionte: microorganismos simbóticos que mantienen una relación mutualista estrecha y continua (Guo et al., 2017).*

**Definición 2.8.** *Simbiontes bacterianos facultativos: bacterias que pueden vivir dentro de un organismo huésped y proporcionar beneficios, pero cuya presencia no es esencial para la supervivencia del huésped (Oliver et al., 2010).*

**Definición 2.9.** *Transferencia: vía de transmisión para que los simbiontes extiendan su distribución (Guo et al., 2017).*

**Nota 2.2. Tipos de transferencia:**

1. **Vertical**, es decir, de madre a hijo, es la principal vía de propagación de los simbiontes dentro de una población; y
2. **Horizontal**, es decir, de un individuo a otro dentro de una población o entre especies; esta ocurre ocasionalmente.

## 2.2. Modelo áfidos, parasitoides y endosimbiontes en plantas (RN\_AEP)

El presente modelo, denominado *RN\_AEP*, se construye bajo el enfoque de RN combinado con la metodología de construcción orientada por COT. Esta aproximación permite desarrollar un modelo matemático que integra de manera coherente las interacciones ecológicas observadas entre áfidos (*Acyrthosiphon pisum*), sus endosimbiontes facultativos y sus enemigos naturales, los parasitoides (*Aphidius ervi*).

El uso de RN proporciona una representación estructural precisa de las interacciones entre las especies del sistema, permitiendo identificar las relaciones causales y la dinámica de transmisión de los endosimbiontes, así como las interacciones depredador-presa entre los áfidos y los parasitoides. Por otro lado, la metodología COT garantiza que el modelo esté fundamentado en principios teóricos sólidos, derivados de la literatura científica revisada y de las hipótesis formuladas en la narrativa ecológica.

La narrativa ecológica del sistema (2.2.1) establece las bases conceptuales del modelo, definiendo las especies involucradas, sus características biológicas y las interacciones clave que se modelan en *RN\_AEP*. A partir de esta narrativa, se identifican las hipótesis fundamentales que guían la creación de las reacciones del modelo, permitiendo una representación precisa de los procesos ecológicos.

En las secciones siguientes, se describen las especies de la comunidad ecológica y las reacciones ecológicas que las conectan, seguidas por la formalización matemática del modelo, que incluye la derivación de ecuaciones diferenciales que describen la dinámica poblacional y simbiótica del sistema. Este enfoque integrado asegura que el modelo capture adecuadamente las complejas interacciones entre áfidos, endosimbiontes y parasitoides, proporcionando una herramienta analítica para su estudio.

### 2.2.1. Narrativa ecológica

#### Introducción

Algunas comunidades ecológicas albergan interacciones biológicas de alta complejidad, cuya dinámica puede ser representada mediante redes de reacciones que capturan las interacciones entre sus especies. Un caso paradigmático es el sistema tritrófico compuesto por plantas hospedadoras, áfidos fitófagos (*Acyrthosiphon pisum*), parasitoides himenópteros (*Aphidius ervi*) y simbiontes bacterianos facultativos (*Hamiltonella defensa*) Oliver and Higashi (2019). Este endosimbionte ha sido identificado como un mediador clave en la defensa de los áfidos frente a parasitoides, al interferir con el desarrollo de las avispas dentro del hospedador. Sin embargo, la especificidad de estas interacciones está determinada por la combinación de genotipos de áfido, parasitode y simbionte, dando lugar a una red de relaciones ecológicas contextuales.

El modelo de Red de Reacciones (*RN\_AEP*) se fundamenta en la caracterización de las interacciones ecológicas que ocurren entre áfidos (*Acyrthosiphon pisum*), sus endosimbiontes facultativos y sus enemigos naturales, los parasitoides (*Aphidius ervi*). Estas interacciones están sustentadas por estudios científicos que describen la compleja dinámica entre estas especies, donde los endosimbiontes desempeñan un rol crucial en la defensa de los áfidos contra la parasitación. La identificación de las especies y las reacciones en el modelo surge de una narrativa ecológica basada en hallazgos clave de la literatura científica.

#### Desarrollo

Los áfidos, como herbívoros que se alimentan de la savia de las plantas, mantienen relaciones simbióticas obligadas con bacterias endosimbioticas que les proporcionan nutrientes esenciales. Sin embargo, también pueden albergar endosimbiontes facultativos, como *Hamiltonella defensa*, *Serratia symbiotica* y *Regiella insecticola*, que les confieren protección contra

enemigos naturales. Según Oliver and Higashi (2019), estos endosimbiontes facultativos son fundamentales para la defensa de los áfidos frente a los parasitoides, al interferir en el desarrollo larval de estos dentro del huésped.

Con respecto a las reproducciones de las especies, los áfidos pueden reproducirse sexual o asexualmente, como simplificación del modelo, consideraremos solamente la partenogénesis (o reproducción asexual) (**Hipótesis 1**) y los parasitoides se reproducen sexualmente (**Hipótesis 2**).

La transmisión de estos endosimbiontes puede ocurrir de manera vertical, de madre a descendencia (**Hipótesis 3**), y de manera horizontal (**Hipótesis 4**), a través de vectores como los parasitoides (Guo et al., 2017). Este último mecanismo es crucial para explicar la dinámica de infección y la coexistencia de áfidos con diferentes endosimbiontes en poblaciones naturales.

La interacción entre los áfidos y los parasitoides está modelada en las interacciones (**Hipótesis 5 a 8**), que describen la entrada de huevos de parasitoides en áfidos susceptibles, diferenciando entre aquellos que portan endosimbiontes y los que no. Los estudios de Oliver et al. (2005, 2008) destacan que la protección conferida por *H. defensa* contra los parasitoides es dependiente de factores ambientales, como la temperatura, y de la cepa bacteriana presente.

Las reacciones modeladas (**Hipótesis 9 a 12**) reflejan las posibles consecuencias de la parasitación: desde la muerte del parasitoide en presencia de endosimbiontes protectores, hasta la conversión de los áfidos parasitados en nuevos parasitoides. Estas reacciones están respaldadas por la evidencia de que los endosimbiontes pueden bloquear el desarrollo del parasitoide en el huésped, como se ha demostrado en diversas cepas de *H. defensa* (Oliver and Higashi, 2019).

Finalmente, la mortalidad natural y logarítmica (**Hipótesis 13 a 17**) se relacionan con la regulación poblacional tanto de áfidos como de parasitoides, capturando la dinámica de supervivencia y competencia dentro del sistema.

En conclusión, la formulación de esta narrativa ecológica permite identificar las especies e interacciones que componen la red de reacciones *RN\_AEP*, estableciendo una base conceptual clara para el desarrollo del modelo matemático y su posterior análisis. Este enfoque facilita la comprensión de las hipótesis que sustentan el modelo, conectando directamente la teoría ecológica y la historia natural de las especies involucradas con las ecuaciones que describen su dinámica.

### 2.2.2. Red de reacciones áfidos, endosimbiontes y parasitoides

De la narrativa ecológica desarrollada para la *RN\_AEP* podemos, similarmente a lo realizado en el ejemplo 1.1, obtener las especies identificadas (en el cuadro 2.1) y las interacciones consideradas (en el cuadro 2.2).

Cuadro 2.1: Especies bióticas y abióticas del modelo *RN\_AEP*.

<b>Id</b>	<b>Descripción</b>
$A$	Áfido libre de endosimbiontes y parasitoides ( <i>Acyrthosiphon pisum</i> ).
$AE$	Áfido con uno o varios endosimbiontes ( <i>Acyrthosiphon pisum</i> con <i>Hamiltonella defensa</i> ).
$A_p$	Áfido libre de endosimbiontes pero con un parasitoide ( <i>Acyrthosiphon pisum</i> parasitado por <i>Aphidius ervi</i> ).
$AE_p$	Áfido con uno o varios endosimbiontes y con parasitoide <i>Acyrthosiphon pisum</i> con <i>Hamiltonella defensa</i> .
$P$	Parasitoide ( <i>Aphidius ervi</i> ).
$P_p$	Parasitoide preñado ( <i>Aphidius ervi</i> buscando áfidos para poner sus huevos).
$P_v$	Parasitoide post-reproducción ( <i>Aphidius ervi</i> en fase post-reproductiva).

Cuadro 2.2: Interacciones ecológicas del modelo *RN\_AEP* y su relación con las hipótesis ecológicas.

<b>Id</b>	<b>Reacción</b>	<b>Interacción</b>	<b>Referencia</b>
$r_0$	$A \rightarrow 2A$	Reproducción de $A$ .	Hipótesis 1
$r_1$	$AE \rightarrow 2AE$	Reproducción de $AE$ (transmisión vertical del endosimbionte).	Hipótesis 3
$r_2$	$A + AE \rightarrow 2AE$	Traspaso horizontal de $E$ a $A$ .	Hipótesis 4
$r_3$	$2P \rightarrow P + P_p$	Reproducción de parasitoide $P$ .	Hipótesis 2
$r_4$	$A + P_p \rightarrow A_p + P_p$	Entrada de huevo de parasitoide en áfido sin simbionte.	Hipótesis 5
$r_5$	$AE + P_p \rightarrow AE_p + P_p$	Entrada de huevo de parasitoide en áfido con simbionte.	Hipótesis 6
$r_6$	$A + P_p \rightarrow A_p + P_v$	Parasitismo con generación de parasitoide virulento.	Hipótesis 7
$r_7$	$AE + P_p \rightarrow AE_p + P_v$	Parasitismo de áfido con simbionte, genera parasitoide virulento.	Hipótesis 8
$r_8$	$A_p \rightarrow A$	Muerte del huevo de parasitoide en áfido sin simbionte.	Hipótesis 9

<b>Id</b>	<b>Reacción</b>	<b>Interacción</b>	<b>Referencia</b>
$r_9$	$AE_p \rightarrow AE$	Muerte del huevo de parasitoide en áfido con simbionte.	Hipótesis 10
$r_{10}$	$A_p \rightarrow P$	Conversión de áfido parasitado sin simbionte en parasitoide.	Hipótesis 11
$r_{11}$	$AE_p \rightarrow P$	Conversión de áfido parasitado con simbionte en parasitoide.	Hipótesis 12
$r_{12}$	$2A \rightarrow A$	Mortalidad natural y logística de $A$ .	Hipótesis 13
$r_{13}$	$2AE \rightarrow AE$	Mortalidad natural y logística de $AE$ .	Hipótesis 14
$r_{14}$	$2P \rightarrow P$	Mortalidad natural y logística de $P$ .	Hipótesis 15
$r_{15}$	$2P_p \rightarrow P_p$	Mortalidad natural y logística de $P_p$ .	Hipótesis 16
$r_{16}$	$2P_v \rightarrow P_v$	Mortalidad natural y logística de $P_v$ .	Hipótesis 17

### 2.3. Resolución analítica del modelo $RN\_AEP$

En la modelación matemática de fenómenos biológicos complejos, la resolución analítica desempeña un papel fundamental, al permitir una comprensión profunda de las dinámicas subyacentes del sistema modelado. A través de la obtención de soluciones explícitas para las ecuaciones que describen estos sistemas, es posible identificar los parámetros críticos que gobiernan su comportamiento y predecir su evolución en el tiempo. Esto no solo facilita la validación de los supuestos biológicos adoptados, sino que también permite simplificar modelos complejos, preservando sus características esenciales (Edelstein-Keshet, 2005).

Sin embargo, intrínsecamente la naturaleza no lineal de la mayoría de los ecosistemas limita significativamente la aplicabilidad de métodos analíticos exactos. En consecuencia, resulta necesario el desarrollo de técnicas alternativas, como las soluciones aproximadas, el análisis cualitativo y la reducción dimensional, que permitan explorar las propiedades fundamentales del sistema y extraer conclusiones útiles (Murray, 2002).

En esta sección, se abordará el análisis del modelo  $RN\_AEP$  empleando ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs), un enfoque esencial en la modelación matemática de sistemas dinámicos continuos. Este modelo describe las interacciones ecológicas entre áfidos, endosimbiontes y parasitoides, capturando la complejidad de las relaciones ecológicas entre estas especies. La estructura del modelo se fundamenta en un conjunto de reacciones ecológicas que representan tanto los procesos de reproducción, infección y mortalidad de las poblaciones involucradas, como las interacciones entre las mismas.

El cuadro 2.2 resume las reacciones fundamentales del modelo *RN\_AEP*, las cuales son la base para la derivación del sistema de ecuaciones diferenciales. A partir de las interacciones descritas, se deriva un sistema completo de ecuaciones diferenciales ordinarias que representa las dinámicas de las especies involucradas. Sin embargo, dada la complejidad del sistema completo, en esta sección se presenta una versión simplificada del modelo *RN\_AEP*, que conserva los mecanismos clave que gobiernan la dinámica de las especies. Esta reducción facilita el análisis analítico y permite identificar las relaciones esenciales entre las especies del sistema.

### 2.3.1. Sistema de EDOs del modelo *RN\_AEP*

El sistema de EDOs del modelo *RN\_AEP* 2.1, derivado de la ley de acción de masas, describe la dinámica de concentraciones de especies bioquímicas. Este sistema, estructurado en términos polinómicos, permite analizar estados estacionarios y comportamientos dinámicos emergentes de interacciones estequiométricas en redes de reacción complejas (Feinberg, 2019).

$$\begin{aligned}
 \dot{[A]} &= k_0[A] + k_8[A_p] - k_4[A][P_p] - k_6[A][P_p] - k_2[A][AE] - k_{12}[A]^2, \\
 \dot{[A_p]} &= k_4[A][P_p] + k_6[A][P_p] - k_8[A_p] - k_{10}[A_p], \\
 \dot{[AE]} &= k_1[AE] + k_2[A][AE] + k_9[AE_p] - k_5[AE][P_p] - k_7[AE][P_p] - k_{13}[AE]^2, \\
 \dot{[AE_p]} &= k_5[AE][P_p] + k_7[AE][P_p] - k_9[AE_p] - k_{11}[AE_p], \\
 \dot{[P]} &= k_{10}[A_p] + k_{11}[AE_p] - k_3[P]^2 - k_{14}[P]^2, \\
 \dot{[P_p]} &= k_3[P]^2 - k_4[A][P_p] - k_5[AE][P_p] - k_6[A][P_p] - k_7[AE][P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\
 \dot{[P_v]} &= k_6[A][P_p] + k_7[AE][P_p] - k_{16}[P_v]^2.
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Estos sistemas EDOs en modelos de redes de reacción constituyen una herramienta esencial para la modelación y análisis de interacciones complejas, permitiendo una descripción cuantitativa y precisa de las tasas de cambio en las concentraciones de las especies involucradas. Estos sistemas se derivan de manera rigurosa a partir de los principios fundamentales de la cinética química, donde la velocidad de cada reacción está definida por la concentración de los reactivos elevados a una potencia que corresponde a su coeficiente estequiométrico, conforme a la ley de acción de masas (Feinberg, 2019; Goutsias and Lee, 2006).

En el contexto del modelo *RN\_AEP*, cada especie es representada por una ecuación diferencial que integra de manera simultánea las contribuciones de las reacciones de producción y consumo, capturando de manera integral la compleja dinámica del sistema. Esta estructura permite el estudio de fenómenos críticos como la estabilidad de los estados estacionarios, las bifurcaciones y las transiciones entre múltiples estados estables, aspectos fundamentales para comprender el comportamiento emergente de redes de reacciones en sistemas ecológicos (Guo et al., 2017; Oliver and Higashi, 2019; Suweis et al., 2015). Además, este enfoque facilita el

análisis de la sostenibilidad y resiliencia de las comunidades ecológicas modeladas, proporcionando una base sólida para el estudio de interacciones complejas entre especies y su entorno (Allesina and Tang, 2015; May, 1972).

### Sistema de EDOs del modelo *RN\_AEP* simplificado

En 2.3 expusimos que, dado el elevado nivel de complejidad inherente al sistema completo de ecuaciones diferenciales del modelo *RN\_AEP*, y con el fin de facilitar su análisis analítico, se opta por una versión reducida del modelo. Esta simplificación se fundamenta en la consideración exclusiva de las especies  $A$ ,  $A_p$ ,  $P$ ,  $P_p$  y  $P_v$ , seleccionadas por su relevancia en las dinámicas clave del sistema. Esta elección permite capturar los mecanismos esenciales que gobiernan las interacciones ecológicas y las dinámicas poblacionales de áfidos, parásitoides y sus respectivas variantes. El modelo resultante conserva la estructura fundamental del sistema original, pero reduce su dimensión, facilitando así su estudio y potencial resolución.

$$\begin{aligned}\dot{[A]} &= k_0[A] - k_4[A][P_p] - k_6[A][P_p] + k_8[A_p] - k_{12}[A]^2, \\ \dot{[A_p]} &= k_4[A][P_p] + k_6[A][P_p] - k_8[A_p] - k_{10}[A_p], \\ \dot{[P]} &= -k_3[P]^2 + k_{10}[A_p] - k_{14}[P]^2, \\ \dot{[P_p]} &= k_3[P]^2 - k_6[A][P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\ \dot{[P_v]} &= k_6[A][P_p] - k_{16}[P_v]^2.\end{aligned}$$

Al agrupar términos semejantes, obtenemos el siguiente sistema de EDOs:

$$\begin{aligned}\dot{[A]} &= k_0[A] - (k_4 + k_6)[A][P_p] + k_8[A_p] - k_{12}[A]^2, \\ \dot{[A_p]} &= (k_4 + k_6)[A][P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p], \\ \dot{[P]} &= -(k_3 + k_{14})[P]^2 + k_{10}[A_p], \\ \dot{[P_p]} &= k_3[P]^2 - k_6[A][P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\ \dot{[P_v]} &= k_6[A][P_p] - k_{16}[P_v]^2.\end{aligned}\tag{2.2}$$

El sistema de EDOs 2.2 aún sigue siendo altamente complejo en relación a su solución analítica, lo que se expresa en su nivel de no linealidad al intentar realizar su resolución algebraica. Por lo que, consideramos dos casos fundamentados en su contexto biológico que nos permitieron determinar su solución analítica. En estos casos, consideramos las constantes  $\{\alpha, \beta\} \in \mathbb{R}$ .

**Caso 2.1.**  $[A] = \alpha$

$$\begin{aligned}
0 &= \alpha k_0 - (k_4 + k_6)\alpha[P_p] + k_8[A_p] - k_{12}\alpha^2, \\
\dot{[A_p]} &= (k_4 + k_6)\alpha[P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p], \\
\dot{[P]} &= -(k_3 + k_{14})[P]^2 + k_{10}[A_p], \\
\dot{[P_p]} &= k_3[P]^2 - k_6\alpha[P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\
\dot{[P_v]} &= k_6\alpha[P_p] - k_{16}[P_v]^2.
\end{aligned} \tag{2.3}$$

y

**Caso 2.2.**  $[P] = \alpha$

$$\begin{aligned}
\dot{[A]} &= k_0[A] - (k_4 + k_6)[A][P_p] + k_8[A_p] - k_{12}[A]^2, \\
\dot{[A_p]} &= (k_4 + k_6)[A][P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p], \\
0 &= -(k_3 + k_{14})\alpha^2 + k_{10}[A_p], \\
\dot{[P_p]} &= k_3\alpha^2 - k_6[A][P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\
\dot{[P_v]} &= k_6[A][P_p] - k_{16}[P_v]^2.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

**Nota 2.3.** Para la resolución de los casos 2.1 y 2.2 del modelo RN-AEP consideramos el sistema en el estado estacionario, lo que implica igualar los sistemas de EDOs (2.3) y (2.4) a cero.

**Desarrollo del Caso 2.1:**

Igualamos el sistema de EDOs 2.3 a cero para considerar el estado estacionario.

$$0 = \alpha k_0 - \alpha(k_4 + k_6)[P_p] + k_8[A_p] - \alpha^2 k_{12}, \tag{2.5}$$

$$0 = \alpha(k_4 + k_6)[P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p], \tag{2.6}$$

$$0 = -(k_3 + k_{14})[P]^2 + k_{10}[A_p], \tag{2.7}$$

$$0 = k_3[P]^2 - \alpha k_6[P_p] - k_{15}[P_p]^2, \tag{2.8}$$

$$0 = k_6\alpha[P_p] - k_{16}[P_v]^2. \tag{2.9}$$

De la ecuación 2.5 despejamos  $[P_p]$  en función de  $[A_p]$ . Por lo que, obtenemos  $[P_p]$ :

$$\begin{aligned}
0 &= \alpha k_0 - \alpha(k_4 + k_6)[P_p] + k_8[A_p] - \alpha^2 k_{12}, \\
\alpha(k_4 + k_6)[P_p] &= k_8[A_p] + \alpha k_0 - k_{12}\alpha^2, \\
[P_p] &= \frac{k_8}{(k_4 + k_6)} \frac{[A_p]}{\alpha} + \frac{(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_4 + k_6)}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Con el resultado obtenido de  $[P_p]$  y 2.6, calculamos  $[A_p]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
0 &= \alpha(k_4 + k_6)[P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p] , \\
0 &= \alpha(k_4 + k_6) \left( \frac{k_8}{(k_4 + k_6)} \frac{[A_p]}{\alpha} + \frac{(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_4 + k_6)} \right) - (k_8 + k_{10})[A_p] , \\
0 &= k_8[A_p] + \alpha(k_0 - \alpha k_{12}) - (k_8 + k_{10})[A_p] , \\
0 &= \alpha(k_0 - \alpha k_{12}) - k_{10}[A_p] , \\
[A_p] &= \frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{k_{10}} .
\end{aligned} \tag{2.11}$$

**Nota 2.4.** Por las definiciones que hemos realizado hasta el momento sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_{10}, k_{12}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que, podemos deducir que

$$[A_p] = \frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{k_{10}} ,$$

Como en este caso,  $[A]$  se consideró constante ( $\alpha$ ), se determina que la variación de la concentración  $[A_p]$  es directamente proporcional a la diferencia entre las tasas de natalidad y mortalidad de  $A$ , es decir,  $(\alpha k_0 - \alpha^2 k_{12})$  e inversamente proporcional por la transformación de  $A_p$  a  $P$ , es decir,  $(k_{10})$ . Lo que se condice con el contexto ecológico en relación a la influencia de  $A$  y  $A_p$  en  $[A_p]$  según el sistema RN\_AEP.

Con el resultado obtenido de  $[A_p]$  en (2.11) y (2.7), calculamos  $[P]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
0 &= -(k_3 + k_{14})[P]^2 + k_{10}[A_p] , \\
(k_3 + k_{14})[P]^2 &= k_{10}[A_p] , \\
[P]^2 &= \frac{k_{10}}{(k_3 + k_{14})}[A_p] , \\
[P]^2 &= \frac{k_{10}}{(k_3 + k_{14})} \left( \frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{k_{10}} \right) , \\
[P]^2 &= \frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_3 + k_{14})} , \\
[P] &= \pm \sqrt{\frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_3 + k_{14})}} , \\
[P] &= \sqrt{\frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_3 + k_{14})}} .
\end{aligned} \tag{2.12}$$

**Nota 2.5.** Si bien los resultados que encontramos para  $[P]$  en 2.12 son dos raíces, solo es plausible la raíz positiva  $\sqrt{[P]} \in \mathbb{R}^+$  en consideración al contexto biológico implicado.

**Nota 2.6.** Del resultado de  $[P]$  y por las definiciones realizadas sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_3, k_{12}, k_{14}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que, obtenemos como condición que:

$$\frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_3 + k_{14})} \geq 0 ,$$

Se determina que la variación de la concentración  $[P]$  es directamente proporcional a la diferencia entre las tasas de natalidad y mortalidad de  $A$ , es decir,  $(\alpha k_0 - \alpha^2 k_{12})$  e inversamente proporcional por la reproducción y mortalidad de  $P$ , es decir,  $(k_3 + k_{10})$ . Lo que se condice con el contexto ecológico en relación a la influencia de las concentraciones de  $A$ ,  $A_p$  y  $P$  en  $[P]$  según el sistema  $RN\_AEP$ .

Con el resultado obtenido de  $[P_p]$  en función de  $[A_p]$  en (2.10) y el resultado de  $[A_p]$  en (2.11), calculamos  $[P_p]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} [P_p] &= \frac{k_8}{(k_4 + k_6)} \frac{[A_p]}{\alpha} + \frac{(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_4 + k_6)} , \\ [P_p] &= \frac{k_8}{(k_4 + k_6)} \frac{\left( \frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{k_{10}} \right)}{\alpha} + \frac{(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_4 + k_6)} , \\ [P_p] &= \frac{k_8}{(k_4 + k_6)} \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_{10}} \right) + \frac{(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_4 + k_6)} , \\ [P_p] &= \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right) . \end{aligned} \quad (2.13)$$

**Nota 2.7.** Por las definiciones realizadas sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_4, k_6, k_{10}, k_{12}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que, obtenemos como condición que:

$$\begin{aligned} k_0 - \alpha k_{12} &\geq 0 , \\ \frac{k_0}{k_{12}} &\geq \alpha , \end{aligned}$$

Podemos asociar la condición determinada en la nota 2.7 desde el modelo  $RN\_AEP$  construido hacia un contexto biológico, en función de la representación e influencia de las constantes cinéticas  $k_0$  y  $k_{12}$  (tasas de natalidad y mortalidad de  $A$ ).

En conclusión, podemos confirmar que, para que el valor de  $[A]$  sea constante ( $\neq 0$ ), la tasa de reproducción de  $A$  ( $k_0$ ) debe ser, como mínimo, mayor o igual a la tasa de muerte natural y logística de  $A$  ( $k_{12}$ ). Lo que se confirma por lo expuesto por Guo et al. (2017) en relación a que, en contextos ecológicos, cuando la tasa de mortalidad supera a la de natalidad, las poblaciones tienden a declinar, lo que puede llevar a la extinción.

Con el resultado obtenido de  $[P_p]$  en (2.13) y (2.9), calculamos  $[P_v]$  de la siguiente manera.

$$\begin{aligned}
0 &= k_6 \alpha [P_p] - k_{16} [P_v]^2 . \\
0 &= k_6 \alpha \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right) - k_{16} [P_v]^2 , \\
k_{16} [P_v]^2 &= k_6 \alpha \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right) , \\
[P_v]^2 &= \alpha \frac{k_6}{k_{16}} \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right) , \\
[P_v] &= \pm \sqrt{\alpha \frac{k_6}{k_{16}} \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right)} , \\
[P_v] &= \sqrt{\alpha \frac{k_6}{k_{16}} \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right)} .
\end{aligned} \tag{2.14}$$

**Nota 2.8.** Si bien los resultados que encontramos para  $[P_v]$  en 2.14 son dos raíces, solo es plausible un valor de  $[P_v] \in \mathbb{R}^+$  en consideración al contexto biológico implicado.

**Nota 2.9.** Por las definiciones realizadas sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_4, k_6, k_8, k_{10}, k_{12}, k_{16}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que, obtenemos como condición que:

$$\begin{aligned}
\alpha \frac{k_6}{k_{16}} \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \left( \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} \right) &\geq 0 , \\
\frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6} &\geq 0 , \\
k_0 - \alpha k_{12} &\geq 0 , \\
\frac{k_0}{k_{12}} &\geq \alpha .
\end{aligned}$$

### Desarrollo del Caso 2.2:

Igualamos el sistema de EDOs 2.4 a cero para considerar el estado estacionario.

$$0 = k_0 [A] - (k_4 + k_6) [A] [P_p] + k_8 [A_p] - k_{12} [A]^2 , \tag{2.15}$$

$$0 = (k_4 + k_6) [A] [P_p] - (k_8 + k_{10}) [A_p] , \tag{2.16}$$

$$0 = - (k_3 + k_{14}) \alpha^2 + k_{10} [A_p] , \tag{2.17}$$

$$0 = k_3 \alpha^2 - k_6 [A] [P_p] - k_{15} [P_p]^2 , \tag{2.18}$$

$$0 = k_6 [A] [P_p] - k_{16} [P_v]^2 . \tag{2.19}$$

De la ecuación 2.17 obtenemos directamente  $[A_p]$ :

$$\begin{aligned}
0 &= -\alpha e^2(k_3 + k_{14}) + k_{10}[A_p] , \\
k_{10}[A_p] &= \alpha e^2(k_3 + k_{14}) , \\
[A_p] &= \alpha e^2 \frac{(k_3 + k_{14})}{k_{10}} .
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Con el resultado obtenido de  $[A_p]$  y 2.16, calculamos  $[A][P_p]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
0 &= (k_4 + k_6)[A][P_p] - (k_8 + k_{10})[A_p] , \\
(k_4 + k_6)[A][P_p] &= (k_8 + k_{10})[A_p] , \\
[A][P_p] &= \frac{(k_8 + k_{10})}{(k_4 + k_6)}[A_p] , \\
[A][P_p] &= \alpha e^2 \frac{(k_8 + k_{10})}{(k_4 + k_6)} \frac{(k_3 + k_{14})}{k_{10}} .
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Con el resultado obtenido de  $[A][P_p]$ ,  $[A_p]$  y 2.15, calculamos  $[A]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
0 &= k_0[A] - (k_4 + k_6)[A][P_p] + k_8[A_p] - k_{12}[A]^2 , \\
0 &= k_{12}[A]^2 - k_0[A] + (k_4 + k_6)[A][P_p] - k_8[A_p] , \\
0 &= k_{12}[A]^2 - k_0[A] + (k_4 + k_6)\alpha e^2 \frac{(k_8 + k_{10})}{(k_4 + k_6)} \frac{(k_3 + k_{14})}{k_{10}} - \alpha e^2 k_8 \frac{(k_3 + k_{14})}{k_{10}} , \\
0 &= k_{12}[A]^2 - k_0[A] + \alpha e^2(k_3 + k_{14}) .
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Notar que, esta es una ecuación cuadrática en  $[A]$ , que se puede resolver usando la fórmula general de resolución de ecuaciones cuadráticas. Donde

$$\begin{aligned}
a &= k_{12} , \\
b &= -k_0 , \\
c &= \alpha e^2(k_3 + k_{14}) .
\end{aligned}$$

Por lo tanto, obtenemos que:

$$\begin{aligned}
[A] &= \frac{k_0 \pm \sqrt{(-k_0)^2 - 4\alpha e^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} , \\
[A] &= \frac{k_0 \pm \sqrt{k_0^2 - 4\alpha e^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} .
\end{aligned} \tag{2.23}$$

**Nota 2.10.** Si bien los resultados que encontramos para  $[A]$  en 2.23 son dos raíces, debemos evaluar si el valor de estas raíces de  $[A] \in \mathbb{R}^+$  en consideración al contexto biológico implicado.

**Nota 2.11.** Por las definiciones realizadas sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_3, k_6, k_{12}, k_{14}, k_{15}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que obtenemos:

$$\frac{k_0 \pm \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \geq 0 ,$$

$$k_0 \pm \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} \geq 0 ,$$

De la nota 2.11 tenemos que realizar los siguientes análisis:

$$\begin{aligned} k_0 + \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\geq 0 , \\ k_0 + \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\geq 0 , \\ \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\geq k_0 , \\ k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) &\geq k_0^2 , \\ -4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) &\geq 0 , \\ 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) &\leq 0 . \end{aligned} \tag{2.24}$$

Condición que no se cumple en ningún caso, ya que todos los valores son  $\in \mathbb{R}^+$ .

$$\begin{aligned} k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\geq 0 , \\ k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\geq 0 , \\ \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})} &\leq k_0 , \\ k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) &\leq k_0^2 , \\ -4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) &\leq 0 . \end{aligned} \tag{2.25}$$

Condición que se cumple en todos los casos (menos para = 0), ya que todos los valores son  $\in \mathbb{R}^+$ .

En conclusión, de los análisis de condiciones (2.24) y (2.25) concluimos que la solución plausible para  $[A]$ , en contexto biológico, es:

$$[A] = \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} . \tag{2.26}$$

Con el resultado obtenido de  $[A]$  y 2.18, calculamos  $[P_p]$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
0 &= k_3\alpha^2 - k_6[A][P_p] - k_{15}[P_p]^2, \\
0 &= k_{15}[P_p]^2 + k_6[A][P_p] - k_3\alpha^2, \\
0 &= k_{15}[P_p]^2 + k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) [P_p] - k_3\alpha^2.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Notar que, esta es una ecuación cuadrática en  $[P_p]$ , que se puede resolver usando la fórmula general de resolución de ecuaciones cuadráticas. Donde

$$\begin{aligned}
a &= k_{15}, \\
b &= k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right), \\
c &= -k_3\alpha^2,
\end{aligned}$$

Por lo tanto, obtenemos que:

$$\begin{aligned}
[P_p] &= \frac{-k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)}{2k_{15}} \\
&\quad \pm \sqrt{\left( k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}, \\
[P_p] &= \frac{-k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)}{2k_{15}} \\
&\quad \pm \sqrt{\frac{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}{2k_{15}}}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

**Nota 2.12.** Si bien los resultados que encontramos para  $[P_p]$  en 2.28 son dos raíces, debemos evaluar si el valor de estas raíces de  $[P_p] \in \mathbb{R}^+$  en consideración al contexto biológico implicado.

**Nota 2.13.** Por las definiciones realizadas sabemos que  $\{\alpha, k_0, k_3, k_{12}, k_{14}, k_{15}\} \in \mathbb{R}^+$ . Por lo que obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \frac{-k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)}{2k_{15}} \\
& \pm \sqrt{\frac{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}{2k_{15}}} \geq 0 ,
\end{aligned}$$

De la nota 2.13 tenemos que realizar los siguientes análisis:

$$\begin{aligned}
& \frac{-k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)}{2k_{15}} \\
& + \sqrt{\frac{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}{2k_{15}}} \geq 0 , \\
& + \sqrt{\frac{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}{2k_{15}}} \\
& \geq k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) \\
& k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) , \\
& \geq k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 , \\
& - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) \geq 0 .
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Condición que no se cumple en ningún caso, ya que todos los valores son  $\in \mathbb{R}^+$ .

$$\begin{aligned}
& -k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) \\
& - \frac{\sqrt{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{15}} \geq 0, \\
& - \frac{\sqrt{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{15}} \\
& \geq k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right), \\
& k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) \\
& \geq k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2, \\
& -4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14}) \geq 0.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Condición que se cumple en todos los casos (menos para = 0), ya que todos los valores son  $\in \mathbb{R}^+$ .

En conclusión, de los análisis de condiciones (2.24) y (2.25) concluimos que la solución plausible para  $[P_p]$ , en contexto biológico, es:

$$[P_p] = \frac{-k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)}{2k_{15}} \pm \frac{\sqrt{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{15}}. \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned}
0 &= k_6[A][P_p] - k_{16}[P_v]^2 , \\
0 &= k_6 \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} [P_p] - k_{16}[P_v]^2 , \\
[P_v] \left( [P_v]k_{16} - k_6 \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) &= 0 .
\end{aligned} \tag{2.32}$$

Por lo tanto, tenemos que:

$$[P_v] = 0 \vee [P_v]k_{16} - k_6 \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} = 0 . \tag{2.33}$$

Del resultado en (2.33) y el contexto biológico, finalmente, obtenemos que:

$$\begin{aligned}
[P_v]k_{16} - k_6 \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} &= 0 , \\
[P_v] &= \frac{k_6}{k_{16}} \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} .
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Por lo tanto, de la resolución analítica de los casos 2.1 y 2.2 obtuvimos como resultados que:

Ref.	Resultado	Resultado
Caso	2.1	2.2
$[A]$	$\alpha$	$\frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}}$
$[A_p]$	$\frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{k_{10}}$	$\alpha^2 \frac{(k_3 + k_{14})}{k_{10}}$
$[P]$	$\sqrt{\frac{\alpha(k_0 - \alpha k_{12})}{(k_3 + k_{14})}}$	$\alpha$
$[P_p]$	$\left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6}$	$\begin{aligned} & -k_6 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right) \\ & - \frac{\sqrt{k_6^2 \left( \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}} \right)^2}}{2k_{15}} \\ & - \frac{4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}{2k_{15}} \end{aligned}$
$[P_v]$	$\sqrt{\alpha \frac{k_6}{k_{16}} \left( \frac{k_8}{k_{10}} + 1 \right) \frac{k_0 - \alpha k_{12}}{k_4 + k_6}}$	$\frac{k_6}{k_{16}} \frac{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\alpha^2 k_{12}(k_3 + k_{14})}}{2k_{12}}$

Cuadro 2.3: Resumen de resultados de la resolución del sistema de EDOs simplificado 2.2.

En consecuencia, la diferencia fundamental entre ambos casos radica en el efecto que provoca la variable que se mantiene constante:

- En el caso  $[A] = \alpha$ , se congela una especie que actúa como sustrato en múltiples reacciones clave, simplificando sustancialmente la dinámica del sistema mediante la eliminación de términos no lineales de segundo orden en  $[A]$ .
- En cambio, en el caso  $[P] = \alpha$ , se restringe una variable que participa principalmente en procesos cuadráticos de transformación y cuya dinámica está acoplada indirectamente a otras especies mediante intermediarios como  $[P_p]$  y  $[A_p]$ , conservando así una mayor complejidad estructural en las ecuaciones restantes.

Como resultado, los comportamientos dinámicos obtenidos difieren marcadamente entre ambos escenarios. Esto evidencia que el análisis no necesariamente debe arrojar resultados

equivalentes, ya que la elección de la variable a fijar modifica la topología funcional del sistema y, por tanto, su resolución analítica. Sin embargo, podemos destacar que esta estrategia, aunque reduccionista, permite explorar distintas facetas del modelo y contribuye a una comprensión más rica de sus posibles regímenes dinámicos.

Aspecto comparado	Caso 1: $[A] = \infty$	Caso 2: $[P] = \infty$
Variable fijada	Especie base y reguladora en múltiples reacciones	Intermediario involucrado en transformaciones cuadráticas
Efecto sobre la no linealidad	Reducción significativa de términos no lineales	Se mantienen términos cuadráticos en otras especies
Simplificación de ecuaciones	Alta: permite resolver directamente varias EDOs	Baja: se conserva mayor acoplamiento entre variables
Facilidad de solución analítica	Alta: sistema parcialmente desacoplado	Baja: ecuaciones aún acopladas y no lineales
Implicancia biológica	Supone abundancia o estabilidad de $[A]$	Supone control o constancia en la población $[P]$
Resultado dinámico	Soluciones más estables y con interpretaciones directas	Mayor variabilidad en el comportamiento de las especies

Cuadro 2.4: Comparación entre los dos enfoques analíticos aplicados al sistema *RN\_AEP*.

## 2.4. Resolución numérica del modelo *RN\_AEP*

En esta sección, se presenta la implementación de la resolución numérica del modelo *RN\_AEP* mediante métodos numéricos de integración temporal, utilizando el esquema de *Euler explícito*, un método ampliamente utilizado para la aproximación de soluciones de sistemas EDOs (Burden and Faires, 2015). Este enfoque numérico permite obtener soluciones aproximadas de las dinámicas de las especies  $A$ ,  $A_p$ ,  $P$  y  $P_p$  en función del tiempo, proporcionando una visualización clara de su evolución temporal.

El método de *Euler explícito* se basa en la discretización del tiempo en pasos uniformes  $\Delta t$ , de manera que las soluciones de las variables del sistema se actualizan iterativamente de acuerdo con la siguiente expresión:

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \Delta t f(\mathbf{x}(t), t) \quad (2.35)$$

donde:

- $\mathbf{x}(t)$  representa el vector de las concentraciones de las especies en el tiempo  $t$ .

- $f(\mathbf{x}(t), t)$  es la función que describe las tasas de cambio del sistema, definida por las EDOs del modelo *RN\_AEP*.

La implementación de este método se llevó a cabo utilizando la librería PyCOT del lenguaje de programación Python, la cual proporciona herramientas avanzadas para la integración y simulación de sistemas dinámicos no lineales (Veloz, 2025). Esta librería permite definir las especies, reacciones y procesos que componen el modelo, garantizando una configuración flexible para el análisis del sistema ecológico de interacción entre áfidos, parasitoides y endosimbiontes.

El esquema de simulación numérica implementado incluye las siguientes etapas:

1. **Definición del sistema de EDOs:** Se implementa el sistema de ecuaciones diferenciales que describe la dinámica de las especies, en primera instancia para las especies  $A$ ,  $A_p$ ,  $P$  y  $P_p$  y en segunda instancia para las especies  $AE$ ,  $AE_p$ ,  $P$  y  $P_v$ , considerando las interacciones descritas en la sección 2.3.
2. **Configuración de parámetros:** Se establecen las tasas de reacción  $k_i$  correspondientes a cada proceso biológico, que fueron calibradas y validadas en función de las condiciones biológicas del sistema estudiado.
3. **Inicialización del sistema:** Se define un conjunto de condiciones iniciales para las poblaciones de las especies, representando un estado inicial del sistema.
4. **Ejecución del método de Euler explícito:** El sistema es integrado numéricamente mediante el siguiente esquema iterativo.

Para  $A$ ,  $A_p$ ,  $P$ ,  $P_p$  y  $P_v$ :

a)

$$\begin{aligned}
 [A](t + \Delta t) &= [A](t) + \Delta t \left( k_0[A](t) - (k_4 + k_6)[A](t)[P_p](t) + k_8[A_p](t) - k_{12}[A]^2(t) \right) , \\
 [A_p](t + \Delta t) &= [A_p](t) + \Delta t \left( (k_4 + k_6)[A](t)[P](t) - (k_8 + k_{10})[A_p](t) \right) , \\
 [P](t + \Delta t) &= [P](t) + \Delta t \left( k_{10}[A_p](t) - (k_3 + k_{14})[P]^2(t) \right) , \\
 [P_p](t + \Delta t) &= [P_p](t) + \Delta t \left( k_3[P]^2(t) - k_6[A](t)[P_p](t) - k_{15}[P_p]^2(t) \right) , \\
 [P_v](t + \Delta t) &= [P_v](t) + \Delta t \left( k_6[AE](t)[P_p](t) - k_{16}[P_v]^2(t) \right) .
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

y para  $AE$ ,  $AE_p$ ,  $P$ ,  $P_p$  y  $P_v$ :

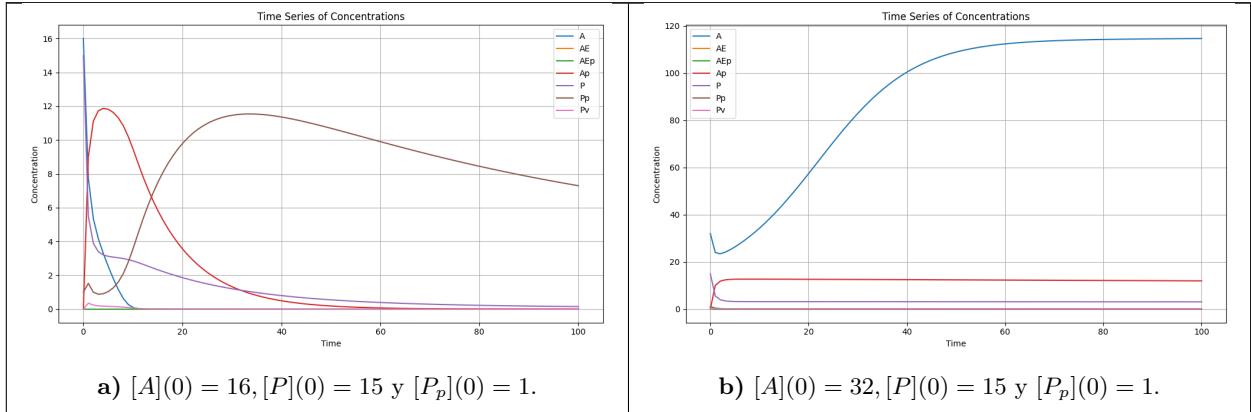
b)

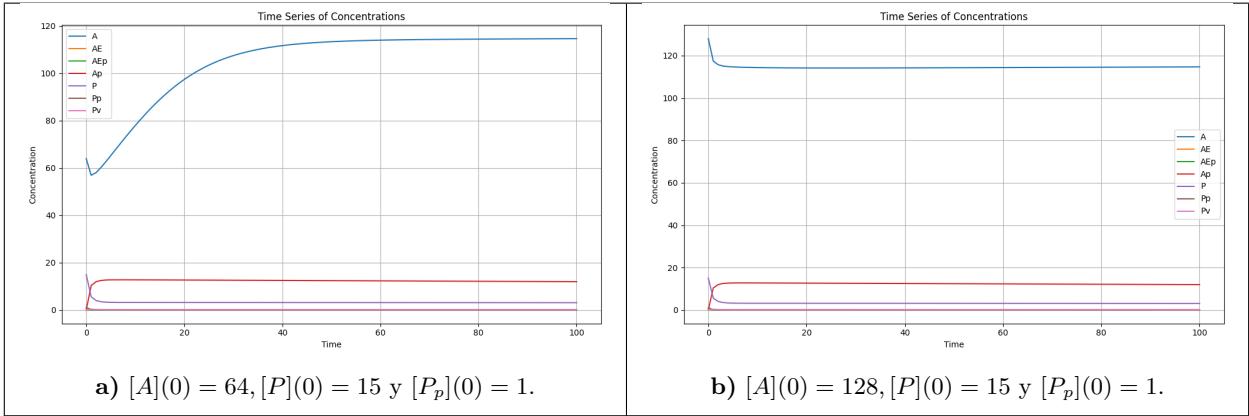
$$\begin{aligned}
 [AE](t + \Delta t) &= [AE](t) + \Delta t(k_0[AE](t) - (k_4 + k_6)[AE](t)[P_p](t) \\
 &\quad + k_8[AE_p](t) - k_{12}[AE]^2(t)), \\
 [AE_p](t + \Delta t) &= [AE_p](t) + \Delta t((k_4 + k_6)[AE](t)[P_p](t) - (k_8 + k_{10})[AE_p](t)), \\
 [P](t + \Delta t) &= [P](t) + \Delta t(k_{10}[AE_p](t) - (k_3 + k_{14})[P]^2(t)), \\
 [P_p](t + \Delta t) &= [P_p](t) + \Delta t(k_3[P]^2(t) - k_6[AE](t)[P_p](t) - k_{15}[P_p]^2(t)), \\
 [P_v](t + \Delta t) &= [P_v](t) + \Delta t(k_6[AE](t)[P_p](t) - k_{16}[P_v]^2(t)). \tag{2.37}
 \end{aligned}$$

**5. Análisis de los resultados:** Las trayectorias temporales de las especies son analizadas para identificar patrones de estabilidad, oscilación o extinción, permitiendo evaluar las condiciones de sostenibilidad del sistema en función de los parámetros del modelo.

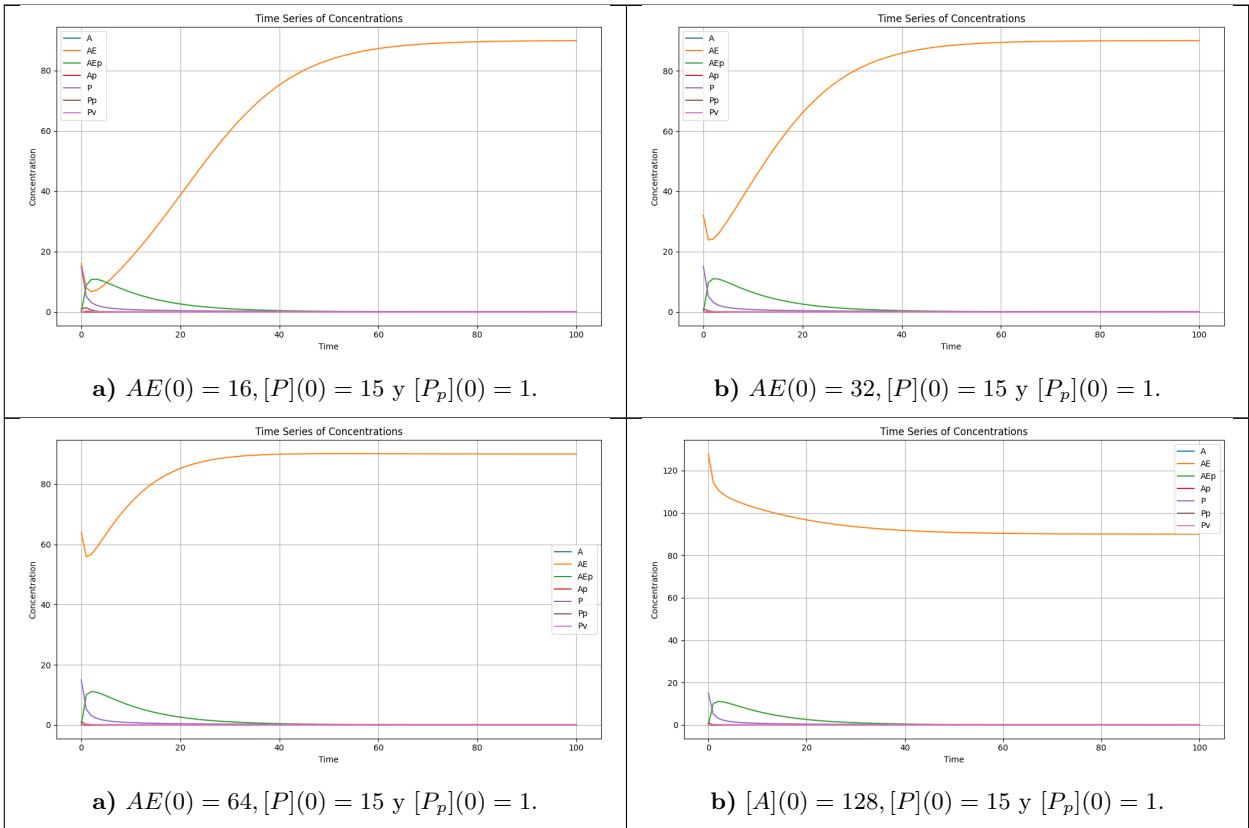
El uso del método de Euler explícito está justificado por su simplicidad y eficiencia computacional en la resolución de sistemas de EDOs. Sin embargo, se debe considerar que este método es sensible al tamaño del paso temporal  $\Delta t$ , el cual debe seleccionarse adecuadamente para garantizar la estabilidad y precisión de las soluciones obtenidas (Iserles, 2009).

Cuadro 2.5: Simulaciones dinámicas para distintas Condiciones iniciales de  $[A](0)$ ,  $[P](0)$  y  $[P_p](0)$  del sistema (2.36). Elaboración propia en *Python<sup>TM</sup>*, librería pyCOT (Veloz, 2025).





Cuadro 2.6: Simulaciones dinámicas para distintas Condiciones iniciales de  $AE(0)$ ,  $[P](0)$  y  $[P_p](0)$  del sistema (2.37). Elaboración propia en  $Python^{\text{TM}}$ , librería pyCOT (Veloz, 2025).



## 2.5. ¿Coherencia entre análisis estructural y dinámico?

El análisis estructural y el análisis dinámico del modelo *RN\_AEP* permiten evaluar la consistencia entre la configuración de las interacciones ecológicas y el comportamiento resultante del sistema. En este sentido, la coherencia entre ambos enfoques se evidencia en que las interacciones definidas en la red de reacciones y sus hipótesis subyacentes se reflejan adecuadamente en las dinámicas poblacionales observadas.

A través del análisis estructural, se identificaron las especies bióticas y abióticas, así como las interacciones clave que las conectan. Estas interacciones se modelaron mediante ecuaciones diferenciales que describen la dinámica poblacional del sistema.

Inicialmente, se realizó la resolución analítica del modelo, lo que permitió derivar soluciones generales que describen el comportamiento teórico de las poblaciones de áfidos, parasitoides y endosimbiontes bajo distintas condiciones iniciales. Posteriormente, la resolución numérica, basada en el análisis estructural, proporcionó una validación empírica de estos resultados, al permitir simular escenarios específicos y observar la evolución temporal de las poblaciones.

Los resultados numéricos, por medio del método de *Euler explícito*, fueron consistentes con las predicciones analíticas, lo que respalda la robustez del modelo y su capacidad para capturar las interacciones ecológicas clave del sistema.

En conclusión, la coherencia entre el análisis estructural y el análisis dinámico del modelo *RN\_AEP* respalda la validez del enfoque adoptado, garantizando que las hipótesis ecológicas que sustentan el modelo se reflejan adecuadamente en las dinámicas poblacionales simuladas. Esto permite utilizar el modelo como una herramienta confiable para explorar el impacto de distintas condiciones ecológicas y evaluar el papel de los endosimbiontes en la dinámica de las poblaciones de áfidos y parasitoides.

## 2.6. Introducción de perturbaciones en comunidades ecológicas

En el estudio de la sostenibilidad de las comunidades ecológicas, la persistencia de las especies es un indicador fundamental que permite evaluar la capacidad de la comunidad biológica para mantenerse a lo largo del tiempo. Sin embargo, las comunidades ecológicas no existen en un estado aislado, sino que están sujetas a una amplia variedad de factores externos e internos que pueden alterar sus dinámicas. Estas alteraciones, conocidas como perturbaciones, juegan un papel crucial en la estabilidad y sostenibilidad del sistema, al modificar las interacciones entre las especies y las condiciones ambientales que las sustentan (Connell, 1978; Dakos et al., 2008).

Las perturbaciones pueden manifestarse de diversas formas, desde eventos esporádicos como fenómenos climáticos extremos, hasta cambios graduales en las condiciones ambientales o la introducción de nuevas especies. En el contexto de esta investigación, estudiaremos perturbaciones estructurales, las que se definen como:

- a) La inclusión de una concentración determinada de una especie en el sistema en un tiempo específico  $t_p$ .
- b) La inclusión de una interacción ( $r_i$ ) definida en la RN en un tiempo específico  $t_p$ .

Esta definición formaliza el concepto de perturbación estructural como una alteración medible que puede afectar directamente las concentraciones de las especies en el espacio de estados del sistema.

La introducción de perturbaciones estructurales permite explorar cómo los sistemas ecológicos responden a cambios en sus estados en el largo plazo, desde la perspectiva de RN + COT, concretamente la estructura de la organización predominante. Para cuantificar su impacto, es necesario considerar la persistencia de las especies en presencia de dichas perturbaciones, lo que implica analizar cómo las concentraciones de las especies se mantienen o desaparecen a lo largo del tiempo. En esta sección, se realiza una aproximación para analizar el efecto de las perturbaciones estructurales del tipo a), es decir, incluiremos una concentración determinada ( $C(t_p)$ ) en un tiempo determinado ( $t_p$ ), utilizando el marco de la persistencia definido previamente. Esto permitirá una comprensión rigurosa de los mecanismos que determinan la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales, que será abordada en la parte (II) de esta investigación .

### 2.6.1. Perturbaciones y persistencia ecológica

La variabilidad en las comunidades ecológicas surge tanto de procesos internos, como las dinámicas contextuales de interacción entre especies, como de factores externos, entre los que

destacan las perturbaciones ambientales. Estas últimas representan una de las principales fuerzas que influyen en la estructura, dinámica y persistencia de las especies a lo largo del tiempo (May, 1972; Chesson, 2000; Levin, 1998). Como una primera aproximación, la presente investigación ha modelado las perturbaciones como la inclusión de una concentración de una especie en un tiempo específico  $t_p$ . Esta aproximación permite analizar cómo la introducción o aumento puntual de una especie impacta la estabilidad del sistema. Formalmente, la inclusión de una perturbación en el sistema se describe como:

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \begin{cases} \mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{x}_p(t) & t = t_p \\ \mathbf{x}(t) & t \neq t_p \end{cases} \quad (2.38)$$

donde:

- $\mathbf{x}$  representa el vector de concentraciones de las especies en el tiempo  $t$ .
- $\Delta \mathbf{x}_p(t)$  representa el vector de concentraciones de las especies. Por lo que, corresponde a la perturbación que se busca realizar en  $t_p$ .
- $t_p$  es el tiempo específico en el cual se aplica la perturbación.

Desarrollamos un *Script* de *Python*<sup>TM</sup> para la simulación numérica del modelo *RN\_AEP* con la inclusión de la perturbación (ver Apéndice A.1). Esta perturbación se implementa de manera que cuando  $t = t_p$ , el método numérico de *Euler explícito* toma las concentraciones iniciales de las especies en ese instante como:

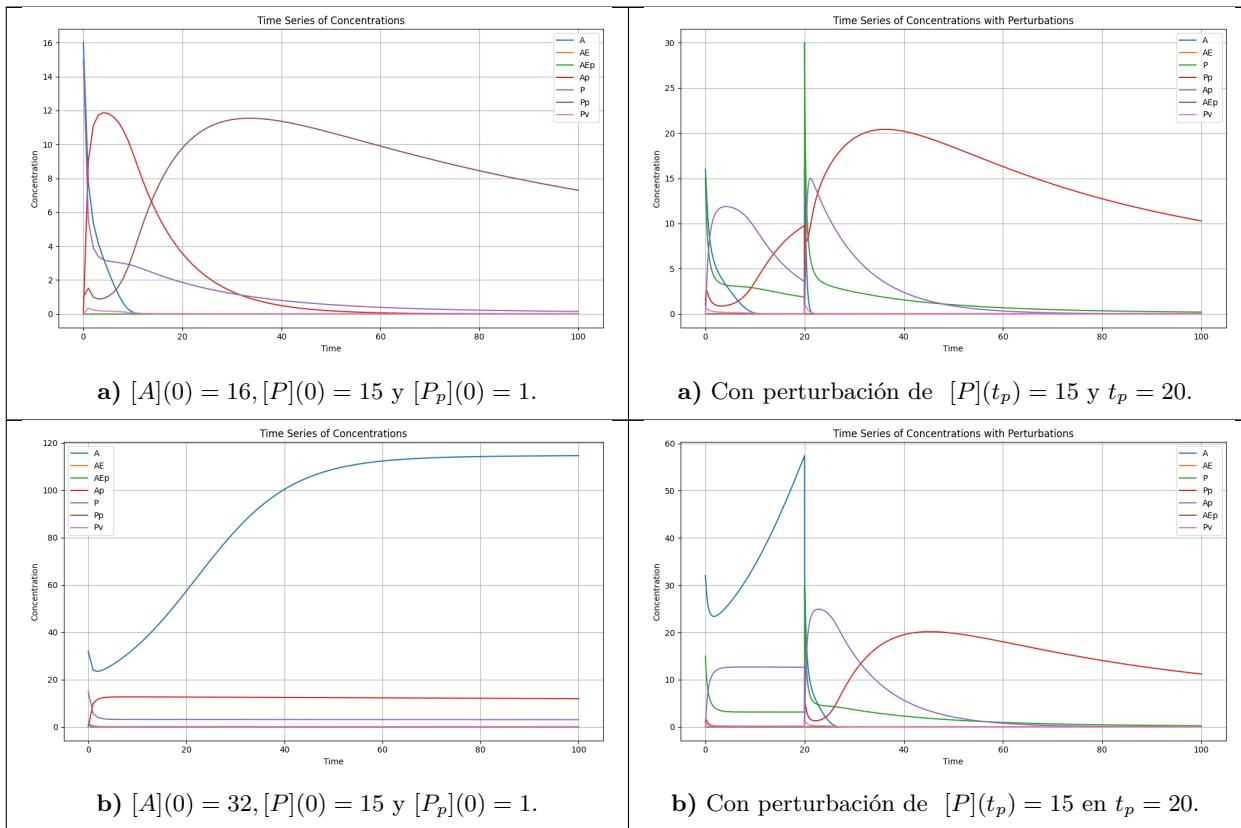
$$\mathbf{x}(t_p) = \mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{x}_p \quad (2.39)$$

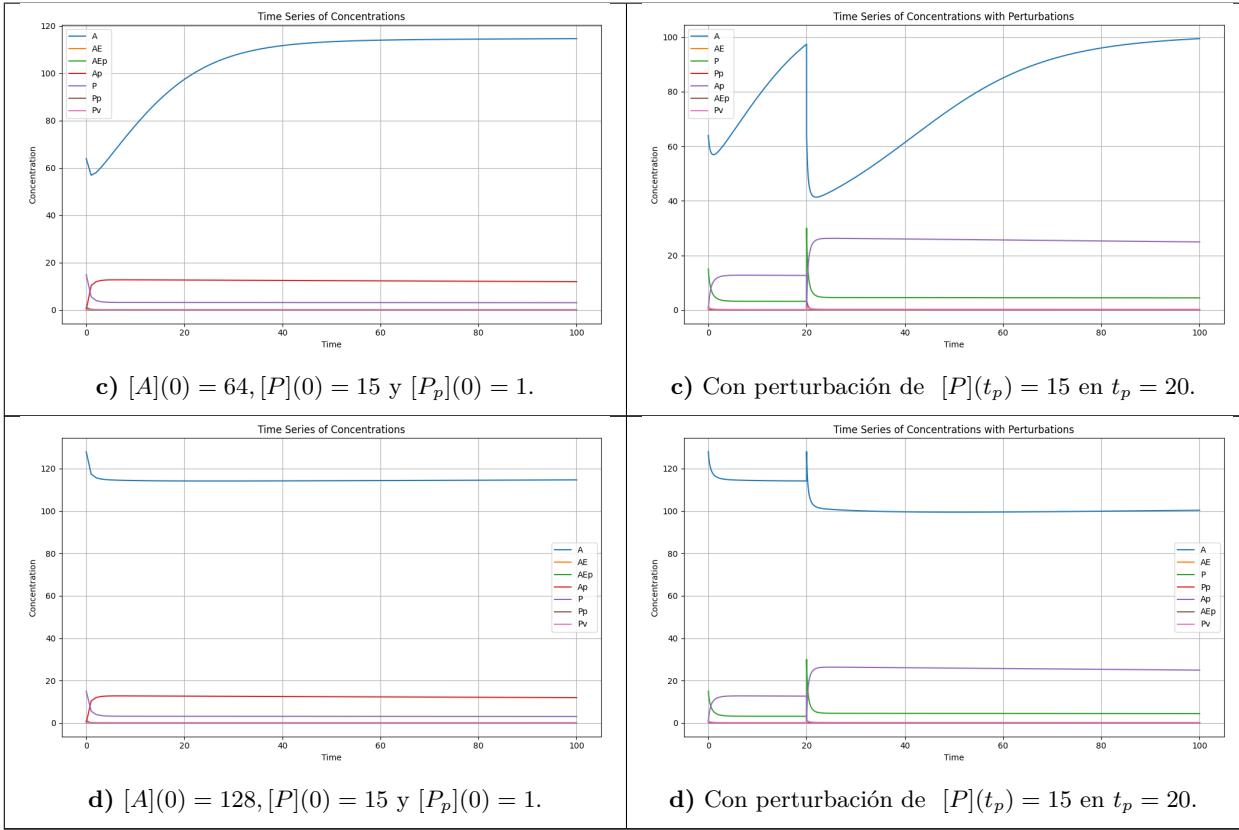
De este modo, el cálculo de la evolución dinámica continúa desde las nuevas concentraciones perturbadas. Esto garantiza que el sistema reaccione inmediatamente a la perturbación introducida, permitiendo evaluar su impacto en las trayectorias de las especies y su capacidad de persistencia. Por lo tanto, esta formulación permite evaluar si el sistema ecológico es capaz de absorber las perturbaciones y retornar a un estado de equilibrio, o si, por el contrario, dichas perturbaciones desencadenan procesos que conducen a la extinción de una o más especies.

La implementación de las perturbaciones se llevó a cabo en el marco del modelo *RN\_AEP*, cuyas soluciones numéricas se obtuvieron mediante el método de *Euler explícito*, tal como se describe en la sección 2.4. Este esquema numérico fue aplicado tanto al sistema original  $(A, A_p, P, P_p)$  como a su versión modificada  $(AE, AE_p, P, P_p)$ , mediante el ingreso en  $t_p = 20$  de  $[P](t_p) = 15$  como perturbación, lo que permite contrastar las respuestas del sistema ante condiciones iniciales y perturbaciones específicas. Los resultados obtenidos son presentados en los cuadros (2.7 y 2.9), que recogen las simulaciones dinámicas del sistema bajo diferentes condiciones iniciales y una perturbación, detallada debajo de cada gráfica, común para todas las simulaciones.

A través de esta metodología, se busca no solo observar las trayectorias temporales de las especies bajo perturbación, sino también comparar estos resultados con los obtenidos sin perturbación. Esta comparación permite identificar las condiciones bajo las cuales las especies logran persistir, incluso ante alteraciones, y establecer una relación entre la magnitud de la perturbación y la capacidad de recuperación del sistema. En los análisis posteriores, se evaluará visualmente la respuesta del sistema perturbado en contraposición a su dinámica inicial, permitiendo una interpretación clara del impacto de las perturbaciones estructurales en la sostenibilidad ecológica.

Cuadro 2.7: Comparativa para simulaciones dinámicas con y sin perturbación, para distintas Condiciones iniciales de  $[A](0)$ ,  $[P](0)$  y  $[P_p](0)$  del sistema (2.36). Cálculos en *Python<sup>TM</sup>* Apéndice A.1).



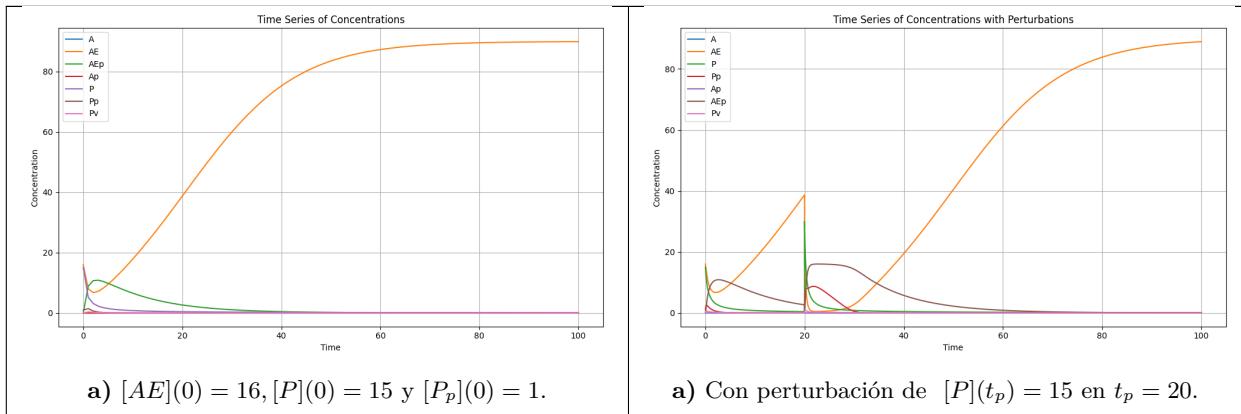


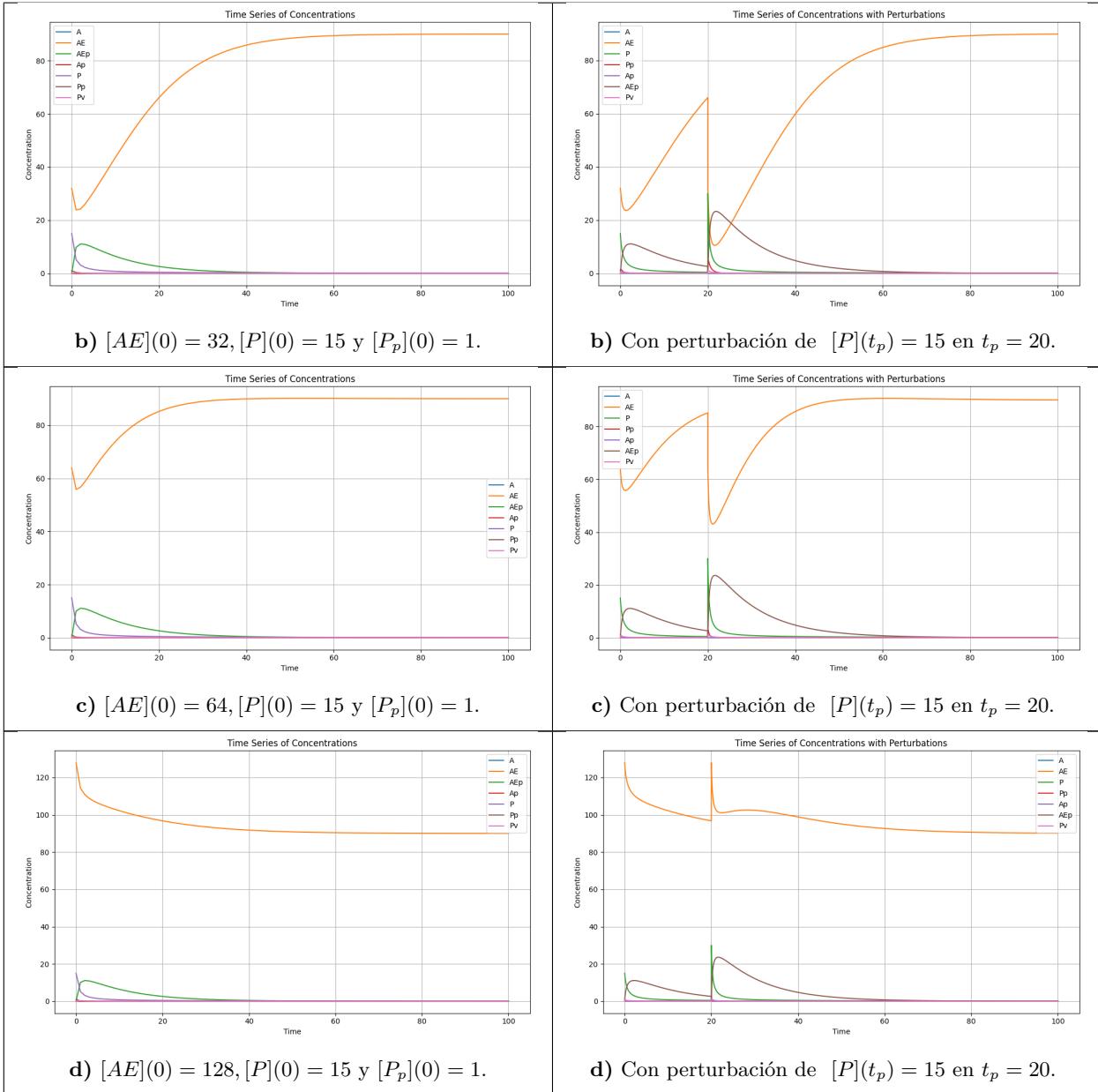
Cuadro 2.8: Resumen cuadro comparativo de los resultados del Cuadro 2.7 de simulaciones dinámicas con y sin perturbación.

Condiciones iniciales	Perturbación	Estado final	Comentario
a) $[A](0) = 16, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	$(P, P_p, P_v)$	Los parasitoides extinguen a los áfidos.
	SI	$(P, P_p, P_v)$	Los parasitoides extinguen a los áfidos antes del ingreso de $[P](t_p)$ . El efecto de la perturbación se refleja en el aumento de $[P_p](100)$ .
b) $[A](0) = 32, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	$(A, A_p, P, P_p, P_v)$	Áfidos y parasitoides coexisten.

Condiciones iniciales	Perturbación	Estado final	Comentario
	SI	$(P, P_p, P_v)$	Los parasitoides extinguen a los áfidos después del ingreso de $[P](t_p)$ .
c) $[A](0) = 64, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	$(A, A_p, P, P_p, P_v)$	Áfidos y parasitoides coexisten.
	SI	$(A, A_p, P, P_p, P_v)$	Áfidos y parasitoides coexisten. El efecto de la perturbación se refleja en el aumento de concentración final de $[A_p](100)$ y $[P_p](100)$ .
d) $[A](0) = 128, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	$(A, A_p, P, P_p, P_v)$	Áfidos y parasitoides coexisten.
	SI	$(A, A_p, P, P_p, P_v)$	Áfidos y parasitoides coexisten. El efecto de la perturbación se refleja en la disminución de $[A](100)$ y el aumento de $[A_p](100)$ y $[P_p](100)$ .

Cuadro 2.9: Comparativa para simulaciones dinámicas con y sin perturbación, para distintas Condiciones iniciales de  $AE(0)$ ,  $[P](0)$  y  $[P_p](0)$  del sistema (2.37). Cálculos en *Python<sup>TM</sup>* Apéndice A.1).





Cuadro 2.10: Resumen cuadro comparativo de los resultados del Cuadro 2.9 de simulaciones dinámicas con y sin perturbación.

Condiciones iniciales	Perturbación	Estado final	Comentario
a) $[AE](0) = 16, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	(AE)	Los áfidos con endosimbiontes controlan el parasitismo.
	SI	(AE)	La perturbación se refleja en $t_p$ con la disminución de $[AE](t_p) \approx 0$ . Sin embargo, los áfidos con endosimbiontes neutralizan el efecto de la inclusión de $[P](t_p)$ y controlan el potencial parasitismo.
b) $[AE](0) = 32, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	(AE)	Los áfidos con endosimbiontes controlan el parasitismo.
	SI	(AE)	La perturbación se refleja en $t_p$ con la disminución de $[AE](t_p) \approx 0$ . Sin embargo, los áfidos con endosimbiontes neutralizan el efecto de la inclusión de $[P](t_p)$ y controlan el potencial parasitismo.
c) $[AE](0) = 64, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	(AE)	Los áfidos con endosimbiontes controlan el parasitismo.
	SI	(AE)	La perturbación se refleja en $t_p$ con la disminución de $[AE](t_p) \approx 0$ . Sin embargo, los áfidos con endosimbiontes neutralizan el efecto de la inclusión de $[P](t_p)$ y controlan el potencial parasitismo.
d) $[AE](0) = 128, [P](0) = 15$ y $[P_p](0) = 1$	NO	(AE)	Los áfidos con endosimbiontes controlan el parasitismo.

Condiciones iniciales	Perturbación	Estado final	Comentario
	SI	(AE)	La perturbación se refleja en $t_p$ con la disminución de $[AE](t_p) \approx 0$ . Sin embargo, los áfidos con endosimbiontes neutralizan el efecto de la inclusión de $[P](t_p)$ y controlan el potencial parasitismo.

Los resultados presentados en los Cuadros (2.7 y 2.9), junto con los resúmenes detallados en los Cuadros 2.8 y 2.10, evidencian de forma concreta y explícita el impacto diferencial de las perturbaciones aplicadas en el sistema. Las simulaciones muestran cómo la adición puntual de una concentración adicional de 20 de la especie  $P$  en el instante específico  $t_p$  provoca modificaciones claras en las trayectorias dinámicas de las especies involucradas, con efectos que varían según las condiciones iniciales y la composición específica del sistema.

Por ejemplo, en el Cuadro 2.8, bajo condiciones iniciales con bajas concentraciones de áfidos  $A$ , la introducción de la perturbación no altera la extinción temprana de los áfidos por parte de los parasitoides, aunque sí se observa un aumento en la concentración final de los parasitoides  $P_p$ . En contraste, para concentraciones iniciales medias y altas de  $A$ , la perturbación provoca cambios en la coexistencia de especies, reflejados en variaciones cuantitativas en las concentraciones finales de  $A_p$  y  $P_p$ , y en algunos casos, una reducción significativa de  $A$ , evidenciando una respuesta dinámica ajustada al estímulo externo.

Por su parte, en el Cuadro 2.10), que involucra áfidos con endosimbiontes  $AE$ , se observa que, a pesar de la disminución brusca en la concentración de  $AE$  en el momento de la perturbación  $t_p$ , esta población logra neutralizar el efecto de la introducción de  $P$ , manteniendo un control efectivo sobre el parasitismo y preservando su estabilidad poblacional a lo largo del tiempo.

Este análisis detallado de las trayectorias pre y post perturbación permite no solo verificar la capacidad del modelo para captar la estabilidad y respuesta dinámica del sistema, sino también identificar condiciones específicas bajo las cuales el sistema muestra resiliencia o vulnerabilidad frente a perturbaciones puntuales. Por ende, los resultados respaldan la utilidad del modelamiento para explorar escenarios ecológicos reales, aunque reconocen la necesidad de validar y extender estos enfoques a comunidades ecológicas más complejas y heterogéneas.



## Parte II

# Sostenibilidad en comunidades ecológicas reales



# Introducción

En esta parte de la investigación, modelaremos una comunidad ecológica real utilizando redes de reacciones (RN). La aplicabilidad de este marco teórico se exploró, específicamente, a través del estudio de la comunidad ecológica de la Isla Navarino (*RN\_IN*). Isla que está ubicada en el extremo sur de Chile, un entorno ecológico complejo que se caracteriza por una gran diversidad de especies y dinámicas interacciones entre ellas. Esta comunidad ecológica ha sido objeto de investigación, y se ha trabajado en colaboración con un experto ecólogo, lo que ha permitido obtener información empírica relevante para la validación del modelo propuesto.

El Capítulo 3 expone la metodología utilizada para modelar este tipo de comunidades ecológicas, destacando la implementación de los resultados obtenidos en la Parte I de la investigación, los cuales permitieron aplicar herramientas matemáticas que describen las interacciones ecológicas complejas y su evolución estructural en el contexto de comunidades ecológicas con interacciones complejas. Para ilustrar estos conceptos, se utilizarán como guía los resultados obtenidos en el trabajo de Crego et al. (2016), que describe interacciones en una comunidad ecológica de la Isla Navarino en el marco del modelamiento por redes tróficas.

En el Capítulo 4, presentamos un enfoque numérico para analizar la sostenibilidad de comunidades ecológicas a través del estudio de sus regímenes de persistencia. Mediante el análisis de abstracciones del sistema *RN\_IN*, identificamos las configuraciones estructurales que caracterizan las posibles formas de organización ecológica del sistema. Posteriormente, a través de simulaciones dinámicas, evaluamos la estabilidad de estas abstracciones, utilizando un modelo basado en RN y técnicas de simulación estocástica. Desarrollamos e implementamos un algoritmo que permite generar condiciones iniciales, simular la evolución de las abstracciones y construir una matriz de transición de Markov. Finalmente, calculamos las probabilidades de sostenibilidad para cada abstracción (o subconjuntos potenciales). Este enfoque permite cuantificar la capacidad de las abstracciones para mantener su estructura a lo largo del tiempo, proporcionando una medida clara de su persistencia y contribuyendo a una comprensión profunda de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales.



## Capítulo 3

# Modelamiento de comunidades ecológicas reales

Como caso de comunidad ecológica real tomaremos La Isla Navarino, que está ubicada en el extremo sur de Chile y forma parte de la Reserva de la Biosfera Cabo de Hornos, constituyendo un ejemplo destacado de la región subantártica magallánica. Esta comunidad ecológica alberga una biodiversidad única, caracterizada por bosques de especies nativas como *Nothofagus betuloides*, *Nothofagus pumilio* y *Drimys winteri*, así como complejos de turberas y praderas que conforman el paisaje natural de la isla. Sin embargo, a lo largo de los años, este entorno ha sido afectado por la introducción de varias especies invasoras, particularmente mamíferos como el castor americano (*Castor canadensis*), la rata almizclera (*Ondatra zibethicus*) y el visón americano (*Neovison vison*), cuyas interacciones han alterado las estructuras y procesos ecológicos de la comunidad ecológica local (Crego et al., 2016).

El castor americano, reconocido como un “ingeniero de ecosistemas”, ha modificado significativamente los hábitats acuáticos a través de la construcción de presas, alterando los ciclos de nutrientes y transformando grandes áreas de bosques de *Nothofagus* en praderas dominadas por hierbas y plantas acuáticas. Esta transformación de los hábitats ha creado condiciones propicias para el establecimiento de otras especies invasoras, como la rata almizclera, que se beneficia de estos ambientes modificados por los castores. Además, el visón, un “depredador generalista”, ha encontrado en estas nuevas condiciones ecológicas una fuente abundante de presas, impactando gravemente la fauna nativa, especialmente las aves y mamíferos pequeños.

La comunidad ecológica de la Isla Navarino, caracterizada por su topografía montañosa y su clima frío y oceánico, proporciona un contexto ideal para estudiar las interacciones entre especies invasoras en un entorno relativamente aislado. Estas interacciones, en su mayoría facilitadoras, dan lugar a un proceso conocido como “derrumbe invasivo” o *invasional melt-down*, donde las especies invasoras se benefician mutuamente, amplificando sus impactos sobre la biodiversidad local Crego et al. (2016). El estudio de estos efectos no solo es crucial para

comprender los impactos ecológicos a nivel local, sino también para desarrollar estrategias de conservación y manejo adaptadas a la restauración de sistemas ecológicos afectados por invasiones biológicas.

En este capítulo, se presenta un modelo matemático que busca representar las interacciones entre estas especies invasoras y su impacto sobre la estructura y funcionalidad de la comunidad ecológica de la Isla Navarino. El modelo considera las alteraciones en los hábitats acuáticos y terrestres, las redes tróficas modificadas por la presencia de estas especies, y los efectos a largo plazo sobre la biodiversidad nativa. Esta aproximación proporciona una herramienta útil para evaluar la sostenibilidad de las comunidades ecológicas en áreas afectadas por invasiones biológicas y es un ejemplo de cómo las redes de reacciones pueden utilizarse para modelar interacciones complejas en la ecología de sistemas naturales.

### **3.1. Modelo de una comunidad ecológica real: Isla Navarino.**

#### **3.1.1. Análisis de la modelación ecológica tradicional en Isla Navarino**

El estudio de Crego et al. (2016) en la Isla Navarino utiliza la modelación ecológica tradicional a través de redes tróficas para comprender las interacciones entre especies invasoras y su impacto en la comunidad ecológica. Este enfoque permite visualizar las relaciones alimentarias y los flujos de energía dentro del sistema, representando las interacciones entre el castor americano, la rata almizclera y el visón americano, especies invasoras que alteran profundamente los hábitats y las dinámicas tróficas locales. La red trófica facilita la identificación de cómo estas especies modifican la comunidad ecológica al influir en las cadenas alimentarias y generar efectos energéticos.

Sin embargo, las redes tróficas presentan una estructura simplificada de las interacciones ecológicas, mostrando cómo las especies invasoras afectan a las nativas. En el caso de la Isla Navarino, el castor altera el hábitat acuático creando presas que favorecen la presencia de la rata almizclera, lo que a su vez beneficia al visón como depredador de la rata. Este modelo tradicional ayuda a representar cómo las especies interactúan a nivel trófico, pero tiene limitaciones al no capturar la complejidad de los efectos indirectos y las interacciones contextuales que ocurren en la comunidad ecológica. Los cambios en el hábitat, la competencia y la modificación de los ciclos de nutrientes no siempre son reflejados adecuadamente.

En consecuencia, aunque la modelación a través de redes tróficas proporciona una base útil para entender las dinámicas alimentarias, su simplicidad puede limitar la capacidad de representar de manera precisa los impactos ecológicos de las especies invasoras en sistemas complejos como el de la Isla Navarino. Para abordar esta complejidad, sería necesario integrar enfoques de modelado más sofisticados que incluyan factores ambientales, efectos espaciales y contextuales, y que consideren los impactos indirectos de las interacciones. Este tipo de

modelos avanzados permitiría una mejor comprensión de los procesos ecológicos y ofrecería herramientas más efectivas para la gestión y conservación de las comunidades ecológicas afectadas por invasiones biológicas.

### **3.1.2. Procedimiento de modelado con RN de la comunidad ecológica Isla Navarino**

El procedimiento de modelado de la comunidad ecológica de la Isla Navarino con RN implica una integración de conocimiento empírico obtenidos a partir de estudios previos y la experticia ecológica local. En el estudio de Crego et al. (2016), se identificaron y analizaron las interacciones tróficas entre las especies invasoras, como el castor, la rata almizclera y el visón, utilizando redes tróficas como base. Este enfoque se complementó con el conocimiento empírico proporcionado por un experto en el ecosistema subantártico, que aportó información valiosa sobre la dinámica de especies nativas y la alteración de hábitats por especies invasoras. A través de la aplicación de RN, modelamos las relaciones complejas entre estas especies, incorporando no solo las interacciones alimentarias directas, sino también los efectos indirectos sobre la estructura ecológica de la comunidad ecológica. Generaremos abstracciones de la comunidad ecológica, con el objetivo de realizar una primera aproximación a la cuantificación de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales. Este enfoque híbrido, que combina el análisis empírico y las herramientas de modelado avanzadas, proporciona un marco robusto para simular y estimar los efectos de las especies invasoras en una comunidad ecológica compleja y dinámica como la de la Isla Navarino.

### **3.1.3. Narrativa ecológica**

#### **Introducción**

Las interacciones ecológicas entre especies invasoras son un componente crucial para comprender la dinámica de las comunidades ecológicas afectadas por procesos de invasión biológica. En el sistema de la Isla Navarino, las interacciones entre el castor americano (*Castor canadensis*), la rata almizclera (*Ondatra zibethicus*) y el visón americano (*Neovison vison*) forman una red de relaciones ecológicas que impacta de manera significativa en las comunidades nativas y las condiciones ambientales de este ecosistema subantártico (**Hipótesis 0**).

Es en este contexto, que los procesos que se abarcarán corresponden principalmente a los de modificación del hábitat, alimentación, reproducción, depredación y competencia, interacciones entre especies, procesos de descomposición y ciclo de nutrientes e interacciones intraespecíficas; de esta manera, se está proporcionando una base sólida para el desarrollo del modelo matemático asociado.

## Desarrollo

### Modificación del Hábitat por Castor (Hipótesis 1 a 6)

El castor, como especie ingeniera ecosistémica, modifica el hábitat construyendo represas y castoreras. Estas transforman bosques de *Nothofagus spp.* en humedales dominados por pastos exóticos y aguas estancadas. Las represas bloquean el flujo de cauces, generando lagunas y espacios ribereños post-aluviones, lo que transforma ecosistemas forestales en humedales abiertos (**Hipótesis 1**). La acumulación de agua en las lagunas favorece la disponibilidad de hábitats acuáticos para especies como el puye (*Galaxias maculatus*) y la trucha (*Oncorhynchus spp.*), ampliando la red trófica acuática (**Hipótesis 2**). El establecimiento de castoreras proporciona refugio y áreas seguras para la reproducción del castor, fortaleciendo su capacidad de expansión (**Hipótesis 3**). Las represas alteran el flujo natural del agua, modificando las condiciones de los cauces y promoviendo la formación de llanuras y áreas inundadas (**Hipótesis 4**). El aumento de infraestructura construida por el castor desplaza especies vegetales nativas, favoreciendo la colonización de pastos exóticos (**Hipótesis 5**). La transformación de los bosques en humedales reduce la disponibilidad de hábitats forestales continuos, afectando la distribución de aves y pequeños mamíferos (**Hipótesis 6**).

### Establecimiento de la Rata Almizclera (Hipótesis 7 a 12)

La rata almizclera, una especie semiacuática, encuentra en los humedales modificados por el castor las condiciones adecuadas para establecerse, alimentarse y reproducirse en refugios ribereños (**Hipótesis 7**). El uso de pastos exóticos como alimento por la rata almizclera indica que la vegetación introducida facilita su supervivencia (**Hipótesis 8**). Los refugios ribereños proporcionan protección para su reproducción, estableciendo poblaciones estables en las zonas intervenidas (**Hipótesis 9**). La proximidad entre recursos alimenticios y refugios aumenta la eficiencia energética y el éxito reproductivo de la rata almizclera (**Hipótesis 10**). La rata almizclera se convierte en una presa clave para el visón, estableciendo una relación trófica directa (**Hipótesis 11**). La presencia estable de la rata almizclera facilita la expansión del visón en áreas ribereñas, mejorando su éxito reproductivo (**Hipótesis 12**).

### Depredación y Competencia del Visón (Hipótesis 13 a 18)

El visón, un depredador generalista, se beneficia de la transformación del hábitat por el castor, ya que las poblaciones de rata almizclera representan una fuente importante de alimento (**Hipótesis 13**). Además, el visón depreda sobre aves acuáticas, aves pequeñas y roedores, afectando negativamente sus poblaciones (**Hipótesis 14**). La disponibilidad y diversidad de presas en zonas ribereñas y humedales condiciona la dieta del visón y su éxito reproductivo (**Hipótesis 15**). El visón también depreda sobre peces como el puye y la trucha, integrándose en múltiples niveles tróficos y ampliando su nicho ecológico (**Hipótesis 16**). El establecimiento del visón puede provocar efectos en cascada en la red trófica, debido a su impacto sobre

múltiples niveles funcionales (**Hipótesis 17**) . La presión predatoria del visón, combinada con su alta tasa reproductiva, representa una amenaza constante para la resiliencia de las comunidades nativas (**Hipótesis 18**).

### Interacciones con Otras Especies (Hipótesis 19 a 25)

La alteración del bosque nativo por talas de castores y la consecuente apertura del dosel facilitan la colonización por pastos exóticos, desplazando a especies vegetales nativas (**Hipótesis 19**). El cambio en la estructura vegetal afecta negativamente a aves nativas como el pájaro carpintero, al reducir la disponibilidad de árboles muertos y maduros necesarios para nidificación (**Hipótesis 20**). Las aves pequeñas y aves acuáticas sufren efectos indirectos por la pérdida de hábitat y la presión predatoria del visón (**Hipótesis 21**). Los pequeños roedores nativos enfrentan depredación por parte del visón, reduciendo su abundancia poblacional (**Hipótesis 22**). Las modificaciones del hábitat inducidas por castores y la expansión del visón generan impactos acumulativos que reducen la resiliencia del sistema ecológico (**Hipótesis 23**). Las condiciones medioambientales críticas, como lluvias intensas o deshielos, promueven aluviones que alteran el flujo de los cauces y fomentan la creación de espacios ribereños (**Hipótesis 24**). Estos eventos ambientales recurrentes contribuyen a la persistencia de especies invasoras oportunistas como el castor, la rata almizclera y el visón (**Hipótesis 25**).

### Procesos de Descomposición y Ciclo de Nutrientes (Hipótesis 26 a 28)

Los árboles muertos (*Nothofagus spp.*) y otros restos vegetales que se acumulan en las áreas intervenidas por castores entran en procesos de descomposición, promovidos por insectos y microorganismos (**Hipótesis 26**). La descomposición del material orgánico en las lagunas aumenta los nutrientes del suelo, **alterando la composición química del sustrato y potenciando la sucesión de especies vegetales invasoras (Hipótesis 27)**. La acumulación de restos vegetales en el fondo de las lagunas establece un nicho para comunidades de invertebrados acuáticos detritívoros, formando la base de una red trófica que soporta indirectamente a peces como el puye y la trucha (**Hipótesis 28**).

### Competencia entre Especies Acuáticas (Hipótesis 29 a 31)

La presencia de trucha (*Oncorhynchus spp.*) en las lagunas limita la abundancia de puye (*Galaxias maculatus*) debido a la competencia por recursos alimenticios (**Hipótesis 29**). La competencia entre trucha y puye modifica la estructura de la red trófica acuática, afectando la disponibilidad de presas para el visón (**Hipótesis 30**). Las lagunas más grandes formadas por represas mantienen poblaciones más diversas de peces, reduciendo los efectos negativos de la competencia entre trucha y puye (**Hipótesis 31**).

### Interacciones Intraespecíficas (Densidad Dependiente) (Hipótesis 32 a 34)

La alta densidad de castores en una misma área provoca una reducción en su éxito reproductivo debido a la competencia por recursos de construcción y alimentación (**Hipótesis 32**). El incremento en la población de visones aumenta la competencia por presas, reduciendo su éxito reproductivo y favoreciendo su dispersión hacia nuevas áreas (**Hipótesis 33**). La saturación de refugios ribereños limita la capacidad de reproducción de la rata almizclera, reduciendo su éxito poblacional (**Hipótesis 34**).

### 3.1.4. Red de reacciones Isla Navarino (*RN\_IN*)

A partir de la narrativa ecológica desarrollada, se identificaron las entidades bióticas y abióticas que conforman la comunidad ecológica de la Isla Navarino y las interacciones que las conectan. Estas entidades y sus interacciones se organizaron en una red de reacciones (*RN\_IN*) que captura los procesos de modificación del hábitat, alimentación, reproducción, competencia y mortalidad que caracterizan este sistema. El Cuadro 3.1 presenta las entidades definidas para el modelo, mientras que el Cuadro 3.2 describe las interacciones ecológicas modeladas. Esta red proporciona una base clara para la representación matemática y simulación del sistema.

Cuadro 3.1: Especies bióticas y abióticas consideradas para el modelo RN.

<b>Id</b>	<b>Nomenclatura</b>	<b>Descripción</b>
1	<i>aluvion</i>	Flujo desbordado de agua generado por condiciones medioambientales críticas.
2	<i>arbol</i>	Árbol vivo ( <i>Nothofagus spp.</i> ), especie arbórea dominante en el sistema.
3	<i>arbolm</i>	Árbol muerto ( <i>Nothofagus spp.</i> ), soporte de biodiversidad para insectos y aves.
4	<i>aveac</i>	Ave acuática, especie representativa del sistema.
5	<i>avep</i>	Ave pequeña, incluyendo Passeriformes nativas y exóticas.
6	<i>castor</i>	Castor alimentado ( <i>Castor canadensis</i> ), estado bien nutrido.
7	<i>castorh</i>	Castor hambriento ( <i>Castor canadensis</i> ), en búsqueda de alimento.
8	<i>cauce</i>	Cauce de agua natural, flujo de agua que mantiene el sistema.
9	<i>conmac</i>	Condiciones medioambientales críticas, como eventos de tormenta o deshielo.
10	<i>espriver</i>	Espacio ribereño formado tras eventos de aluvión.

<b>Id</b>	<b>Nomenclatura</b>	<b>Descripción</b>
11	<i>insecto</i>	Insectos que colonizan árboles muertos y otras áreas.
12	<i>laguna</i>	Cuerpo de agua formado por acumulación detrás de una represa.
13	<i>luz</i>	Luz solar, fuente de energía para la fotosíntesis.
14	<i>madext</i>	Madera externa de un árbol vivo (Albura de <i>Nothofagus spp.</i> ).
15	<i>madint</i>	Madera interna de un árbol vivo (Duramen de <i>Nothofagus spp.</i> ).
16	<i>nido</i>	Estructura de reproducción para aves pequeñas y pájaros carpinteros.
17	<i>orilla</i>	Zona ribereña entre el cauce y el bosque.
18	<i>pajcar</i>	Pájaro carpintero ( <i>Campephilus magellanicus</i> ), ave nativa.
19	<i>pastoexo</i>	Pasto exótico, vegetación introducida que compite con especies nativas.
20	<i>puye</i>	Puye ( <i>Galaxias maculatus</i> ), pez nativo del sistema.
21	<i>ratal</i>	Rata almizclera ( <i>Ondatra zibethicus</i> ), roedor invasor asociado a ambientes húmedos.
22	<i>ratalh</i>	Rata almizclera hambrienta, en búsqueda de alimento.
23	<i>refugior</i>	Refugio construido por la rata almizclera a orillas del cauce.
24	<i>represa</i>	Estructura de modificación del sistema ecológico creada por castores.
25	<i>roedorp</i>	Roedor pequeño, representando especies nativas.
26	<i>trucha</i>	Trucha ( <i>Oncorhynchus spp.</i> ), pez introducido y depredador del puye.
27	<i>vison</i>	Visón ( <i>Neovison vison</i> ), depredador invasor en el sistema.
28	<i>refugioc</i>	Refugio de castores, utilizado para cría y protección.

Cuadro 3.2: Interacciones definidas para el modelo.

<b>Id</b>	<b>Reacción</b>	<b>Interacción</b>	<b>Referencia</b>
$r_0$	$\emptyset \rightarrow cauce$	Entrada de flujo de agua al sistema.	Hipótesis 0
$r_1$	$\emptyset \rightarrow luz$	Entrada de luz solar, fuente de energía para fotosíntesis.	Hipótesis 0

Id	Reacción	Interacción	Referencia
$r_2$	$\emptyset \rightarrow conmac$	Condiciones medioambientales críticas, como clima extremo.	Hipótesis 24
$r_3$	$arbol + cauce + luz \rightarrow 2arbol$	Reproducción de árboles por fotosíntesis.	Hipótesis 6, 23
$r_4$	$arbol + castor \rightarrow castorh + madext + madint$	Consumo de árboles por castores, obteniendo madera externa e interna.	Hipótesis 19
$r_5$	$castorh + madext \rightarrow castor$	Alimentación del castor con madera externa.	Hipótesis 1
$r_6$	$castor + madint \rightarrow castorh + represa$	Construcción de represas por castores con madera interna.	Hipótesis 1, 3, 32
$r_7$	$castor + represa \rightarrow castorh + represa + refugioc$	Creación de refugio para castores en la represa.	Hipótesis 1, 3
$r_8$	$2castor + refugioc \rightarrow 2castorh + 3castor + refugioc$	Reproducción de castores en refugios.	Hipótesis 3, 32
$r_9$	$castor \rightarrow castorh$	Agotamiento de castores por falta de alimento.	Hipótesis 1
$r_{10}$	$arbolm + insecto \rightarrow arbolm + 3insecto$	Reproducción de insectos en árboles muertos.	Hipótesis 26
$r_{11}$	$arbolm + pajcar \rightarrow arbolm + nido + pajcar$	Creación de nidos por pájaro carpintero.	Hipótesis 20
$r_{12}$	$nido + 2pajcar \rightarrow nido + 4pajcar$	Reproducción del pájaro carpintero en nidos.	Hipótesis 20
$r_{13}$	$nido + 2avep \rightarrow nido + 3avep$	Reproducción de aves pequeñas en nidos.	Hipótesis 20
$r_{14}$	$cauce + represa \rightarrow cauce + laguna + represa$	Formación de lagunas por acumulación de agua.	Hipótesis 1, 4, 25
$r_{15}$	$cauce + conmac \rightarrow aluvion + cauce$	Generación de aluvión por condiciones extremas.	Hipótesis 24

Id	Reacción	Interacción	Referencia
<i>r</i> <sub>16</sub>	<i>aluvion + cauce</i> → <i>cauce + espriver</i>	Restauración del cauce después del aluvión.	Hipótesis 1, 4, 24, 25
<i>r</i> <sub>17</sub>	<i>cauce + espriver + luz</i> → <i>cauce+espriver+pastoexo</i>	Colonización de pasto exótico en áreas alteradas.	Hipótesis 5, 19, 25, 27
<i>r</i> <sub>18</sub>	<i>ratalh + pastoexo</i> → <i>ratal</i>	Alimentación de la rata almizclera con pasto exótico.	Hipótesis 8, 10
<i>r</i> <sub>19</sub>	<i>ratalh + orilla</i> → <i>ratalh + orilla + refugior</i>	Construcción de refugio por rata almizclera.	Hipótesis 9, 34
<i>r</i> <sub>20</sub>	<i>refugior + 2ratal</i> → <i>refugior + 3ratal</i>	Reproducción de rata almizclera.	Hipótesis 7, 9, 10, 25, 34
<i>r</i> <sub>21</sub>	<i>2roedorp</i> → <i>6roedorp</i>	Reproducción de roedores pequeños.	Hipótesis 7, 22
<i>r</i> <sub>22</sub>	<i>2aveac + orilla</i> → <i>10aveac + orilla</i>	Reproducción de aves acuáticas.	Hipótesis 21
<i>r</i> <sub>23</sub>	<i>2avep + nido</i> → <i>8avep + nido</i>	Reproducción de aves pequeñas en nidos.	Hipótesis 21
<i>r</i> <sub>24</sub>	<i>2puye</i> → <i>50puye</i>	Reproducción explosiva de puye.	Hipótesis 2, 28
<i>r</i> <sub>25</sub>	<i>2trucha</i> → <i>35trucha</i>	Reproducción de trucha.	Hipótesis 2, 28
<i>r</i> <sub>26</sub>	<i>20puye + trucha</i> → <i>trucha</i>	Alimentación de trucha con puyes.	Hipótesis 29
<i>r</i> <sub>27</sub>	<i>2vison</i> → <i>6vison</i>	Reproducción de visón.	Hipótesis 11, 12, 15, 18, 25, 33
<i>r</i> <sub>28</sub>	<i>roedorp + vison</i> → <i>vison</i>	Alimentación del visón con roedores pequeños.	Hipótesis 11, 13, 14, 17, 22, 33
<i>r</i> <sub>29</sub>	<i>avep + vison</i> → <i>vison</i>	Alimentación del visón con aves pequeñas.	Hipótesis 13, 14, 18, 21, 33
<i>r</i> <sub>30</sub>	<i>aveac + vison</i> → <i>vison</i>	Alimentación del visón con aves acuáticas.	Hipótesis 14, 15, 18, 21
<i>r</i> <sub>31</sub>	<i>puye + vison</i> → <i>vison</i>	Alimentación del visón con puye.	Hipótesis 15, 30
<i>r</i> <sub>32</sub>	<i>trucha + vison</i> → <i>vison</i>	Alimentación del visón con trucha.	Hipótesis 15, 16, 17, 30
<i>r</i> <sub>33</sub>	<i>2arbol</i> → <i>arbol</i>	Muerte natural de árboles por competencia.	Hipótesis 6, 16, 23

<b>Id</b>	<b>Reacción</b>	<b>Interacción</b>	<b>Referencia</b>
<i>r<sub>34</sub></i>	$2aveac \rightarrow aveac$	Muerte natural de aves acuáticas.	Hipótesis 21
<i>r<sub>35</sub></i>	$2avep \rightarrow avep$	Muerte natural de aves pequeñas.	Hipótesis 21
<i>r<sub>36</sub></i>	$2castor \rightarrow castor$	Muerte natural de castores.	Hipótesis 20
<i>r<sub>37</sub></i>	$2castorh \rightarrow castorh$	Muerte de castores hambrientos.	Hipótesis 20
<i>r<sub>38</sub></i>	$2insecto \rightarrow insecto$	Muerte natural de insectos.	Hipótesis 22
<i>r<sub>39</sub></i>	$2pajcar \rightarrow pajcar$	Muerte natural de pájaro carpintero.	Hipótesis 20
<i>r<sub>40</sub></i>	$2pastoexo \rightarrow pastoexo$	Muerte natural de pasto exótico.	Hipótesis 22
<i>r<sub>41</sub></i>	$2puye \rightarrow puye$	Muerte natural de puye.	Hipótesis 22
<i>r<sub>42</sub></i>	$2ratal \rightarrow ratal$	Muerte natural de rata almizclera.	Hipótesis 22
<i>r<sub>43</sub></i>	$2roedorp \rightarrow roedorp$	Muerte natural de roedores pequeños.	Hipótesis 22
<i>r<sub>44</sub></i>	$2trucha \rightarrow trucha$	Muerte natural de trucha.	Hipótesis 22
<i>r<sub>45</sub></i>	$2vison \rightarrow vison$	Muerte natural de visón.	Hipótesis 22
<i>r<sub>46</sub></i>	$arbol+laguna \rightarrow arbolm+laguna$	Muerte de árboles por inundación.	Hipótesis 6, 23
<i>r<sub>47</sub></i>	$arbol \rightarrow arbolm$	Muerte natural de árboles.	Hipótesis 23
<i>r<sub>48</sub></i>	$2arbolm \rightarrow arbolm$	Descomposición de árboles muertos.	Hipótesis 26
<i>r<sub>49</sub></i>	$2conmac \rightarrow conmac$	Restablecimiento de condiciones ambientales promedio.	Hipótesis 31
<i>r<sub>50</sub></i>	$2represa + 2laguna \rightarrow represa + laguna$	Reducción de cuerpos de agua por competencia.	Hipótesis 31
<i>r<sub>51</sub></i>	$insecto+pajcar \rightarrow pajcar$	Consumo de insectos por pájaro carpintero.	Hipótesis 20
<i>r<sub>52</sub></i>	$insecto+avep \rightarrow avep$	Consumo de insectos por aves pequeñas.	Hipótesis 21

## Capítulo 4

# Sostenibilidad estructural y dinámica

La sostenibilidad de comunidades ecológicas complejas es un aspecto fundamental para comprender su capacidad de persistencia y resiliencia ante perturbaciones internas y externas. En este capítulo, se aborda el análisis de la sostenibilidad desde dos perspectivas complementarias, por un lado, la exploración estructural y, por otro lado, la exploración dinámica. La exploración estructural permite identificar y caracterizar las abstracciones más frecuentes del sistema, basándose en la generación y evaluación de subconjuntos funcionales representativos. Por su parte, la exploración dinámica profundiza en la estabilidad y la evolución temporal de estos estados. Ambas exploraciones, se desarrollan mediante la construcción y análisis de matrices de transición de Markov que capturan las probabilidades de permanencia y transición entre dichas abstracciones bajo diferentes condiciones, incluyendo escenarios con y sin perturbaciones. Este enfoque integrado posibilita un entendimiento más exhaustivo de los mecanismos que subyacen a la sostenibilidad de la comunidad ecológica modelada, facilitando la identificación de patrones emergentes y la evaluación del impacto de factores bióticos y abióticos en la dinámica ecosistémica.

### 4.1. Potenciales perturbaciones de la *RN\_IN*

La identificación de potenciales perturbaciones en las comunidades ecológicas es esencial para comprender las interacciones y los posibles impactos de diversos factores sobre el equilibrio en una comunidad ecológica. En este contexto, la suite de especies, reacciones y procesos que pueden ser considerados como perturbaciones del sistema son aquellos que, al introducirse o modificarse, alteran significativamente las interacciones ecológicas y la dinámica de las poblaciones dentro de una comunidad ecológica. Un ejemplo claro son las especies invasoras, las cuales, mediante mecanismos de competencia, depredación o mutualismo, pueden desencadenar transformaciones drásticas en las estructuras de las comunidades ecológicas. Particularmente, en el contexto de las comunidades ecológicas del extremo sur de América,

como en la Isla Navarino, las especies como el castor (*Castor canadensis*), la rata almizclera (*Ondatra zibethicus*) y el visón americano (*Neovison vison*), junto con sus interacciones, representan un modelo de perturbación ecológica. Estas especies, al actuar de manera conjunta y modificar sus hábitats, pueden generar un proceso de “colapso invasional” que multiplica los efectos negativos de cada especie, afectando tanto a la biodiversidad nativa como a los procesos ecosistémicos. Así, en esta sección se desarrollarán los aspectos clave para la identificación y análisis de estos factores perturbadores dentro de la red de reacciones ecológicas, con el fin de entender su potencial impacto sobre la sostenibilidad de la comunidad ecológica.

## 4.2. Cuantificación de la sostenibilidad de comunidades ecológicas

La cuantificación de la sostenibilidad en comunidades ecológicas constituye un paso crítico para evaluar la capacidad del sistema para mantener su estructura y funcionalidad frente a perturbaciones internas y externas. Tras la identificación y caracterización de las potenciales perturbaciones en la red ecológica *RN\_IN*, resulta fundamental desarrollar métodos que permitan medir de forma cuantitativa el grado de persistencia y estabilidad de las abstracciones funcionales emergentes del sistema. En esta sección, se implementa un enfoque basado en la construcción y análisis de matrices de transición de Markov, que reflejan las probabilidades de permanencia y transición entre estados funcionales representativos bajo distintos escenarios, incluyendo la presencia o ausencia de perturbaciones. Esta cuantificación no solo facilita la evaluación dinámica de la resiliencia de la comunidad, sino que también aporta información clave para la interpretación de los mecanismos que favorecen o limitan la sostenibilidad estructural y funcional de la comunidad ecológica modelada.

### 4.2.1. Algoritmo de cálculo de la sostenibilidad en comunidades ecológicas

A continuación, describimos detalladamente el funcionamiento del algoritmo desarrollado para estudiar la evolución dinámica de una red de reacciones modelada mediante ecuaciones diferenciales ordinarias, incluyendo simulaciones bajo condiciones normales y perturbadas, así como el análisis de abstracciones y la construcción de una matriz de transición de Markov.

### 4.2.2. Descripción general metodológica del análisis computacional

El código desarrollado (ver Apéndice A.2) implementa un análisis integral para caracterizar la sostenibilidad estructural y dinámica de comunidades ecológicas modeladas como redes de reacciones. La implementación, realizada en *Python™*, integra principios de teoría de conjuntos y cadenas de Markov para estudiar la dinámica de sistemas biológicos complejos a partir de la generación y análisis de subconjuntos aleatorios de especies, facilitando la identificación de patrones emergentes y comportamientos colectivos en redes metabólicas.

El procedimiento inicia con la carga y procesamiento de la red de reacciones desde un archivo de texto, extrayendo las especies y las interacciones definidas a través de transformaciones estequiométricas. Se establece un vector de condiciones iniciales uniformes y se define la cinética de reacción mediante la ley de acción de masas para todas las reacciones. Posteriormente, se implementa una interfaz interactiva que permite la selección manual de especies relevantes, basada en conocimiento experto, para delimitar el espacio de análisis funcional dentro de la comunidad ecológica modelada.

A continuación, el algoritmo genera aleatoriamente un conjunto de subconjuntos de especies activas mediante un modelo probabilístico binomial, garantizando que ningún subconjunto sea vacío para mantener la validez biológica de las simulaciones. Cada subconjunto se codifica en un vector binario que representa la presencia o ausencia de cada especie, constituyendo las condiciones iniciales para la simulación dinámica.

La simulación numérica de la dinámica del sistema se realiza ejecutando múltiples corridas independientes, en cada una de las cuales se asignan concentraciones aleatorias a las especies activas (con distribución de probabilidad uniforme entre 1 y 10), con posibilidad de reducción controlada en algunas especies para simular escenarios de invasión o variabilidad ambiental. La integración temporal del sistema se efectúa con un módulo especializado que implementa métodos numéricos adecuados para redes de reacciones.

Se almacenan los últimos pasos de cada simulación, que representan el comportamiento asintótico del sistema, y se convierten en representaciones binarias para facilitar el análisis cualitativo. Estos datos se consolidan en una lista global de estados que se utiliza para calcular las frecuencias de aparición de cada estado único y para generar una clasificación ordenada de los estados más frecuentes (denominados  $Lf$ ).

Se aplica un criterio heurístico para determinar un número óptimo de estados predominantes  $n$ , basado en la probabilidad de transiciones entre estados categorizados como “otros”, garantizando que las transiciones entre estados menos frecuentes sean marginales. Con este conjunto de estados predominantes se construye una matriz de transición que contabiliza las transiciones observadas entre categorías a lo largo de las simulaciones.

La matriz de transición se normaliza por filas para obtener probabilidades de transición estocástica entre los estados  $Lf$ , construyendo así una matriz de transición de Markov. Esta matriz es visualizada mediante mapas de calor con etiquetado, permitiendo identificar estados altamente estables y patrones dominantes de transición, que representan atractores estructurales del sistema.

Finalmente, se realiza un análisis de frecuencia de aparición de cada especie en los estados  $Lf$ , comparando esta distribución con la frecuencia de presencia en las condiciones iniciales,

lo que aporta información sobre la relevancia funcional y la estabilidad relativa de especies en configuraciones dominantes del sistema.

Esta arquitectura computacional provee una herramienta robusta y flexible para explorar la dinámica y la sostenibilidad estructural de comunidades ecológicas modeladas como redes de reacciones, facilitando la cuantificación probabilística de su estabilidad interna y permitiendo detectar configuraciones críticas para la resiliencia del ecosistema simulado.

#### 4.2.3. La sostenibilidad de la comunidad ecológica *RN\_IN*.

A continuación, se presentan los resultados del cálculo de la sostenibilidad para la comunidad ecológica modelada por la red de reacciones *RN\_IN*, considerando dos enfoques complementarios, por un lado, una exploración estructural y, por otro lado, una exploración dinámica.

##### **Exploración estructural:**

El objetivo de esta etapa del análisis fue identificar patrones de sostenibilidad estructural mediante la generación y evaluación de subconjuntos funcionales (abstracciones finales) bajo distintas condiciones iniciales.

Aplicamos el algoritmo descrito en la Sección 4.2.1 para tres cantidades de subconjuntos generados:  $N = 25, 50$  y  $75$ , mantuvimos constante la cantidad de simulaciones por subconjunto en  $M = 1000$ . Este procedimiento permitió comparar la composición estructural de los subconjuntos más recurrentes en escenarios sin perturbación y con perturbación.

Ordenamos las abstracciones finales (denotadas como  $L_f$ ) según su frecuencia de aparición, desde la más recurrente ( $L_f1$ ) y consideramos las dos siguientes con mayor frecuencia ( $L_f2$ ,  $L_f3$ ), lo que permite evaluar la estabilidad estructural del sistema ecológico frente a diferentes condiciones.

Presentamos los resultados en los Cuadros 4.1 y 4.2. El primer cuadro resume los conjuntos de especies que conforman las abstracciones finales más frecuentes ( $L_f1$ ,  $L_f2$  y  $L_f3$ ), mientras que el segundo cuadro muestra su frecuencia relativa de ocurrencia en cada escenario, permitiendo inferir tendencias de organización estructural resiliente frente a alteraciones.

Cuadro 4.1: Comparativa de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>N = 25</b>	<b>N = 50</b>	<b>N = 75</b>
Lf1	No		(cauce, luz, conmac, arbol, arbolm, insecto, pajcar, nido, avep, aluvion, espriver, roedorp, aveac, orilla, puye)	
	Sí		(cauce, conmac, arbol, castor, castorh, madext, madint, represa, refugioc, arbolm, insecto, pajcar, nido, avep, laguna, aluvion, espriver, pastoexo, ratalh, ratal, refugior, roedorp, aveac, puye, trucha, vison)	
Lf2	No		(cauce)	
	Sí		(cauce)	
Lf3	No		(cauce, luz, conmac, arbol, arbolm, insecto, pajcar, nido, avep, aluvion, espriver, roedorp, aveac, orilla, puye)	
	Sí	(cauce, luz, arbol, pajcar)	(cauce, arbol, arbolm, nido, avep, espriver, roedorp, aveac, orilla, puye)	

El Cuadro 4.1 evidencia que, en ausencia de perturbaciones, los subconjuntos funcionales recurrentes (Lf1 y Lf3) presentan una composición dominada por especies nativas con una alta interconectividad ecológica. Frente a perturbaciones, la estructura de los subconjuntos cambia significativamente, destacando la inclusión de especies no nativas como *castor*, *trucha* y *vison*. Este fenómeno indica una reorganización de la comunidad ecológica hacia configuraciones alternativas, potencialmente impulsadas por el establecimiento de especies exóticas y el desplazamiento de relaciones ecológicas previas. La presencia consistente de especies clave bajo ambas condiciones sugiere abstracciones persistentes, mientras que los cambios reflejan adaptaciones estructurales del sistema ante escenarios de estrés ecológico.

Cuadro 4.2: Comparativa de Distribución porcentual de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>N = 25</b>	<b>N = 50</b>	<b>N = 75</b>
Lf1	No	86,70 %	87,44 %	79,15 %
	Sí	93,60 %	98,60 %	86,36 %
Lf2	No	8,56 %	12,37 %	18,42 %
	Sí	4,56 %	0,89 %	7,45 %
Lf3	No	0,64 %	0,12 %	0,17 %
	Sí	1,26 %	0,02 %	4,90 %

El Cuadro 4.2 muestra que la abstracción Lf1 incrementa su frecuencia bajo perturbación, alcanzando valores superiores al 93 %. Esto sugiere que Lf1 actúa como un estado estructural altamente estable o atractor en el espacio de estados. Las abstracciones Lf2 y Lf3, por el contrario, presentan una menor frecuencia y mayor sensibilidad ante la perturbación, lo que podría indicar una menor capacidad de sostenibilidad o una dependencia más fuerte de condiciones específicas. Estos resultados evidencian que la comunidad ecológica posee configuraciones estructurales robustas frente a perturbaciones, cuyo análisis dinámico será profundizado en la sección siguiente.

Los resultados de esta etapa estructural permiten identificar configuraciones recurrentes que representan posibles estados funcionales del sistema a partir de distintas cantidades de subconjuntos. Sin embargo, para evaluar la robustez de dichas configuraciones y su comportamiento frente a múltiples trayectorias de simulación, es necesario complementar este análisis con una exploración dinámica.

### **Exploración dinámica:**

En esta sección, el objetivo es identificar patrones de sostenibilidad dinámica mediante la generación y evaluación de subconjuntos funcionales (abstracciones finales) bajo distintas condiciones iniciales.

Presentamos los resultados de la exploración dinámica para la comunidad ecológica modelada *RN\_IN*, con la cantidad de subconjuntos fija en  $N = 75$  y variación de la cantidad de simulaciones  $M = 1000, 2000, 3000, 4000, 5000$ . El Cuadro 4.3 muestra las abstracciones finales más frecuentes bajo condiciones sin perturbación (No) y con perturbación (Sí), mientras

que en el Cuadro 4.4 presentamos la distribución porcentual correspondiente para cada caso. Estos datos permiten analizar la estabilidad y recurrencia de distintos estados estructurales en función de la intensidad y número de simulaciones realizadas.

Cuadro 4.3: Comparativa de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>M = 1.000</b>	<b>M = 2.000</b>	<b>M = 3.000</b>	<b>M = 4.000</b>	<b>M = 5.000</b>
Lf1	No	<i>Abs<sub>1</sub></i>	(cauce)	<i>Abs<sub>1</sub></i>	(cauce)	<i>Abs<sub>1</sub></i>
	Sí	(cauce)	<i>Abs<sub>1</sub></i>	(cauce)	<i>Abs<sub>1</sub></i>	(cauce)
Lf2	No			(cauce)		
	Sí			(cauce)		
Lf3	No		(cauce, arbol, arbolm, nido, avep, espriver, roedorp, aveac, orilla, puye)			
	Sí			<i>Abs<sub>2</sub></i>		

Donde:

$$Abs_1 = (cauce, luz, conmac, arbol, arbolm, insecto, pajcar, nido, avep, aluvion, espriver, roedorp, aveac, orilla, puye)$$

$$\mathcal{M}_{RN\_IN} = Abs_2 = (cauce, luz, conmac, arbol, castor, castorh, madext, madint, represa, refugioc, arbolm, insecto, pajcar, nido, avep, laguna, aluvion, espriver, pastoexo, ratalh, ratal, orilla, refugior, roedorp, aveac, puye, trucha, vison)$$

Los resultados muestran que, tanto en el sistema sin perturbación como en el perturbado, las abstracciones más frecuentes (Lf1) corresponden a estados estructuralmente distintos: la abstracción con una sola especie activa (*cauce*) predomina en ciertos valores de M, mientras que en otros predomina un conjunto amplio de especies activas (*Abs<sub>1</sub>*). Esta alternancia refleja cómo la dinámica estructural del sistema es sensible a la intensidad y escala del muestreo estadístico, y sugiere la presencia de múltiples atractores en el espacio de fases que el sistema

puede alcanzar bajo diferentes condiciones.

Desde una perspectiva dinámica, la aparición de estos atractores múltiples y la alternancia en predominancia pueden interpretarse como manifestaciones de la complejidad intrínseca de la comunidad ecológica modelada, en donde la exploración exhaustiva mediante simulaciones permite descubrir estados estables y recurrentes que no son evidentes en análisis menos profundos.

En consecuencia, el cuadro 4.3 constituye una evidencia cuantitativa robusta que apoya esta interpretación, evidenciando que la inclusión de perturbaciones y el aumento del número de simulaciones por subconjunto amplían la diversidad de estados estructurales observados y afectan la estabilidad relativa de las configuraciones persistentes de la comunidad ecológica en estudio.

Además, por un lado, se observa que la introducción de perturbaciones promueve la consolidación de estados más complejos y completos, reflejando un efecto estabilizador en la estructura ecosistémica. Por otro lado, abstracciones secundarias (Lf2 y Lf3) muestran menor frecuencia, especialmente bajo perturbación, lo que sugiere una menor resiliencia de estos estados frente a fluctuaciones externas.

En conjunto, esta distribución de abstracciones muestra la capacidad del sistema para mantener configuraciones estables y complejas a pesar de variaciones y perturbaciones. Así como de colapsar a solo una especie, situación que no evidenciamos en la exploración estructural, enfatizando la importancia del muestreo estadístico amplio (mayor  $M$ ) para caracterizar adecuadamente la dinámica estructural de la comunidad ecológica.

Cuadro 4.4: Comparativa de Distribución porcentual de abstracciones finales más frecuentes por cantidad de subconjuntos generados para simulaciones entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>M = 1.000</b>	<b>M = 2.000</b>	<b>M = 3.000</b>	<b>M = 4.000</b>	<b>M = 5.000</b>
Lf1	No	79, 15 %	56, 50 %	68, 26 %	55, 81 %	91, 57 %
	Sí	86, 36 %	97, 98 %	95, 46 %	98, 15 %	99, 53 %
Lf2	No	18, 42 %	42, 28 %	31, 60 %	43, 08 %	8, 36 %
	Sí	7, 45 %	1, 26 %	3, 94 %	1, 76 %	0, 26 %
Lf3	No	0, 17 %	0, 59 %	0, 14 %	0, 55 %	0, 05 %

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>M = 1.000</b>	<b>M = 2.000</b>	<b>M = 3.000</b>	<b>M = 4.000</b>	<b>M = 5.000</b>
	Sí	4,90 %	0,61 %	0,40 %	0,02 %	0,03 %

La distribución porcentual presentada en esta tabla verifica la tendencia observada en las frecuencias absolutas. La alta participación relativa de las abstracciones Lf1 reafirma su papel como configuraciones dominantes y resilientes, con una clara intensificación de su prevalencia en el sistema perturbado.

Por el contrario, las abstracciones Lf2 y Lf3 mantienen una proporción mucho menor y fluctuante, lo cual es consistente con su menor estabilidad observada, particularmente cuando el sistema se encuentra sujeto a perturbaciones. Este comportamiento enfatiza la sensibilidad diferencial de las configuraciones menos complejas a cambios estructurales y ambientales.

En consecuencia, la convergencia progresiva de las distribuciones porcentuales al aumentar  $M$  indica la estabilidad estadística de los resultados y la validez de las inferencias obtenidas sobre la dinámica de la comunidad ecológica.

Finalmente, como se anticipó en la sección ??, en la siguiente sección se procederá a cuantificar la sostenibilidad de la comunidad ecológica *RN\_IN*. Para ello, se emplea la matriz de transición de Markov construida mediante simulaciones implementadas en *Python*<sup>TM</sup> (ver Apéndice A.2). Esta matriz captura las probabilidades de persistencia y transición entre las abstracciones finales más frecuentes, evaluadas tanto en escenarios sin perturbación como bajo la influencia de perturbaciones estructurales. De manera complementaria, realizamos las exploraciones estructurales y dinámicas de la misma manera que en este apartado.

### 4.3. La sostenibilidad de la comunidad ecológica *RN\_IN*

En esta sección se presenta el análisis detallado de la cuantificación de la sostenibilidad de la comunidad ecológica modelada mediante *RN\_IN*. La sostenibilidad se entiende como la capacidad del sistema para mantener sus configuraciones estructurales predominantes frente a perturbaciones internas y externas. Utilizando la matriz de transición de Markov derivada de las simulaciones numéricas, se evalúan las probabilidades de permanencia de las abstracciones más significativas, proporcionando una métrica cuantitativa que refleja la resiliencia y estabilidad dinámica de la comunidad ecológica. Este enfoque permite identificar qué estados estructurales presentan mayor robustez y cuáles son más susceptibles a cambios, aportando una visión profunda sobre la dinámica de persistencia en comunidades ecológicas complejas.

Para profundizar en la caracterización de la sostenibilidad del sistema, se analizan a continuación las probabilidades de permanencia y transición entre las abstracciones estructurales

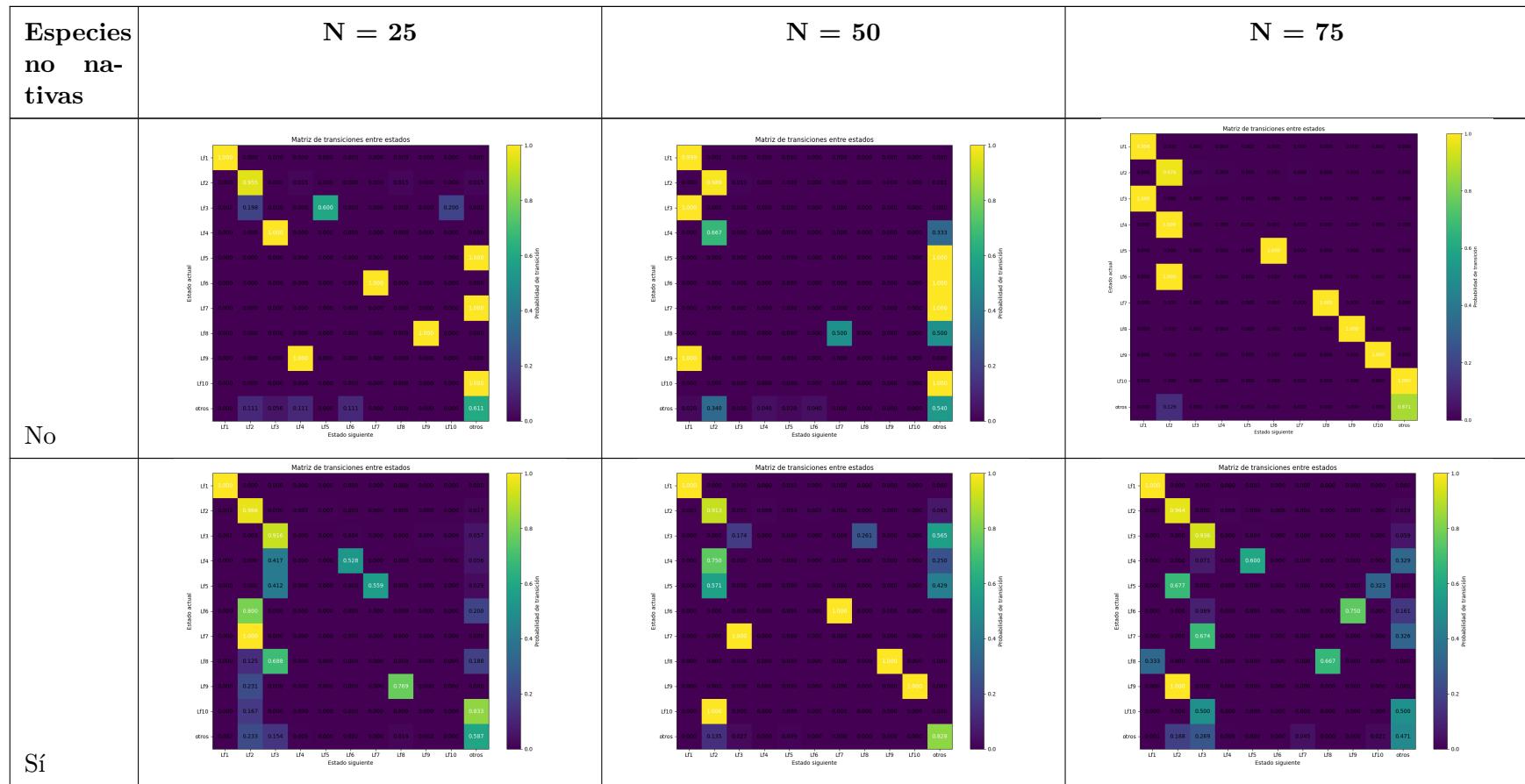
obtenidas en las simulaciones. Este análisis se basa en la matriz de transición de Markov, que sintetiza la dinámica estocástica del sistema al considerar tanto la variabilidad interna como la influencia de perturbaciones externas.

Mediante esta matriz, se pueden identificar los estados estructurales que actúan como atractores estables, es decir, aquellos con alta probabilidad de auto-permanencia, así como los patrones de transición hacia otros estados, lo cual aporta información clave sobre la resiliencia del ecosistema y su capacidad de recuperación ante alteraciones.

A continuación, se presentan los resultados cuantitativos y gráficos derivados de este análisis, seguidos de una interpretación detallada que vincula la estabilidad estructural con las condiciones ecológicas modeladas por la red *RN\_IN*.

## Exploración estructural

Cuadro 4.5: Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).



En el cuadro 4.5 se incluyen las gráficas correspondientes a las matrices de transición de Markov para las abstracciones finales más frecuentes. Este análisis permite visualizar las frecuencias relativas de las especies en los subconjuntos considerados para evaluar la sostenibilidad dentro del modelo de comunidad ecológica.

Además, el Cuadro 4.6 sintetiza la estabilidad relativa de los estados estructurales representados por las abstracciones finales más frecuentes (Lf) a través de la probabilidad de permanencia en cada estado. Los resultados evidencian que, para la abstracción más frecuente (Lf1), la probabilidad de mantenerse estable es prácticamente uno en todos los casos, tanto sin perturbación como bajo perturbación, lo que indica un alto nivel de resiliencia estructural. En contraste, las abstracciones Lf2 y Lf3 muestran probabilidades de permanencia menores y mayor variabilidad, especialmente bajo perturbaciones, sugiriendo una menor estabilidad y mayor susceptibilidad a la transición hacia otros estados. Se destaca que, la abstracción Lf3 presenta una probabilidad de permanencia nula en sistemas sin perturbación, pero significativa bajo perturbación, lo que sugiere que la dinámica inducida por perturbaciones puede activar estados estructurales que no se manifiestan en condiciones normales.

Cuadro 4.6: Comparativa de estabilidad de estados por probabilidad de permanencia en Lf entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>N = 25</b>	<b>N = 50</b>	<b>N = 75</b>
Lf1	No	0,996	0,999	0,998
	Sí	1,000	1,000	1,000
Lf2	No	0,993	0,989	0,976
	Sí	0,966	0,913	0,964
Lf3	No	0,00	0,00	0,00
	Sí	0,916	0,174	0,936

Este conjunto de resultados aporta evidencia cuantitativa sobre la dinámica de persistencia y transición de configuraciones estructurales en la comunidad ecológica modelada, remarcando la importancia de incorporar perturbaciones para comprender la diversidad y estabilidad de los estados ecosistémicos.

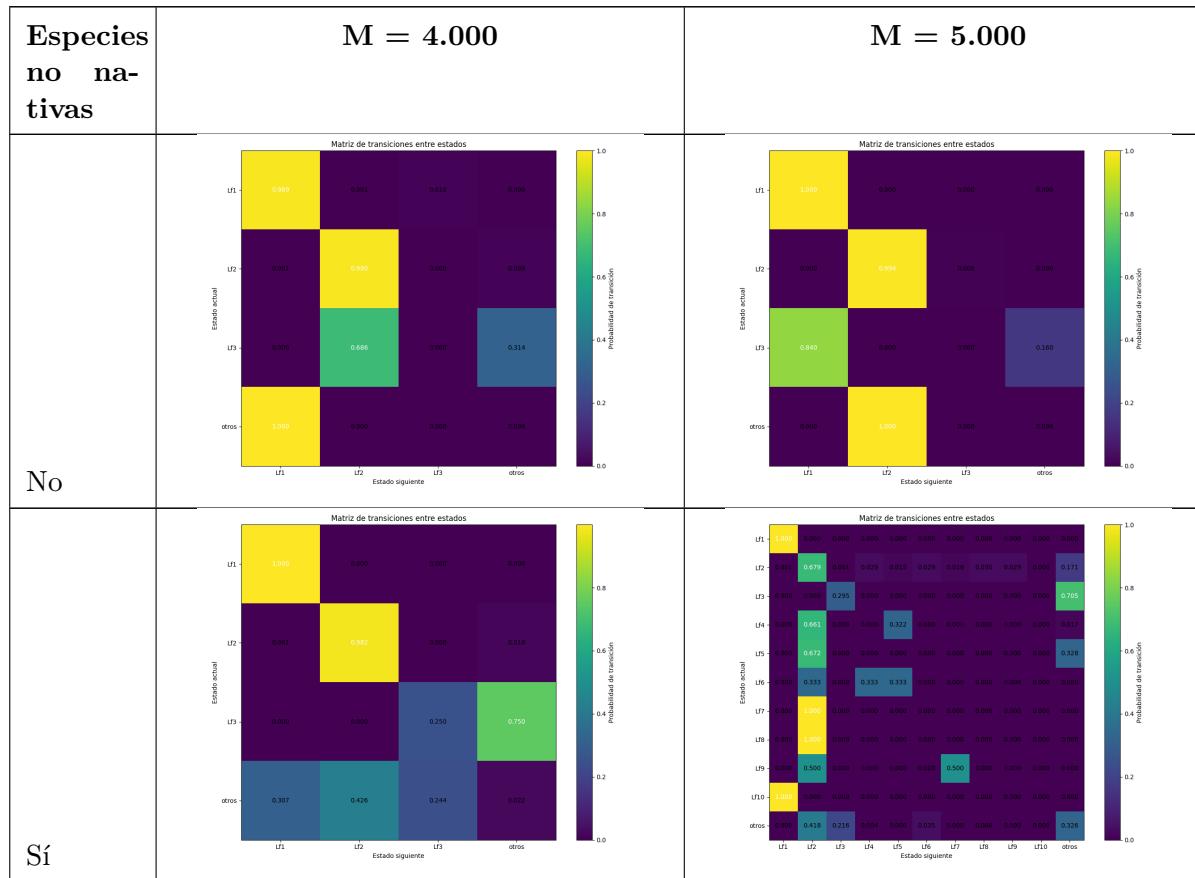
En relación con las matrices de transición de Markov, estas visualizaciones permiten identificar con claridad los estados estructurales que actúan como atractores estables -representados por altos valores en la diagonal principal- y los patrones de transición más probables entre diferentes estados del sistema. La comparación visual entre los escenarios sin y con perturbación destaca cómo las perturbaciones pueden modificar significativamente la dinámica de transición, promoviendo la exploración de nuevos estados y aumentando la diversidad estructural. Así, las matrices de transición constituyen una herramienta visual y analítica fundamental para interpretar la resiliencia y adaptabilidad de la comunidad ecológica bajo estudio.

## Exploración Dinámica

Cuadro 4.7: Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en *Python*™ (ver Apéndice A.2).

Cuadro 4.8: Continuación de Comparativa de matrices de transición de Markov. Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).

114



En los Cuadros 4.7 y 4.8 se incluyen las gráficas correspondientes a las matrices de transición de Markov para las abstracciones finales más frecuentes. Este análisis permite visualizar las frecuencias relativas de las especies en los subconjuntos considerados para evaluar la sostenibilidad dentro del modelo de comunidad ecológica.

El Cuadro 4.9 sintetiza la estabilidad de las abstracciones estructurales más frecuentes en términos de la probabilidad de permanencia para escenarios sin perturbación y con perturbación. Los resultados muestran que la abstracción predominante Lf1 mantiene una probabilidad de permanencia cercana a uno en todos los casos analizados, tanto en ausencia como en presencia de perturbaciones, evidenciando su carácter como un estado altamente estable y resiliente.

La abstracciones secundarias (Lf2) presentan también elevadas probabilidades de permanencia en ambos escenarios, con una ligera reducción bajo perturbación, especialmente al aumentar  $M$ , lo que indica una sensibilidad moderada a las perturbaciones estructurales. Por su parte, la abstracción Lf3 exhibe una probabilidad nula de permanencia en sistemas sin perturbación, mientras que bajo perturbación adquiere valores altos para valores pequeños y medianos de  $M$ , aunque con una caída notable para  $M = 4\,000$  y  $5\,000$ . Esto sugiere que la dinámica inducida por perturbaciones favorece la activación y estabilidad de configuraciones que no emergen en condiciones normales, pero que su permanencia puede verse afectada por la intensidad y número de simulaciones.

Cuadro 4.9: Comparativa de estabilidad de estados por probabilidad de permanencia en Lf entre sistema sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python*<sup>TM</sup> (ver Apéndice A.2).

<b>Lf</b>	<b>Especies no nativas</b>	<b>M = 1.000</b>	<b>M = 2.000</b>	<b>M = 3.000</b>	<b>M = 4.000</b>	<b>M = 5.000</b>
Lf1	No	0,998	0,988	0,989	0,989	1,000
	Sí	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Lf2	No	0,976	0,989	0,985	0,990	0,994
	Sí	0,964	0,966	0,975	0,982	0,679
Lf3	No	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	Sí	0,936	0,943	0,908	0,250	0,295

Las matrices de transición visualizadas en los Cuadros 4.7 y 4.8 complementan esta interpretación, permitiendo observar claramente los atractores estables (valores elevados en diagonal) y las transiciones más probables entre estados. La comparación entre escenarios sin y con perturbación explica cómo las perturbaciones modifican la dinámica del sistema, promoviendo una mayor diversidad estructural y exploración del espacio de fases.

Estos hallazgos enfatizan la necesidad de considerar tanto la dinámica interna como los efectos de perturbaciones para entender la sostenibilidad, estabilidad y adaptabilidad de comunidades ecológicas complejas modeladas mediante redes de reacciones.

## **Conclusiones sobre la exploración estructural y dinámica**

Los análisis realizados a través de las exploraciones estructural y dinámica proporcionan una visión complementaria y enriquecedora sobre la sostenibilidad y estabilidad de la comunidad ecológica modelada mediante la red de reacciones *RN\_IN* en conjunto a la variabilidad estocástica y perturbaciones consideradas.

Por un lado, la exploración estructural permitió identificar abstracciones o configuraciones estructurales predominantes (*L<sub>f</sub>*) que representan conjuntos de especies activas con diferentes grados de complejidad. Se evidenció que las abstracciones más frecuentes presentan una alta persistencia en el sistema, especialmente bajo condiciones sin perturbación, lo que sugiere la existencia de estados estructurales robustos que sostienen la dinámica del ecosistema.

Por otro lado, la exploración dinámica reveló una mayor diversidad de comportamientos y la aparición de nuevos atractores en el espacio de fases, no evidentes en el análisis estructural. En particular, la dinámica bajo perturbación mostró que ciertos estados estructurales secundarios, que no son estables en condiciones sin perturbación, pueden adquirir estabilidad y persistencia significativa, remarcando la importancia de las perturbaciones para la activación y mantenimiento de configuraciones alternativas del sistema.

# Capítulo 5

## Consideraciones finales

### 5.1. Recomendaciones para otros estudios

A partir del desarrollo y análisis realizado sobre la sostenibilidad de la comunidad ecológica modelada mediante red de reacciones, se identifican varias líneas de recomendación para futuros estudios en modelamiento estructural y dinámico de comunidades ecológicas complejas:

1. **Integración de enfoques estructurales y dinámicos:** La combinación de análisis estructurales de abstracciones con simulaciones dinámicas estocásticas para capturar tanto la robustez estructural como la respuesta dinámica frente a perturbaciones se vuelve fundamental. Esta integración facilita la identificación de atractores estables y la evaluación de persistencia en distintos escenarios.
2. **Exploración detallada de perturbaciones:** Es fundamental incorporar diferentes tipos y magnitudes de perturbaciones, tanto internas como externas, para evaluar su impacto en la estabilidad y persistencia de las configuraciones ecológicas. La modelación de perturbaciones estructurales permite revelar estados alternativos y dinámicas emergentes no evidentes en condiciones ideales.
3. **Escalabilidad y parámetros de simulación:** El análisis mostró que la cantidad de simulaciones por subconjunto y el tamaño de los subconjuntos influyen significativamente en la identificación de estados y su estabilidad. Se recomienda realizar estudios de sensibilidad rigurosos respecto a estos parámetros para garantizar resultados robustos y reproducibles.
4. **Aplicabilidad a en comunidades ecológicas reales:** Se sugiere extender la metodología contrastando con datos empíricos para validar el modelo y ajustar parámetros. La incorporación de heterogeneidad espacial y temporal, junto con la consideración de interacciones más complejas, para mejorar la precisión y utilidad del modelo.

5. **Uso de herramientas computacionales especializadas:** El empleo de bibliotecas especializadas, como *pyCOT*, ha demostrado ser eficaz para el análisis de redes de reacciones y dinámica estructural. Se recomienda la continua actualización y optimización de estas herramientas para facilitar la aplicación de estos métodos en estudios ecológicos interdisciplinarios.
6. **Ánálisis multiescalar y multivariado:** Finalmente, se propone investigar la influencia de procesos en distintas escalas temporales y espaciales, así como la incorporación de múltiples factores ambientales y biológicos que modulen las interacciones, para comprender mejor la dinámica global y la sostenibilidad de la comunidad ecológica en estudio.

Estas recomendaciones buscan orientar futuras investigaciones hacia una modelación cada vez más integral y robusta de comunidades ecológicas complejas, promoviendo el entendimiento profundo de la sostenibilidad y la resiliencia en contextos cambiantes.

## 5.2. Evaluación de las implicaciones del estudio

La implementación de la matriz de transición de Markov utilizada en la exploración dinámica facilitó cuantificar la sostenibilidad de cada abstracción de la comunidad ecológica real *RN\_IN* mediante la probabilidad de permanencia, destacando que las configuraciones más complejas mantienen alta estabilidad aun frente a perturbaciones. Estas observaciones refuerzan la hipótesis de que la sostenibilidad en comunidades ecológicas es un fenómeno multidimensional, dependiente no solo de la estructura fija de las comunidades sino también de su dinámica y respuesta a perturbaciones externas e internas.

En conjunto, los resultados, de las exploraciones estructurales y dinámicas, evidencian que la integración de análisis estructurales con simulaciones dinámicas es fundamental para comprender la complejidad y robustez de comunidades ecológicas, aportando herramientas cuantitativas que permiten identificar configuraciones estables y predecir la evolución de las comunidades frente a escenarios variables y con perturbaciones.

## 5.3. Vinculación de los resultados con investigaciones existentes

Los resultados obtenidos en este estudio se alinean y complementan investigaciones previas que han aplicado la teoría de redes y modelos dinámicos para el análisis de comunidades ecológicas complejas. En particular, la identificación de abstracciones estables mediante redes de reacciones y matrices de transición de Markov está en concordancia con trabajos que han enfatizado la importancia de la estructura y dinámica conjunta para comprender la resiliencia y persistencia en sistemas ecológicos (Veloz and Flores, 2021a,b).

Además, la evidencia de que perturbaciones estructurales pueden, en ciertos casos, favorecer la estabilidad o generar nuevos estados estables, coincide con hallazgos recientes en ecología teórica y estudios de dinámica poblacional, que resaltan la dualidad de las perturbaciones como factores tanto disruptivos como estabilizadores, dependiendo del contexto y la escala temporal (Oliver and Higashi, 2019; Guo et al., 2017).

Por otro lado, el reconocimiento de limitaciones relacionadas con la modelación espacial explícita abre un diálogo con trabajos que integran heterogeneidad espacial y dinámica temporal para explicar patrones complejos en ecosistemas reales. Nuestro enfoque contribuye a esta línea, proponiendo un marco formal que puede ser extendido para incorporar espacialidad con mayor detalle (Veloz and Flores, 2021a).

En síntesis, esta investigación no solo valida conceptos teóricos existentes, sino que aporta nuevos enfoques metodológicos que amplían la comprensión de las dinámicas estructurales y funcionales en comunidades ecológicas con interacciones complejas y perturbaciones, ofreciendo una base sólida para futuros desarrollos en modelamiento ecológico y gestión ambiental.

#### **5.4. Limitaciones de la investigación**

Una limitación significativa durante el desarrollo de esta investigación fue la condición incompleta de la librería pyCOT al momento de realizar el estudio. En particular, no contar con el módulo de cálculo de las organizaciones del sistema *RN\_IN* limitó el análisis estructural profundo del modelo. En consecuencia, se optó por trabajar con abstracciones derivadas, lo cual, si bien permitió avanzar en la caracterización dinámica y la evaluación probabilística mediante matrices de transición de Markov, restringió el espectro analítico al no disponer de la información completa sobre la organización estructural y funcional del sistema. Es razonable suponer que disponer del cálculo exacto de las organizaciones habría ampliado la capacidad para identificar y comprender configuraciones estructurales críticas de la comunidad ecológica, enriqueciendo la interpretación ecológica y la precisión de las predicciones.

Asimismo, el modelo actual no incorpora explícitamente la heterogeneidad espacial, un factor conocido por influir decisivamente en la dinámica y resiliencia de comunidades ecológicas. La inclusión de modelación espacial, así como la consideración de procesos temporales más detallados (por ejemplo, ciclos estacionales o fluctuaciones ambientales), podría ofrecer una visión más realista y robusta de la sostenibilidad del sistema.

Adicionalmente, la dependencia de parámetros cinéticos estimados y la representación discreta de las especies en abstracciones pueden introducir sesgos o limitaciones en la generalización de los resultados, especialmente cuando se pretende extrapolar a comunidades ecológicas reales con complejidades adicionales no consideradas en el modelo.

Por último, aunque el enfoque computacional utilizado es potente para explorar la dinámica probabilística, la alta demanda computacional impone límites prácticos en la exploración exhaustiva del espacio de estados, especialmente al aumentar el número de especies o la complejidad de las interacciones. Esto sugiere que futuros desarrollos deberían incorporar optimizaciones algorítmicas o métodos aproximados para mejorar la escalabilidad y aplicabilidad a comunidades ecológicas más amplias, y explotar el potencial de implementación en sistemas cada vez más complejos como los sistemas socio-ecológicos.

En consecuencia, estas limitaciones destacan oportunidades para el perfeccionamiento metodológico y la expansión del marco conceptual, que permitirán avanzar en la comprensión integral de la sostenibilidad en comunidades ecológicas complejas.

## 5.5. Importancia y significado de la investigación

La presente investigación aporta un avance significativo en el modelamiento y análisis de comunidades ecológicas con interacciones complejas, mediante la aplicación y desarrollo de herramientas basadas en redes de reacciones y análisis estructural y dinámico. Aunque el estudio se ha focalizado en una comunidad ecológica específica, el enfoque metodológico y los resultados obtenidos tienen implicancias mucho más amplias para la comprensión de sistemas ecológicos complejos en general.

El modelamiento a través de redes de reacciones permite representar de manera integrada las múltiples interacciones bióticas, incluyendo relaciones simbióticas, parasitarias y competitivas, que caracterizan a las comunidades ecológicas reales. La combinación de análisis estructural con simulaciones dinámicas estocásticas facilita la identificación de configuraciones estables (abstracciones) y la evaluación de su resiliencia ante perturbaciones, aspectos fundamentales para entender la sostenibilidad ecosistémica.

La formulación y aplicación del enfoque multiescalar y probabilístico presentado ofrecen un marco teórico y computacional robusto para explorar la dinámica y evolución de comunidades con alta complejidad funcional y estructural. Esto es especialmente relevante en contextos actuales de cambio ambiental acelerado y creciente impacto de las distintas actividades que desarrolla el ser humano, donde la capacidad de los ecosistemas para mantener sus funciones esenciales depende críticamente de la estabilidad y adaptabilidad de sus interacciones internas.

Además, el método desarrollado contribuye a la superación de limitaciones tradicionales en el estudio de redes ecológicas, al integrar explícitamente la heterogeneidad temporal, mediante la dinámica y simulaciones estocásticas, y la heterogeneidad espacial, conceptualmente al utilizar el marco de modelación de red de reacciones, con posibilidad de inclusión explícita en desarrollos futuros. Por lo que, permite una cuantificación explícita de la sostenibilidad a partir de la matriz de transición de Markov. Este enfoque es aplicable y extensible a diversos

sistemas biológicos complejos, desde comunidades microbianas hasta ecosistemas terrestres y acuáticos, brindando una herramienta valiosa para la investigación interdisciplinaria y la toma de decisiones en conservación y manejo ambiental.

En resumen, esta investigación no solo fortalece el entendimiento científico de la dinámica y sostenibilidad en comunidades ecológicas con interacciones complejas, sino que también establece un puente metodológico entre la teoría matemática, la computación y la ecología aplicada, con la posibilidad de abrir nuevas vías para la exploración, modelamiento y conservación de la biodiversidad en ecosistemas reales.

## 5.6. Resultados inesperados

Durante el desarrollo del análisis estructural y dinámico de la comunidad ecológica *RN\_IN*, se identificaron varios hallazgos inesperados que aportan una visión más profunda y compleja sobre la dinámica y sostenibilidad del sistema, y que abren nuevas líneas de investigación.

En primer lugar, se observó que la exploración dinámica, realizada mediante simulaciones estocásticas y la construcción de matrices de transición de Markov, reveló la presencia de atractores y configuraciones estables (abstracciones) que no fueron evidentes en el análisis puramente estructural. Este hallazgo sugiere que la dinámica temporal y los procesos estocásticos pueden inducir comportamientos emergentes que no se anticipan únicamente a partir de la estructura de la red de interacciones, lo que resalta la importancia de combinar ambas perspectivas para una comprensión integral del sistema.

Igualmente, se detectó un fenómeno contraintuitivo en la respuesta del sistema a las perturbaciones estructurales debido a que, algunas abstracciones que mostraban baja o nula estabilidad en el sistema sin perturbación incrementaron notablemente su probabilidad de permanencia cuando se introdujeron perturbaciones controladas. Este resultado indica que la presencia de perturbaciones puede facilitar la emergencia o estabilización de nuevas configuraciones ecológicas, evidenciando un efecto potencialmente estabilizador o modulador de la resiliencia en comunidades ecológicas complejas.

Adicionalmente, el comportamiento contextual de la respuesta a la variación en la cantidad de simulaciones realizadas ( $M$ ) fue un aspecto inesperado. Se observó que el incremento en el número de simulaciones no siempre se traduce en una mayor estabilidad o frecuencia consistente de ciertos estados, mostrando fluctuaciones y desviaciones que implican una complejidad inherente en la convergencia estadística del modelo. Este hallazgo sugiere la necesidad de un análisis más detallado sobre la sensibilidad a los parámetros de simulación y la robustez de los resultados.

Finalmente, destacamos la limitación actual del modelo en la incorporación explícita de la heterogeneidad espacial. Aunque la estructura y dinámica del sistema consideran elementos conceptuales relacionados con la distribución espacial, la ausencia de una modelación espacial explícita restringe la capacidad de capturar ciertos procesos ecológicos relevantes, lo que constituye una oportunidad importante para futuras investigaciones.

En conclusión, estos resultados inesperados no solo enriquecen el análisis realizado, sino que también remarcan la complejidad inherente de las comunidades ecológicas con interacciones complejas y la necesidad de enfoques integrales que combinen análisis estructurales, dinámicos y espaciales para una comprensión más completa y realista de la sostenibilidad ecológica.

# Bibliografía

- Adams, M. (2016). *Ecological Crisis, Sustainability and the Psychosocial Subject: Beyond Behaviour Change*. Studies in the Psychosocial. Palgrave Macmillan, London.
- Allesina, S. and Tang, S. (2015). Stability criteria for complex ecosystems. *Nature*, 530:205–208.
- Andes, F. (2024). La comunicación de la ciencia a través de medios culturales: La narrativa como herramienta de transmisión de conocimiento. Accedido: 2024-07-17.
- Aric Hagberg, Pieter Swart, D. S. C. (2005-2024). Networkx. <https://networkx.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Begon, M., Harper, J. L., and Townsend, C. R. (1986). *Ecology: Individuals, Populations and Communities*. Blackwell Scientific Publications, Oxford, UK.
- Begon, M., Townsend, C. R., and Harper, J. L. (2006). *Ecology: From Individuals to Ecosystems*. Blackwell Publishing, 4th edition.
- Berkes, F., Colding, J., and Folke, C. (2003). *Navigating Social-Ecological Systems: Building Resilience for Complexity and Change*. Cambridge University Press, Cambridge, UK. Accessed: 2024-05-20.
- Birkhoff, G. (1948). *Lattice Theory*. Colloquium publications. American Mathematical Society.
- Blackman, R. L. and Eastop, V. F. (2000). *Aphids*. Blackwell Science Ltd, Oxford, UK.
- Burden, R. L. and Faires, J. D. (2015). *Numerical Analysis*. Cengage Learning, Boston, MA, 10th edition edition.
- Cardinale, B. J., Duffy, J. E., Gonzalez, A., Hooper, D. U., Perrings, C., Venail, P., Narwani, A., Mace, G. M., Tilman, D., Wardle, D. A., Kinzig, A. P., Daily, G. C., Loreau, M., Grace, J. B., Larigauderie, A., Srivastava, D. S., and Naeem, S. (2012). Biodiversity loss and its impact on humanity. *Nature*, 486(7401):59–67.
- Chapin, F. S., Matson, P. A., and Vitousek, P. M. (2011). *Principles of Terrestrial Ecosystem Ecology*. Springer, 2nd edition.

- Chesson, P. (2000). Mechanisms of maintenance of species diversity. *Annual Review of Ecology and Systematics*, 31:343–366.
- Connell, J. H. (1978). Diversity in tropical rain forests and coral reefs. *Science*, 199(4335):1302–1310.
- Crego, R. D., Jiménez, J. E., and Rozzi, R. (2016). A synergistic trio of invasive mammals? facilitative interactions among beavers, muskrats, and mink at the southern end of the americas. *Biological Invasions*, 18:1923–1938.
- Dakos, V., Scheffer, M., van Nes, E. H., Brovkin, V., Petoukhov, V., and Held, H. (2008). Slowing down as an early warning signal for abrupt climate change. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(38):14308–14312.
- DeAngelis, D. L. and Grimm, V. (2020). Ecological modeling and theory: a survey of recent advances. *Ecological Modelling*, 415:108825.
- Dittrich, P. and di Fenizio, M. S. (2004). Chemical organization theory: Towards a theory of constructive dynamical systems. *Bulletin of Mathematical Biology*, 66(6):1531–1571.
- Dittrich, P. and di Fenizio, P. S. (2007). Chemical organisation theory. *Bulletin of Mathematical Biology*, 69(4):1199–1231.
- Ebenhard, T. (1990). *Parasitoids: Their Role in Natural Ecosystems*. Croom Helm, London, UK.
- Edelstein-Keshet, L. (2005). *Mathematical Models in Biology*. Society for Industrial and Applied Mathematics, second edition.
- Feinberg, M. (1979). *Lectures on Chemical Reaction Networks*, pages 1–72. American Chemical Society.
- Feinberg, M. (2019). *Foundations of Chemical Reaction Network Theory*, volume 202 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer.
- Folke, C., Carpenter, S., Elmqvist, T., Gunderson, L., Holling, C. S., and Walker, B. (2002). Resilience and sustainable development: Building adaptive capacity in a world of transformations. *AMBIO: A Journal of the Human Environment*, 31(5):437–440. Accessed: 2024-05-20.
- Folke, C., Carpenter, S. R., Walker, B., Scheffer, M., Chapin, F. S., and Rockström, J. (2010). Resilience thinking: Integrating resilience, adaptability and transformability. *Ecology and Society*, 15(4):20.
- Fontana, W. and Buss, L. W. (1996). The arrival of the fittest: Toward a theory of biological organization. *Bulletin of Mathematical Biology*, 56(1):1–64.

- Godfray, H. C. J. (2000). *Parasitoids: Behavioral and Evolutionary Ecology*. Princeton University Press, Princeton, NJ, USA.
- Goutsias, J. and Lee, F. (2006). Mathematical modeling of biochemical reaction systems. *IEEE Control Systems Magazine*, 26(4):22–34.
- Grisel, O. (2008-2024). joblib. <https://joblib.readthedocs.io/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Gross, T., Rudolf, L., Levin, S. A., and Dieckmann, U. (2009). Generalized models reveal stabilizing factors in food webs. *Science*, 325(5941):747–750.
- Guo, J., Hatt, S., He, K., Chen, J., Francis, F., and Wang, Z. (2017). Nine facultative endosymbionts in aphids. a review. *Journal of Asia-Pacific Entomology*, 20(3):794–801.
- Heylighen, F., Beigi, S., and Veloz, T. (2024). Chemical organization theory as a general modeling framework for self-sustaining systems. *Systems*, 12(4):111.
- Horn, R. A. and Johnson, C. R. (1991). *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge University Press.
- Hunter, J. D. (2003-2024). Matplotlib. <https://matplotlib.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Iserles, A. (2009). *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2nd edition edition.
- Kiri Choi, Totte Karlsson, H. S. (2010-2024). libroadrunner. <https://libroadrunner.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Kovacs, E., Hoaghia, M.-A., Senila, L., Scurtu, D. A., Dumitras, D. E., and Roman, C. (2020). Sustainability problematization and modeling opportunities. *Sustainability*, 12(23).
- Levin, S. A. (1998). Ecosystems and the biosphere as complex adaptive systems. *Ecosystems*, 1(5):431–436.
- Margalef, R. (1974). *Ecología*. Ediciones Omega, Barcelona.
- May, R. M. (1972). Will a large complex system be stable? *Nature*, 238:413–414.
- McFall-Ngai, M., Hadfield, M. G., Bosch, T. C., Carey, H. V., Tomaras, I. D., Medina, M., Gilbert, J. A., Knight, R., Mazmanian, S. K., and Koch, E. J. (2013). Animals in a bacterial world, a new imperative for the life sciences. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(Supplement\_1):3229–3235.
- McKinney, W. (2008-2024). pandas. <https://pandas.pydata.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.

Mitchell, S. (2009-2024). Pulp. <https://coin-or.github.io/pulp/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.

Moore, M.-L. and Trosper, R. (2021). Resilience, robustness, and vulnerability: perspectives for ecology and social-ecological systems. *Current Opinion in Environmental Sustainability*, 50:23–32.

Murray, J. D. (2002). *Mathematical Biology I. An Introduction*, volume 17 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, third edition.

Normark, B. B. (2003). The evolution of alternative genetic systems in insects. *Annual Review of Entomology*, 48:397–423.

Nowack, E. C. and Melkonian, M. (2010). Endosymbiotic associations in protists. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 365(1541):669–680.

Oliphant, T. (2006-2024). Numpy. <https://numpy.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.

Oliver, K. M., Degnan, P. H., and Moran, N. A. (2010). Facultative bacterial symbionts in insects: a general perspective. *Annual Review of Entomology*, 55:247–269.

Oliver, K. M. and Higashi, C. H. (2019). Variations on a protective theme: Hamiltonella defensa infections in aphids variably impact parasitoid success. *Current Opinion in Insect Science*, 32:1–7. Ecology • Parasites/Parasitoids/Biological control.

Ostrom, E. (2009). A general framework for analyzing sustainability of social-ecological systems. *Science*, 325(5939):419–422. Accessed: 2024-05-20.

Peter, S. (2008). *Chemische Organisationen und Kontinuierliche Dynamik*. Friedrich Schiller University of Jena.

Peter, S. and Dittrich, P. (2011). On the relation between organizations and limit sets in chemical reaction systems. *Advances in Complex Systems*, 14(01):77–96.

Peter, S., Ibrahim, B., and Dittrich, P. (2021). Linking network structure and dynamics to describe the set of persistent species in reaction diffusion systems. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, 20(4):2037–2076.

Peter, S., Veloz, T., and Dittrich, P. (2010). Feasibility of organizations—a refinement of chemical organization theory with application to p systems. In *International Conference on Membrane Computing*, pages 325–337. Springer.

Petri, C. A. (1962). *Kommunikation mit Automaten*. PhD thesis, University of Bonn, Bonn.

Pringle, R. M. and Hutchinson, M. C. (2020). Resolving food-web structure. *Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics*, 51(1):55–80.

- Rotolo, W. (2019-2024). Pyvis. <https://pyvis.readthedocs.io/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Schnell, I. (2008-2024). bitarray. <https://pypi.org/project/bitarray/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Stanley, R. P. (1997). *Enumerative Combinatorics, vol. 1*, volume 49 of *Cambridge Studies in Advanced Mathematics*. Cambridge University Press.
- Suweis, S., Grilli, J., Banavar, J. R., Allesina, S., and Maritan, A. (2015). Emergence of structural and dynamical properties of ecological mutualistic networks. *Nature*, 530:307–310.
- United Nations (2024a). Biodiversidad. Accessed: 2024-05-17.
- United Nations (2024b). Cambio climático. Accessed: 2024-05-17.
- United Nations (2024c). Objetivos de desarrollo sostenible. Accessed: 2024-05-17.
- Urquiza, A., Amigo, C., Billi, M., Hanhardt, I., and Moenne, F. (2019). *Transdisciplina en la Universidad de Chile: Conceptos, Barreras y Desafíos*. Universidad de Chile, Santiago, Chile. Accessed: 2024-05-20.
- Veber, G., Boissel, J.-P., Fritsch, J.-M., Deneubourg, J.-L., and Boissel, J.-P. (2008). Multiscale modeling of cellular systems: a modular approach. *Biophysical Journal*, 94(11):3717–3731.
- Veloz, T. (2020). The complexity–stability debate, chemical organization theory, and the identification of non-classical structures in ecology. *Foundations of Science*, 25(1):259–273.
- Veloz, T. (2025). pyCOT: Chemical organization theory python package. Accesso: 03 de abril de 2025.
- Veloz, T. and Flores, D. (2021a). Reaction network modeling of complex ecological interactions: Endosymbiosis and multilevel regulation. *Complexity*, 2021(1):8760937.
- Veloz, T. and Flores, D. (2021b). Toward endosymbiosis modeling using reaction networks. *Soft Computing*, 25(9):6831–6840.
- Veloz, T., Hegele, S., and Maldonado, P. (2023a). A markovian framework to study the evolution of complexity and resilience in chemical organizations. In *Artificial Life Conference Proceedings 35*, volume 35, page 60, Cambridge, MA, USA. MIT Press.
- Veloz, T., Heylighen, F., and Witkowski, O. (2023b). Complexity and evolution. *Entropy*, 25(2).
- Veloz, T. and Ramirez, C. C. (2022). The complex and systemic establishment of interactions in the ecological communities. *Revista de la Universidad Tecnológica Metropolitana*.

- Veloz, T. and Razeto-Barry, P. (2017a). Reaction networks as a language for systemic modeling: Fundamentals and examples. *Systems*, 5(1).
- Veloz, T. and Razeto-Barry, P. (2017b). Reaction networks as a language for systemic modeling: On the study of structural changes. *Systems*, 5(2).
- Veloz González, T. I. (2010). A computational study of algebraic chemistry. Master's thesis, Universidad de Chile.
- Vet, L. E. and Dicke, M. (2002). Information reliability affects the foraging behaviour and life history of parasitoids. *Annual Review of Entomology*, 47:141–171.
- Virtanen, P. (2001-2024). Scipy. <https://scipy.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Waskom, M. (2012-2024). Seaborn. <https://seaborn.pydata.org/>. Consultada el 10 de agosto de 2024.
- Wikimedia Commons contributors (2023). Sustainable development.svg. Accessed: 2024-05-20. Licensed under CC BY-SA 2.0.
- World Commission on Environment and Development (1987). *Our Common Future*. Oxford University Press, Oxford, UK. Accessed: 2024-05-20.

# Apéndice A

## Apéndice

### A.1. *Script de Python*<sup>TM</sup> para la simulación numérica del modelo *RN\_AEP* con la inclusión de perturbaciones

A continuación, presentamos el *Script* desarrollado, que toma como base la librería *pyCOT*, para simular la dinámica del modelo *RN\_AEP* bajo condiciones de perturbación. El código utiliza el método de *Euler explícito* para calcular la evolución temporal de las especies y aplica perturbaciones controladas, permitiendo analizar su impacto en la estabilidad del sistema.

```
#####
#####Simulación numérica de modelos RN con inclusión de perturbaciones#####
#####

# Import necessary libraries and modules
import os
import sys
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import odeint

# Add the root directory to the PYTHONPATH
sys.path.append(os.path.dirname(os.path.dirname
(os.path.abspath(__file__))))
```

```

# Import the necessary modules from pyCOT
from pyCOT.io.functions import read_txt
from pyCOT.plot_dynamics import plot_series_ode
from pyCOT.simulations import simulation, rate_ping_pong

# Configuración inicial
file_path = 'Txt/RN_AEP_05.txt'
# RN_AEP_05.txt corresponde a la última versión de RN_AEP
rn = read_txt(file_path)
species = list(rn.stoichiometry_matrix().species)
# Convertir a lista explícita
reactions = rn.stoichiometry_matrix().reactions

rate_list = ['mak'] * len(reactions)

# Definición de Condiciones iniciales:

# Vector de Condiciones iniciales para Concentraciones x0
x0 = [16.0, 0.0, 15.0, 1.0, 0.0, 0.0, 0.0]

#Parámetros empíricos ecológicos
e = 0.01
h = 250
m = 1000

#Vector de Condiciones iniciales para constantes de reacción k_i
spec_vector = [[1/8], [0.9/10], [0.1/10], [1/8], [1/h], [1/h],
                [1/(h*e)], [1/(h*e)], [0.01/10], [0.99/10], [0.99/10],
                [0.01/10], [1/m], [1/m], [1/m], [1/m], [100/(h*e)]]]

# Función para simular con control de estabilidad
def simulate_ode(x0, t_span):
    additional_laws = {'ping_pong': rate_ping_pong}
    try:
        time_series, _ =
            simulation(rn, rate=rate_list, spec_vector=spec_vector,
                       x0=x0, t_span=t_span, n_steps=1000)
    except RuntimeError as e:
        print("Error de simulación: ", str(e))
        return None

```

```

if (np.isnan(time_series).any().any())
    or (np.isinf(time_series).any().any()):
    print("Error: La simulación contiene valores NaN o infinitos.")
    return None

return pd.DataFrame(time_series, columns=["Time"] + species)

# Definición del punto de intervención y la perturbación
tp_list = [20] # Puntos de intervención
add_concentration_p = 15 # Concentración a sumar para P

# Simulación inicial hasta la primera intervención
time_series_combined = pd.DataFrame()
current_time = 0

for tp in tp_list:
    # Simulación hasta el tiempo de intervención
    time_series_partial = simulate_ode(x0.copy(), (current_time, tp))
    time_series_combined = pd.concat([time_series_combined,
    time_series_partial], ignore_index=True)

    # Aplicar la perturbación solo a la especie P
    species_dict = {s.strip(): i for i, s in enumerate(species)}
    if "P" in species_dict and species[species_dict["P"]] == "P":
        x0[species_dict["P"]] += add_concentration_p

    current_time = tp

# Simulación final desde el último punto de intervención hasta el final
time_series_final = simulate_ode(x0.copy(), (current_time, 100))
time_series_combined = pd.concat([time_series_combined, time_series_final]
, ignore_index=True)

# Gráfica de resultados en formato plot_series_ode
def plot_series_ode_p(time_series, xlabel="Time", ylabel="Concentration",
title="Time Series of Concentrations with Perturbations", show_grid=True):
    if 'Time' not in time_series.columns:
        raise ValueError("The DataFrame must include a 'Time' column for time values.")

```

```

fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 6))
for species in time_series.columns:
    if species != 'Time':
        ax.plot(time_series['Time'], time_series[species],
                label=species)

ax.set_xlabel(xlabel)
ax.set_ylabel(ylabel)
ax.set_title(title)
ax.grid(show_grid)
ax.legend()

plt.tight_layout()
plt.show()

# Función de pyCUT ajustada para obtener gráfica en mismo formato
plot_series_ode_p(time_series_combined)

```

## A.2. *Script de Python*<sup>TM</sup> para la cuantificación de la sostenibilidad en comunidades ecológicas reales

A continuación, presentamos el *Script* desarrollado para simular la dinámica estructural de abstracciones dentro de una comunidad ecológica real, utilizando redes de reacciones. Este código se enfoca en la transición de estados en una comunidad ecológica representada por abstracciones, las cuales son colecciones de especies que interactúan entre sí.

```

#####
#####Cálculo de matriz de transición de Markov #####
#####y conteo de abstracciones por subconjunto#####
#####

# Este script implementa un análisis de redes de reacciones utilizando
# principios de la teoría de conjuntos y cadenas de Markov. El objetivo
# principal es estudiar la dinámica de sistemas biológicos complejos
# mediante la generación y análisis de subconjuntos aleatorios de especies,
# permitiendo identificar patrones emergentes y comportamientos colectivos

```

```

# en redes de reacciones.

# Import necessary libraries and modules
import os
import sys
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from collections import Counter, defaultdict
import pandas as pd
from scipy.interpolate import make_interp_spline, BSpline

# Configuración del entorno de trabajo y definición de rutas para acceder
# a los módulos personalizados. Esta sección establece la estructura
# de directorios necesaria para la correcta ejecución del algoritmo,
# garantizando que todas las dependencias estén disponibles
# independientemente del punto de entrada al script.
ROOT_DIR = os.path.dirname(os.path.dirname(os.path.abspath(__file__)))
sys.path.append(ROOT_DIR)

# Importación de módulos personalizados de la biblioteca pyCOT (Python
# Chemical Organization Theory), que proporciona herramientas
# especializadas para el análisis de redes de reacciones,
# simulaciones dinámicas y visualización de resultados.
from pyCOT.io.functions import read_txt
from pyCOT.plot_dynamics import plot_series_ode
from pyCOT.simulations import *

### Módulo de Inicialización y Carga de Datos

# Este módulo se encarga de cargar la red de reacciones desde un archivo
# de texto y establecer las condiciones iniciales para las simulaciones
# posteriores. La red de reacciones representa un sistema específico
# que será objeto de análisis en este estudio.
file_path = os.path.join(ROOT_DIR, 'Txt', 'RN_IN.txt')
rn = read_txt(file_path)

# Extracción de la información estructural de la red de reacciones,
# incluyendo las especies participantes y las reacciones que las conectan.
# Esta información es fundamental para construir la matriz estequiométrica
# que describe matemáticamente las transformaciones químicas en el sistema.

```

```

species = rn.stoichiometry_matrix().species
reactions = rn.stoichiometry_matrix().reactions

# Definición de las condiciones iniciales para la simulación dinámica del
# sistema. Se establece un vector de concentraciones iniciales uniformes
# para todas las especies y se especifica el tipo de cinética (ley de
# acción de masas - 'mak') para todas las reacciones, junto con los
# coeficientes estequiométricos correspondientes.
x0 = [1.0] * len(species)
rate_list = ['mak'] * len(reactions)
spec_vector = [[1.0]] * len(reactions)

# Función de validación para vectores x0

# Esta función verifica que un vector x0 no tenga todas sus componentes
# en cero, lo que garantiza que siempre haya al menos una especie
# activa en cualquier configuración del sistema. Esta validación
# es esencial para evitar estadosbiológicamente irrelevantes
# y asegurar la validez matemática de las simulaciones.
def validar_x0_no_nulo(vector):
    """
    Verifica que el vector x0 no tenga todas sus componentes en cero.

    Args:
        vector: Lista o array con los valores del vector x0

    Returns:
        bool: True si el vector tiene al menos un valor distinto de cero,
        False en caso contrario
    """
    return any(v != 0 for v in vector)

### Módulo de Selección Interactiva de Especies

# Este módulo implementa una interfaz de usuario para la selección manual
# de especies de interés. Permite al investigador enfocar el análisis en
# subconjuntos específicos de especies basados en conocimiento experto
# o hipótesis particulares sobre el sistema estudiado.
species_incluidas = []

```

```

# Proceso iterativo de consulta al usuario para cada especie identificada
# en la red. Este enfoque interactivo combina el análisis computacional con
# el criterio experto del investigador, enriqueciendo la interpretación
# biológica de los resultados matemáticos.
print("\nSeleccione manualmente las especies que desea incluir para la
generación de subconjuntos:")
for sp in species:
    while True:
        respuesta = input(f"¿Incluir especie '{sp}'? (Y/N): ").strip().
        upper()
        if respuesta == 'Y':
            species_incluidas.append(sp)
            break
        elif respuesta == 'N':
            break
        else:
            print("Respuesta no válida. Escriba 'Y' o 'N'.")
```

# Confirmación visual de las especies seleccionadas para verificar la correcta configuración del análisis antes de proceder con las simulaciones.

```

print(f"\nEspecies seleccionadas para la generación de subconjuntos:")
print(species_incluidas)

# Validación de la selección para evitar análisis sin sentido biológico.
# Si no se selecciona ninguna especie, el algoritmo termina su ejecución,
# ya que no habría subconjuntos significativos para analizar.
if not species_incluidas:
    print("No se seleccionó ninguna especie. Abortando ejecución.")
    sys.exit(1)

# Creación del vector x0 inicial para las especies seleccionadas, donde 1
# indica presencia (especie seleccionada) y 0 ausencia (especie
# no seleccionada). Este vector servirá como base para la generación
# de subconjuntos y análisis posterior.
x0_especies_seleccionadas = [1 if sp in species_incluidas else 0 for sp
in species]
```

# Visualización del vector x0 de especies seleccionadas con sus etiquetas correspondientes, facilitando la interpretación biológica del estado inicial del sistema.

```

print("\n Vector x0 de especies seleccionadas con etiquetas:")
for sp, valor in zip(species, x0_especies_seleccionadas):
    estado = "ACTIVA" if valor == 1 else "inactiva"
    print(f"{sp}: {estado}")

# Visualización del vector x0 de especies seleccionadas en formato
# binario, proporcionando una representación matemática compacta
# del estado inicial.
# print("\n Vector x0 de especies seleccionadas en binario:")
print(x0_especies_seleccionadas)

### Módulo de Generación de Subconjuntos Aleatorios

# Este módulo implementa un algoritmo estocástico para la generación de
# múltiples subconjuntos de especies, utilizando únicamente las especies
# seleccionadas como activas. Utiliza un modelo probabilístico
# binomial para simular diferentes estados iniciales del sistema,
# permitiendo explorar el espacio de estados posibles
# de manera sistemática pero aleatoria.
N = 25 # Número de subconjuntos a generar
p = 0.5 # Probabilidad de inclusión de cada especie en un subconjunto

# Proceso de generación de subconjuntos mediante muestreo aleatorio,
# considerando únicamente las especies seleccionadas como activas.
# Cada subconjunto representa una posible configuración inicial del
# sistema, donde algunas especies seleccionadas están presentes
# y otras ausentes.
subsets = []
# print("\n Generando subconjuntos aleatorios no nulos...")
while len(subsets) < N:
    # Aplicación del modelo binomial para determinar la presencia (1) o
    # ausencia (0)
    # de cada especie seleccionada en el subconjunto actual. Este enfoque
    # probabilístico permite explorar el espacio de configuraciones
    # de manera eficiente.
    mask = np.random.binomial(1, p, size=len(species_incluidas))

    # Verificación de que el subconjunto no sea vacío (al menos una especie
    # activa) para evitar configuraciones biológicamente irrelevantes.

```

```

if any(mask == 1): # Asegura que al menos una especie esté activa
    subset = [s for s, m in zip(species_incluidas, mask) if m == 1]
    subsets.append(subset)
else:
    # Si el subconjunto es vacío, activar una especie aleatoria para
    # garantizar que no haya subconjuntos vacíos.
    idx = np.random.randint(0, len(species_incluidas))
    subset = [species_incluidas[idx]]
    subsets.append(subset)

# print(f" Se generaron {len(subsets)} subconjuntos no nulos.")

### Módulo de Codificación y Etiquetado de Subconjuntos

# Este módulo transforma los subconjuntos generados en representaciones
# vectoriales binarias adecuadas para el análisis matemático posterior.
# Además, crea etiquetas legibles para facilitar la interpretación
# biológica de los resultados.
x0_vectors = []
subset_labels = []

# Proceso de codificación de cada subconjunto como un vector binario donde
# 1 indica presencia y 0 ausencia de la especie correspondiente.
# Esta representación vectorial es compatible con los algoritmos de
# simulación dinámica y análisis de redes.
for subset in subsets:
    # Creación del vector x0 completo para todas las especies, donde solo
    # las especies seleccionadas y presentes en el subconjunto actual
    # tendrán valor 1.
    x0 = [1 if (sp in species_incluidas and sp in subset) else 0 for sp
          in species]

    # Verificación adicional para garantizar que el vector x0 no sea nulo
    if validar_x0_no_nulo(x0):
        x0_vectors.append(x0)
        # Creación de etiquetas descriptivas que enumeran las especies
        # presentes en cada subconjunto, facilitando la interpretación
        # biológica de los resultados numéricos.
        label = ', '.join(subset) if subset else "(ninguna)"

```

```

        subset_labels.append(label)
    else:
        continue
        # print(f" Se descartó un vector x0 nulo durante la codificación.")

# Verificación final de que todos los vectores x0 generados son no nulos
print(f"\n Verificación: {len(x0_vectors)} vectores x0 generados, todos
no nulos.")

# Visualización de la lista de vectores x0 de los subconjuntos generados en
# formato binario, proporcionando una representación matemática de todos
# los estados iniciales considerados.
print("\n Lista de vectores x0 de los subconjuntos generados en binario:")
for i, x0 in enumerate(x0_vectors):
    print(f"Subconjunto {i+1}: {x0}")

# Análisis estadístico de los subconjuntos generados para identificar
# patrones de co-ocurrencia y frecuencias de aparición. Esta información
# es valiosa para detectar configuraciones predominantes o raras en el
# espacio de estados.
conteo_labels = Counter(subset_labels)

### Módulo de Generación de Códigos para Subconjuntos y Abstracciones

# Este módulo implementa la generación de códigos únicos para cada
# subconjunto y abstracción, facilitando su identificación
# en gráficos y análisis. Los códigos proporcionan una representación
# compacta y estandarizada para la visualización y referencia en
# el contexto de la investigación biomatemática.

# Función para generar un código único a partir de un patrón binario.
# Esta función convierte un patrón binario en un código alfanumérico que
# representa de manera compacta la configuración de especies en el sistema.
def generate_binary_code(pattern):
    # Conversión del patrón binario a una representación hexadecimal
    # compacta que codifica la presencia/ausencia de especies en el
    # sistema.
    if all(v == 0 for v in pattern):
        return "S0" # Código especial para el conjunto vacío

```

```

# Convertir el patrón binario a un entero y luego a hexadecimal
binary_str = ''.join(map(str, pattern))
decimal = int(binary_str, 2)
hex_code = hex(decimal)[2:].upper() # Eliminar '0x' y convertir a
mayúsculas

return f"S{hex_code}"

# Creación de un diccionario que mapea cada etiqueta de subconjunto a un
# código único. Este mapeo permite referenciar eficientemente
# los subconjuntos en visualizaciones y análisis, manteniendo la
# trazabilidad con las descripciones originales.
subset_codes = {}
subset_code_to_label = {}

# Generación de códigos para los subconjuntos iniciales.
for i, (label, x0) in enumerate(zip(subset_labels, x0_vectors)):
    # Generación de un código único basado en el patrón binario del
    # subconjunto.
    code = f"S{i+1}"
    subset_codes[label] = code
    subset_code_to_label[code] = label

# Impresión del mapeo entre códigos y etiquetas para referencia.
print("\n Tabla de correspondencia entre códigos y subconjuntos:")
for code, label in subset_code_to_label.items():
    print(f"{code}: {label}")

### Módulo de Visualización de Frecuencia de Aparición de Especies por
Subconjunto

# Este módulo implementa una nueva visualización que muestra la
# frecuencia de aparición de cada especie en los subconjuntos generados,
# permitiendo identificar patrones de distribución y co-ocurrencia
# entre las especies del sistema.

# Creación de una matriz de presencia/ausencia de especies en cada
# subconjunto Esta matriz servirá como base para el análisis de
# frecuencia de aparición

```

```

especies_presencia = np.zeros((len(species_incluidas), len(x0_vectors)))

# Llenado de la matriz de presencia/ausencia
for j, subset in enumerate(subsets):
    for i, sp in enumerate(species_incluidas):
        if sp in subset:
            especies_presencia[i, j] = 1

# Cálculo de la frecuencia de aparición de cada especie en los
# subconjuntos
frecuencia_especies = np.sum(especies_presencia, axis=1)

# Ordenamiento de especies por frecuencia de aparición (de mayor a menor)
indices_ordenados = np.argsort(-frecuencia_especies)
especies_ordenadas = [species_incluidas[i] for i in indices_ordenados]
frecuencias_ordenadas = frecuencia_especies[indices_ordenados]

# Generación de la gráfica de barras horizontal que muestra
# la frecuencia de aparición de cada especie en los subconjuntos
# generados, usando los nombres completos de las especies
bars = plt.barh(range(len(especies_ordenadas)), frecuencias_ordenadas,
                 tick_label=especies_ordenadas, color='green',
                 edgecolor='black')

# Mejora visual del gráfico con etiquetas de frecuencia junto a cada
# barra
for bar, freq in zip(bars, frecuencias_ordenadas):
    plt.text(bar.get_width() + 0.5, bar.get_y() + bar.get_height()/2,
             str(int(freq)), ha='left', va='center', fontweight='bold')

# Sean completamente visibles
plt.subplots_adjust(left=0.3)

plt.xlabel("Número de subconjuntos")
plt.ylabel("Especies")
plt.title("Frecuencia de aparición de especies por subconjuntos")
plt.grid(axis='x')
plt.tight_layout()

plt.show()

```

```

### Módulo de Selección de Especies para Reducción de Concentración

# Este módulo permite al usuario seleccionar especies cuyas
# concentraciones iniciales se dividirán por 10 antes de las
# simulaciones, simulando escenarios como la invasión de especies
# no nativas en una comunidad ecológica.

# Inicialización de la lista de especies con concentración reducida
especies_reducidas = []

print("\n Configuración de concentraciones iniciales para simulaciones:")
print(" Seleccione las especies cuya concentración inicial se dividirá
por 10.")
print(" Esto permite simular escenarios como la invasión de especies
no nativas.")

# Proceso iterativo de consulta al usuario para cada especie
for sp in species:
    while True:
        respuesta = input(f"¿Reducir concentración de '{sp}' por un
factor de 10? (Y/N): ").strip().upper()
        if respuesta == 'Y':
            especies_reducidas.append(sp)
            break
        elif respuesta == 'N':
            break
        else:
            print("Respuesta no válida. Escriba 'Y' o 'N'.") 

# Confirmación visual de las especies seleccionadas para reducción de
# concentración
if especies_reducidas:
    print(f"\n Especies con concentración reducida (factor 1/10):")
    print(especies_reducidas)
else:
    print("\n No se seleccionaron especies para reducción de
concentración.")

### Módulo de Simulaciones Dinámicas

```

```

# Este módulo implementa la simulación numérica de la dinámica del
# sistema para múltiples condiciones iniciales, permitiendo
# explorar el comportamiento del sistema en diferentes regiones del
# espacio de estados y analizar patrones emergentes.

# Definición de parámetros para las simulaciones
M = 1000 # Número de simulaciones a realizar
additional_laws = {} # Leyes cinéticas adicionales (vacío por defecto)
umbral_minimo = 1e-20 # Umbral mínimo para la conversión binaria
# (evita problemas numéricos)

# Inicialización de estructuras de datos para almacenar resultados
matrices_binarias = [] # Lista para almacenar las matrices binarias de
# cada simulación
matrices_reales = [] # Lista para almacenar las matrices de
# concentraciones reales
condiciones_iniciales = [] # Lista para almacenar las condiciones
# iniciales de cada simulación

print("\n Iniciando módulo de simulaciones dinámicas...")
print(f" Realizando {M} simulaciones con extracción de los últimos 100
pasos...")

# Bucle principal de simulaciones
for i in range(M):
    # Generación de condiciones iniciales aleatorias para cada simulación
    # Se utiliza una distribución uniforme para explorar diferentes
    # regiones del espacio de estados
    x0_random = np.random.uniform(0, 1, size=len(species)).tolist()

    # Aplicar reducción de concentración a las especies seleccionadas
    for j, sp in enumerate(species):
        if sp in especies_reducidas:
            x0_random[j] /= 10.0 # Dividir la concentración por 10

    # Verificación de que el vector x0 aleatorio no sea nulo
    if not validar_x0_no_nulo(x0_random):
        # Si es nulo, activar una especie aleatoria
        idx = np.random.randint(0, len(species))

```

```

x0_random[idx] = 1.0

# Almacenar las condiciones iniciales para análisis posterior
condiciones_iniciales.append(np.array(x0_random) > 0)

try:
    # Simulación numérica de la dinámica del sistema utilizando el
    # integrador proporcionado por la biblioteca pyCOT.
    # Se especifica el intervalo de tiempo, el número de pasos
    # y las leyes cinéticas adicionales.
    time_series, _ = simulation(
        rn,                      # Red de reacciones
        rate=rate_list,          # Lista de tipos de cinética
        spec_vector=spec_vector, # Vectores de coeficientes
        estequiométricos
        x0=x0_random,            # Condiciones iniciales aleatorias
        t_span=(0, 100),          # Intervalo de tiempo de simulación
        n_steps=1000,             # Número de pasos de integración
        additional_laws=additional_laws # Leyes cinéticas
        adicionales
    )

    # Extracción de los últimos 100 pasos de la simulación para
    # analizar el comportamiento asintótico del sistema.
    # Se considera que después de este tiempo el sistema ha
    # alcanzado un estado estacionario o un comportamiento
    # característico.
    matriz_real = time_series.iloc[-100:, 1:].values

    # Conversión de las concentraciones reales a una representación
    # binaria (presencia/ausencia) utilizando un umbral mínimo para
    # evitar problemas numéricos
    matriz_binaria = np.where(matriz_real > umbral_minimo, 1, 0)

    # Almacenamiento de las matrices para análisis posterior
    matrices_reales.append(matriz_real)
    matrices_binarias.append(matriz_binaria)

    # Mostrar progreso cada 100 simulaciones
    if (i + 1) % 100 == 0:

```

```

        print(f" Completadas {i + 1}/{M} simulaciones
        ({(i + 1)/M*100:.1f}%)")

    except Exception as e:
        print(f" Error en simulación {i+1}: {str(e)}")
        continue

    print(f" Simulaciones completadas. Se obtuvieron datos de
    {len(matrices_binarias)} simulaciones exitosas.")

### Módulo de Análisis de Frecuencias y Transiciones

# Este módulo implementa el análisis de frecuencias de los estados del
# sistema y las transiciones entre ellos, permitiendo identificar
# patrones emergentes y comportamientos colectivos en la dinámica del
# sistema.

print("\n Iniciando análisis de frecuencias y transiciones...")

# Conversión de matrices binarias a cadenas de texto para facilitar el
# conteo y la identificación de patrones únicos. Cada fila de cada
# matriz binaria representa un estado del sistema en un momento
# específico.
L = [] # Lista única con todos los estados de todas las simulaciones

# Función para convertir un vector binario a una cadena de texto que
# lo represente únicamente
def vector_to_string(vector):
    return ''.join(map(str, vector.astype(int)))

# Recopilación de todos los estados de todas las simulaciones en una
# única lista L
print(" Recopilando todos los estados de todas las simulaciones...")
for matriz in matrices_binarias:
    for estado in matriz:
        # Verificación adicional para garantizar que no se incluyan
        # estados todo cero (aunque esto no debería ocurrir debido a la
        # corrección anterior)
        estado_str = vector_to_string(estado)

```

```

        if '1' in estado_str: # Asegura que al menos una especie esté
            # presente
            L.append(estado_str)
        else:
            print(" Se detectó un estado todo cero.")

print(f" Se recopilaron {len(L)} estados en total.")

# Cálculo de frecuencias de cada estado único en la lista L
print(" Calculando frecuencias de cada estado único...")
frecuencias = Counter(L)
print(f" Se identificaron {len(frecuencias)} estados únicos.")

# Creación de la lista Lf con pares (estado, frecuencia)
Lf = [(estado, freq) for estado, freq in frecuencias.items()]

# Ordenamiento de la lista Lf por frecuencia (de mayor a menor)
Lf.sort(key=lambda x: x[1], reverse=True)

# Función para determinar el valor óptimo de n
def encontrar_n_optimo(Lf, umbral_prob=0.05):
    """
    Encuentra el valor óptimo de n para que la probabilidad de transición
    de 'otros a otros' sea menor que el umbral especificado.

    Args:
        Lf: Lista de pares (estado, frecuencia) ordenada por frecuencia
        umbral_prob: Umbral de probabilidad para la transición
        'otros a otros'

    Returns:
        int: Valor óptimo de n
    """
    total_estados = sum(freq for _, freq in Lf)

    # Probar diferentes valores de n
    for n in range(1, min(15, len(Lf))):
        # Calcular la probabilidad de 'otros a otros'
        estados_top_n = set(estado for estado, _ in Lf[:n])
        transiciones_otros_a_otros = 0

```

```

total_transiciones_desde_otros = 0

# Contar transiciones de 'otros a otros'
for i in range(len(L) - 1):
    if L[i] not in estados_top_n: # Es un estado 'otros'
        total_transiciones_desde_otros += 1
    if L[i+1] not in estados_top_n:
        transiciones_otros_a_otros += 1

# Calcular probabilidad
if total_transiciones_desde_otros > 0:
    prob_otros_a_otros = transiciones_otros_a_otros /
    total_transiciones_desde_otros
    if prob_otros_a_otros < umbral_prob:
        return n

return min(10, len(Lf))

# Determinar el valor óptimo de n
n = encontrar_n_optimo(Lf)
print(f"\n Valor óptimo de n determinado: {n}")

# Selección de los n estados más frecuentes
top_n = Lf[:n]

print(f"\n Los {n} estados más frecuentes son:")
for i, (estado, freq) in enumerate(top_n):
    vector = np.array([int(bit) for bit in estado])
    # Identificar qué especies están activas en este estado
    especies_activas = [species[i] for i, bit in enumerate(vector)
                        if bit == 1]

    print(f" Lf{i+1}: Estado '{estado}' (frecuencia: {freq},
    {freq/len(L)*100:.2f}%)")
    print(f"    Especies activas: {', '.join(especies_activas)}")

# Creación de una categoría "otros" para todos los estados restantes
otros_estados = Lf[n:]
total_otros = sum(freq for _, freq in otros_estados)

```

```

print(f"\n  Otros: {len(otros_estados)} estados diferentes
(frecuencia total: {total_otros}, {total_otros/len(L)*100:.2f}%)")

# Creación de un diccionario para mapear cada estado a su categoría
(Lf1, Lf2, ..., Lfn u "otros")
categorias = {}
for i, (estado, _) in enumerate(top_n):
    categorias[estado] = f"Lf{i+1}"

# Conteo de transiciones entre categorías
print("\n Contando transiciones entre categorías...")

# Inicialización de la matriz de transiciones
categorias_nombres = [f"Lf{i+1}" for i in range(n)] + ["otros"]
matriz_transiciones = np.zeros((n+1, n+1))

# Conteo de transiciones en la lista L
for i in range(len(L) - 1):
    estado_actual = L[i]
    estado_siguiente = L[i+1]

    # Determinar categoría del estado actual
    if estado_actual in categorias:
        cat_actual_idx = int(categorias[estado_actual][2:]) - 1
    else:
        cat_actual_idx = n # "otros"

    # Determinar categoría del estado siguiente
    if estado_siguiente in categorias:
        cat_siguiente_idx = int(categorias[estado_siguiente][2:]) - 1
    else:
        cat_siguiente_idx = n # "otros"

    # Incrementar el contador de transiciones
    matriz_transiciones[cat_actual_idx, cat_siguiente_idx] += 1

# Cálculo del número total de transiciones
total_transiciones = np.sum(matriz_transiciones)

# Normalización de la matriz de transiciones por filas

```

```

suma_filas = matriz_transiciones.sum(axis=1, keepdims=True)
matriz_transiciones_norm = np.zeros_like(matriz_transiciones)
for i in range(n+1):
    if suma_filas[i] > 0:
        matriz_transiciones_norm[i] =
            matriz_transiciones[i] / suma_filas[i]

# Visualización de la matriz de transiciones
print("\n Matriz de transiciones (conteo):")
print("    " + ".join(f"{cat:>8}" for cat in categorias_nombres))
for i, cat in enumerate(categorias_nombres):
    print(f"{cat:>5}", end=" ")
    for j in range(n+1):
        print(f"{matriz_transiciones[i, j]:8.0f}", end=" ")
    print()

print("\n Matriz de transiciones (probabilidades):")
print("    " + ".join(f"{cat:>8}" for cat in categorias_nombres))
for i, cat in enumerate(categorias_nombres):
    print(f"{cat:>5}", end=" ")
    for j in range(n+1):
        print(f"{matriz_transiciones_norm[i, j]:8.3f}", end=" ")
    print()

# Cálculo de la matriz de transición de Markov
# (normalizada por el total de transiciones)
matriz_markov = matriz_transiciones / total_transiciones

print("\n Matriz de transición de Markov (normalizada por el total de
transiciones):")
print("    " + ".join(f"{cat:>8}" for cat in categorias_nombres))
for i, cat in enumerate(categorias_nombres):
    print(f"{cat:>5}", end=" ")
    for j in range(n+1):
        print(f"{matriz_markov[i, j]:8.6f}", end=" ")
    print()

# Visualización gráfica de la matriz de transiciones como
# un mapa de calor
plt.figure(figsize=(10, 8))

```

```

plt.imshow(matriz_transiciones_norm, cmap='viridis',
           interpolation='nearest')
plt.colorbar(label='Probabilidad de transición')
plt.xticks(range(n+1), categorias_nombres)
plt.yticks(range(n+1), categorias_nombres)
plt.xlabel('Estado siguiente')
plt.ylabel('Estado actual')
plt.title('Matriz de transiciones entre estados')

# Añadir etiquetas numéricas a cada celda
for i in range(n+1):
    for j in range(n+1):
        plt.text(j, i, f"{matriz_transiciones_norm[i, j]:.3f}",
                 ha="center", va="center", color="white"
                 if matriz_transiciones_norm[i, j] > 0.5 else "black")

plt.tight_layout()
plt.show()

# Análisis de estabilidad de estados
print("\n Análisis de estabilidad de estados:")
for i, cat in enumerate(categorias_nombres):
    prob_permanencia = matriz_transiciones_norm[i, i]
    if i < len(matriz_transiciones_norm) else 0
    print(f" {cat}: Probabilidad de permanencia =
{prob_permanencia:.3f}")

# Visualización de la distribución de frecuencias de los estados
plt.figure(figsize=(12, 6))
frecuencias_categorias = [freq for _, freq in top_n] + [total_otros]
plt.bar(categorias_nombres, frecuencias_categorias, color=['blue',
'green', 'red', 'purple', 'orange', 'cyan', 'magenta', 'yellow', 'brown',
'pink', 'gray'])
plt.xlabel('Categoría de estado')
plt.ylabel('Frecuencia')
plt.title('Distribución de frecuencias de estados')
plt.grid(axis='y', alpha=0.3)

# Añadir etiquetas de porcentaje sobre cada barra
for i, freq in enumerate(frecuencias_categorias):

```

```

plt.text(i, freq + 0.5, f"{{freq/len(L)*100:.2f}}%", ha='center',
         va='bottom')

plt.tight_layout()
plt.show()

### Módulo de Análisis de Frecuencia de Especies en Estados Lfi

# Este módulo analiza la frecuencia de aparición de cada especie en los
# estados Lfi y compara esta distribución con la distribución en
# las condiciones iniciales.

print("\n Analizando frecuencia de especies en estados Lfi...")

# Inicialización de matrices para almacenar la frecuencia de especies
frecuencia_especies_lfi = np.zeros(len(species), n)
frecuencia_especies_inicial = np.zeros(len(species))

# Conteo de especies en estados Lfi
for i, (estado, _) in enumerate(top_n):
    vector = np.array([int(bit) for bit in estado])
    frecuencia_especies_lfi[:, i] = vector

# Conteo de especies en condiciones iniciales
for cond_inicial in condiciones_iniciales:
    frecuencia_especies_inicial += cond_inicial

# Normalización de frecuencias
frecuencia_especies_inicial = frecuencia_especies_inicial
/ len(condiciones_iniciales)

# Visualización de la frecuencia de especies en estados Lfi
plt.figure(figsize=(14, 10))

# Crear una matriz para la visualización
matriz_visualizacion = np.zeros((len(species), n))
for i in range(len(species)):
    for j in range(n):
        matriz_visualizacion[i, j] = frecuencia_especies_lfi[i, j]

```

```

# Ordenar especies por su frecuencia total en los estados Lfi
frecuencia_total = np.sum(matriz_visualizacion, axis=1)
indices_ordenados = np.argsort(-frecuencia_total)
matriz_visualizacion = matriz_visualizacion[indices_ordenados]
especies_ordenadas = [species[i] for i in indices_ordenados]
frecuencia_especies_inicial = frecuencia_especies_inicial[indices_ordenados]

# Visualización como mapa de calor
plt.subplot(1, 2, 1)
plt.imshow(matriz_visualizacion, cmap='viridis', aspect='auto')
plt.colorbar(label='Presencia (1) / Ausencia (0)')
plt.yticks(range(len(especies_ordenadas)), especies_ordenadas)
plt.xticks(range(n), [f"Lf{i+1}" for i in range(n)])
plt.title('Presencia de especies en estados Lfi')
plt.xlabel('Estados Lfi')
plt.ylabel('Especies')

plt.tight_layout()
plt.show()

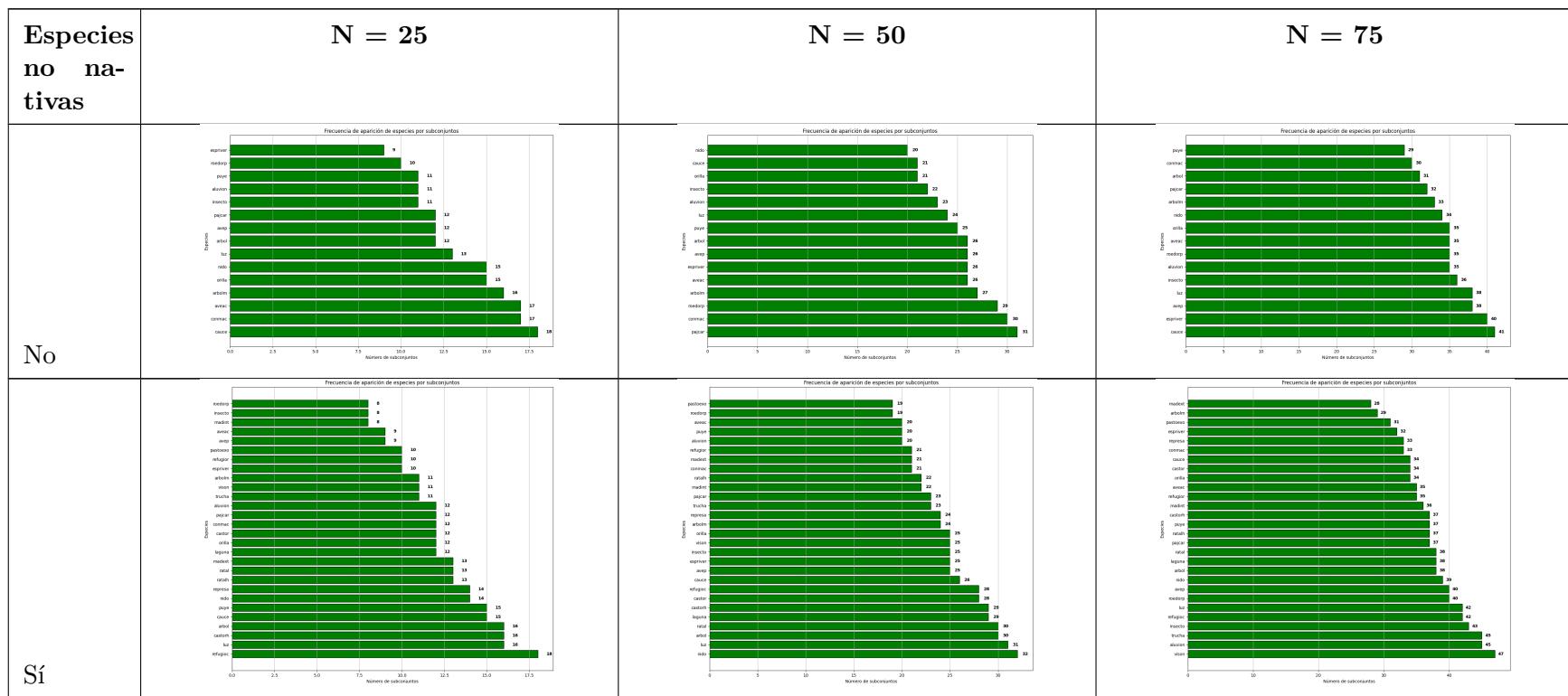
print("\n Análisis de frecuencia de especies completado.")
print("Se ha comparado la distribución de especies en los estados Lfi
con la distribución en las condiciones iniciales.")

```

### A.3. Gráficas complementarias.

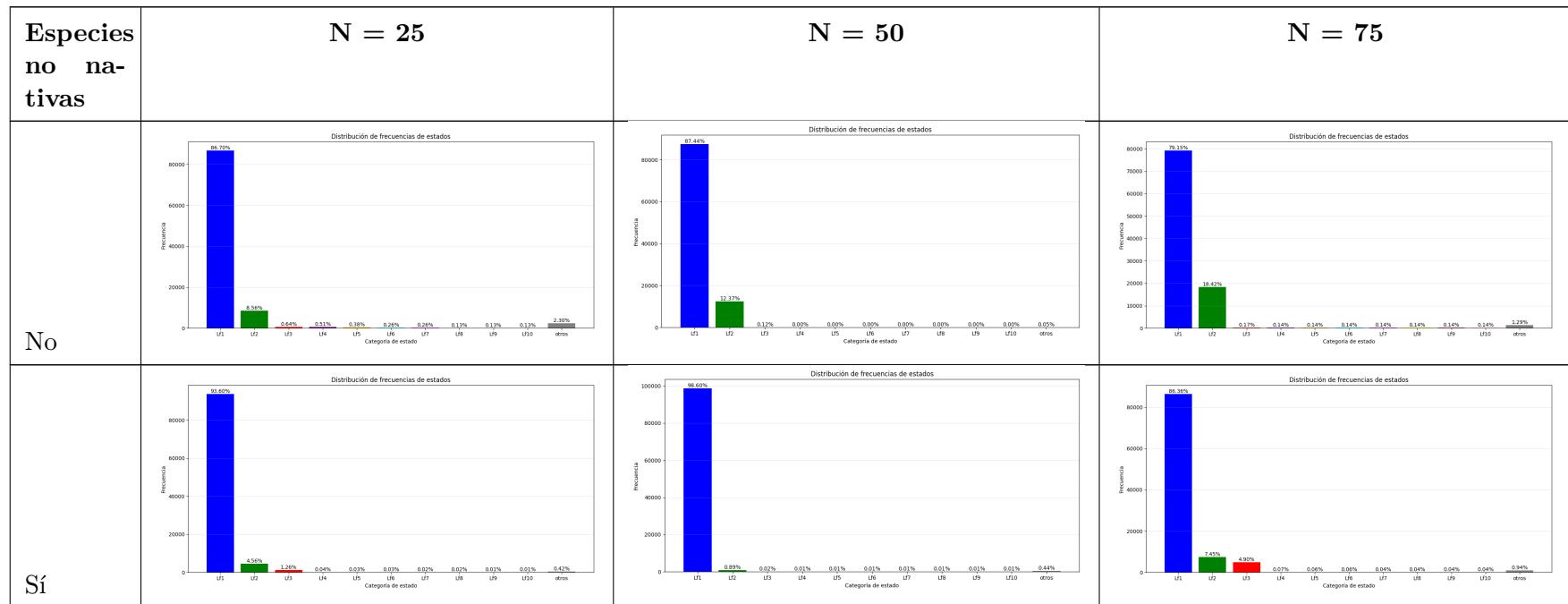
### A.3.1. Exploración estructural

Cuadro A.1: Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas (Exploración estructural). Cálculos obtenidos en *Python*<sup>TM</sup> (ver Apéndice A.2).



En el cuadro A.1 se incluyen las gráficas correspondientes a la distribución de especies en los subconjuntos generados. Este análisis permite visualizar las frecuencias relativas de las especies en los subconjuntos considerados para evaluar la sostenibilidad dentro del modelo de comunidad ecológica.

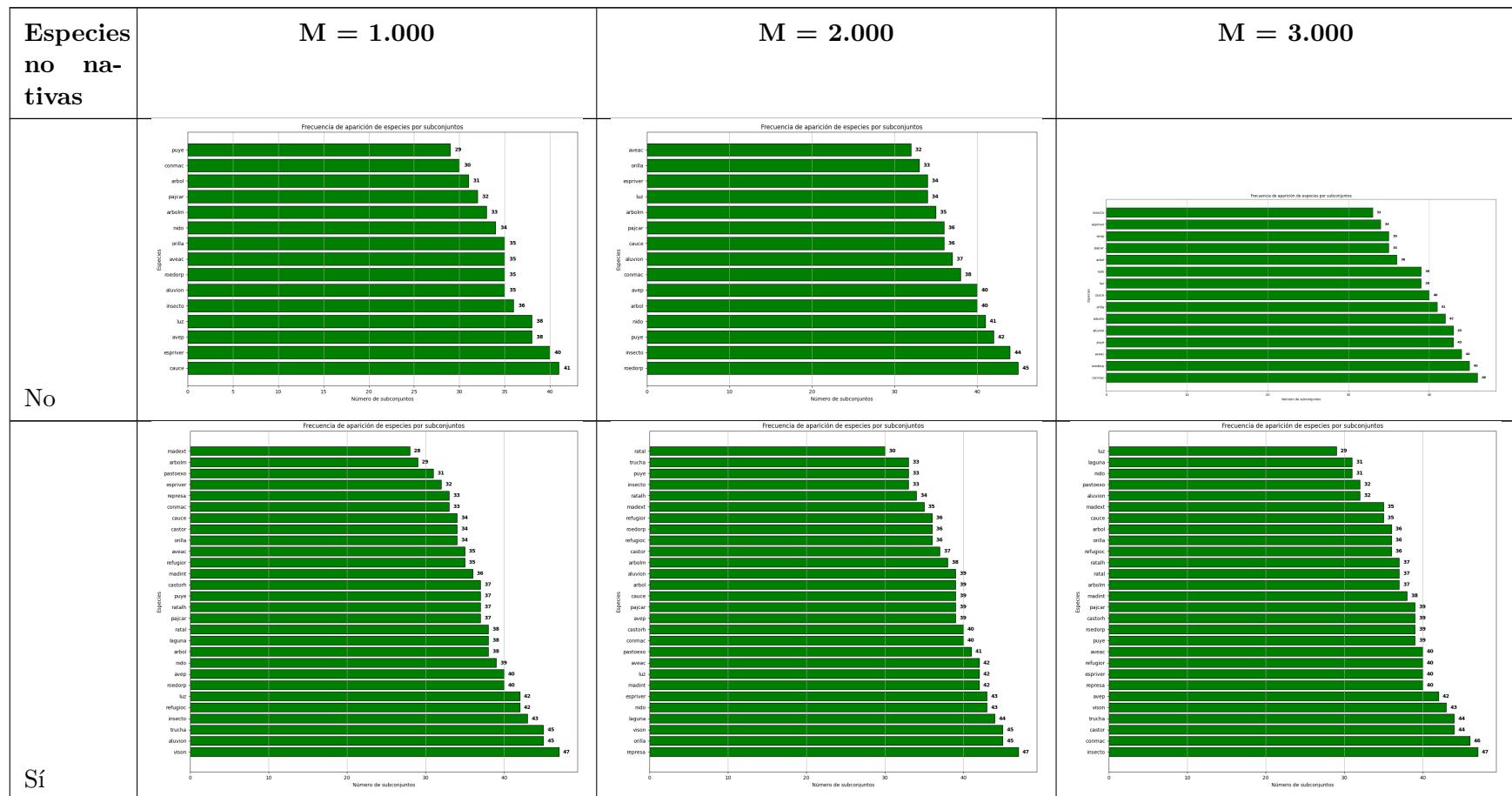
Cuadro A.2: Comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).



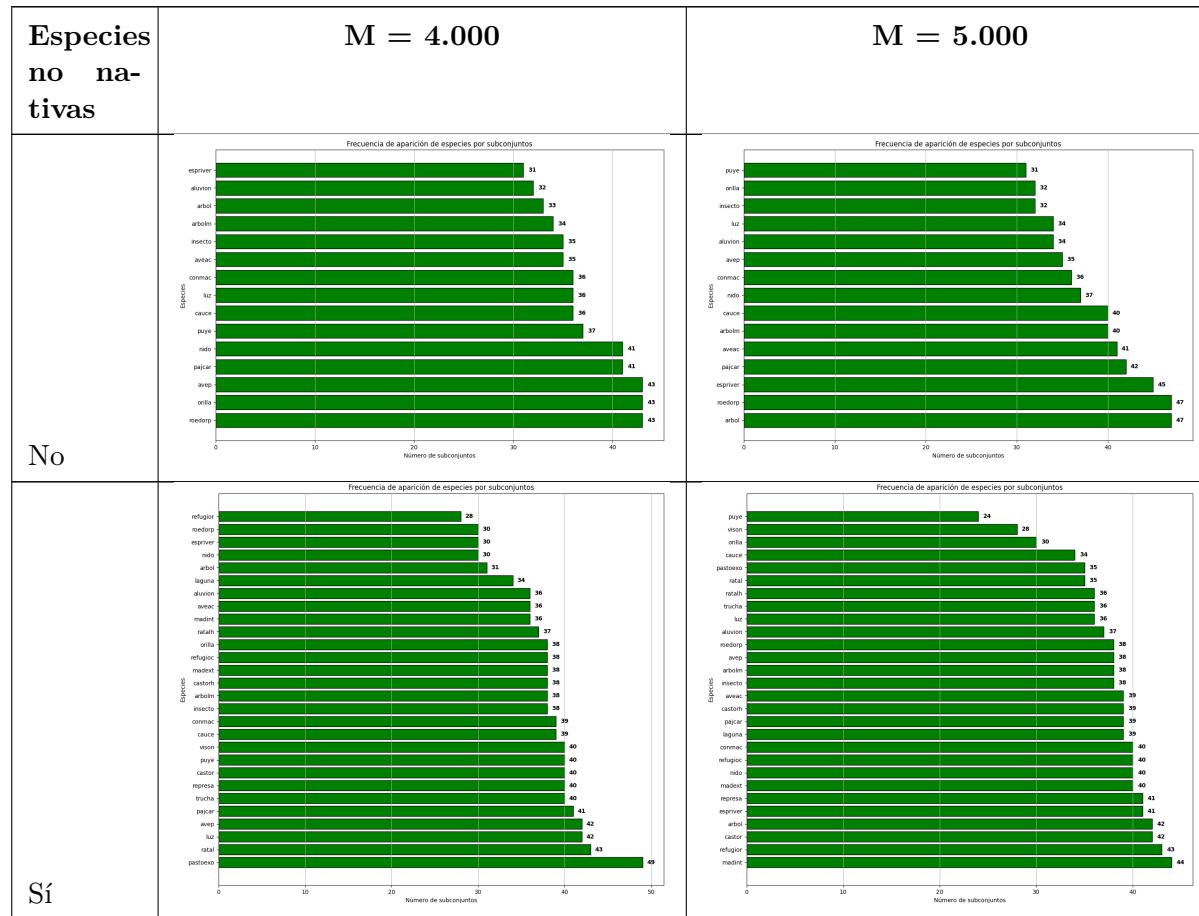
Para facilitar la comprensión del análisis realizado, a partir del resumen de resultados presentados en el Cuadro 4.2, como apoyo visual se presenta cada gráfica obtenida para las condiciones evaluadas en la exploración estructural en el Cuadro A.2.

### A.3.2. Exploración Dinámica

Cuadro A.3: Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas. Cálculos obtenidos en *Python™* (ver Apéndice A.2).

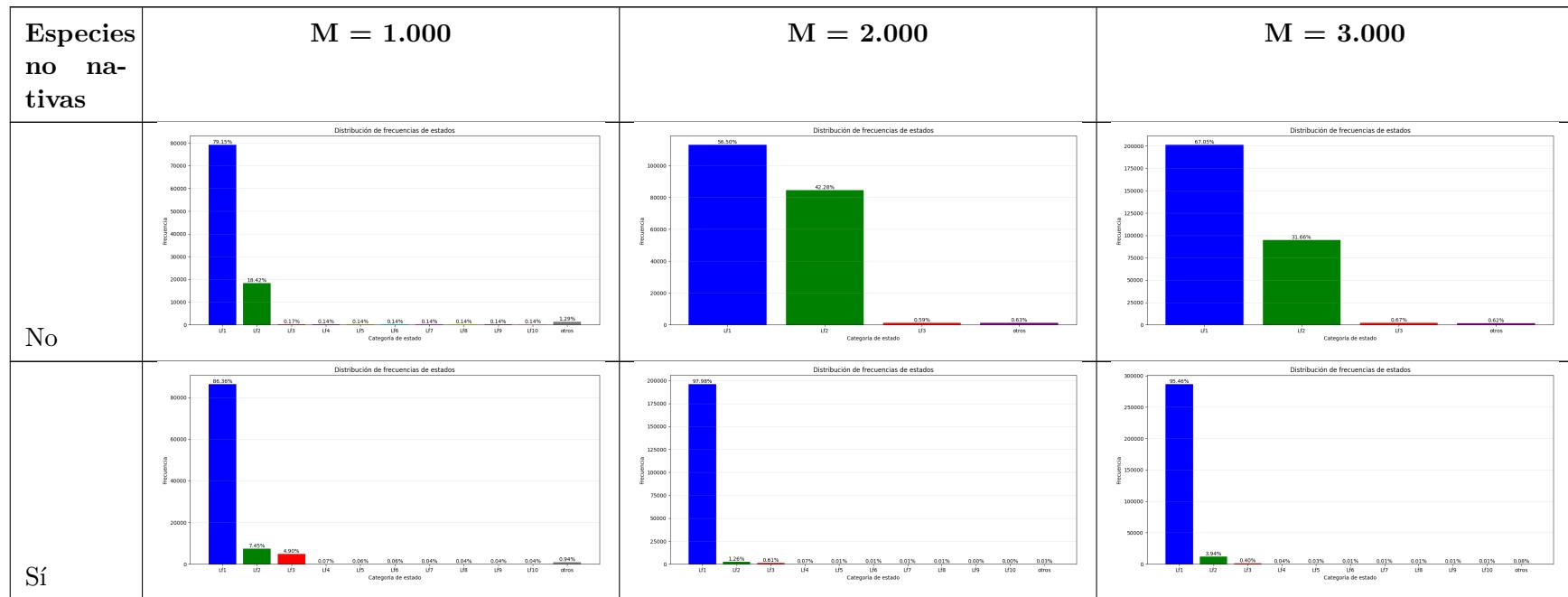


Cuadro A.4: Continuación de Frecuencia de especies por subconjuntos considerados para cálculo de sostenibilidad de comunidades ecológicas. Cálculos obtenidos en *Python™* (ver Apéndice A.2).

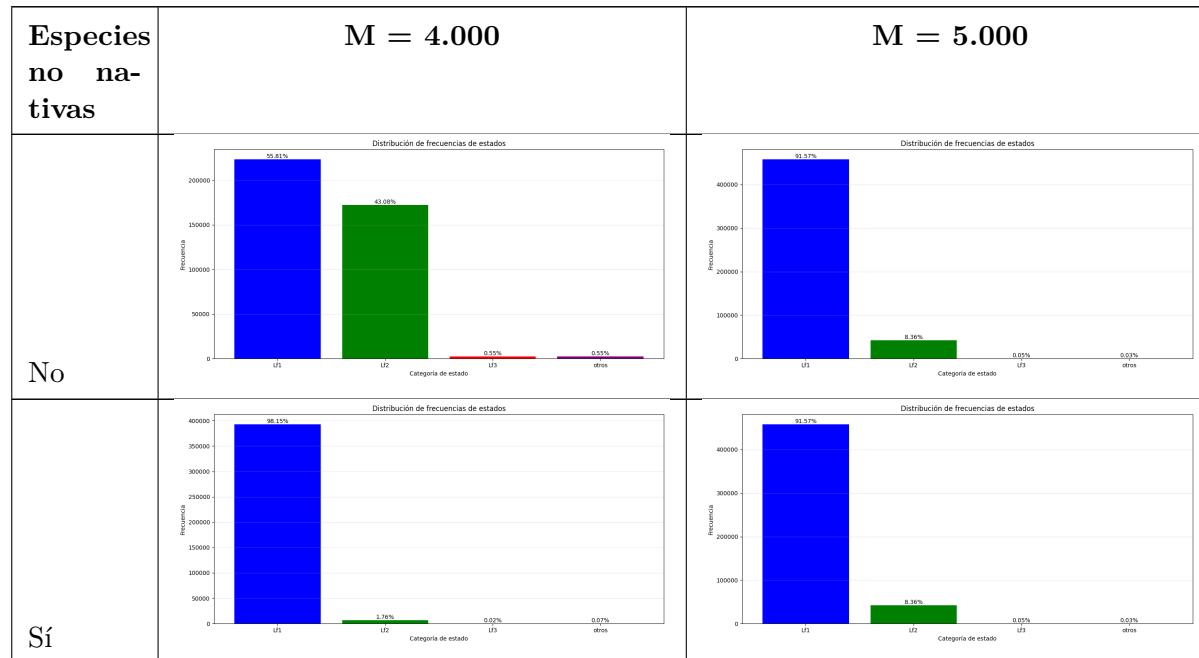


En el cuadro A.3 y A.4 se incluyen las gráficas correspondientes a la distribución de especies en los subconjuntos generados. Este análisis permite visualizar las frecuencias relativas de las especies en los subconjuntos considerados para evaluar la sostenibilidad dentro del modelo de comunidad ecológica.

Cuadro A.5: Comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python™* (ver Apéndice A.2).



Cuadro A.6: Continuación de comparativa de la sostenibilidad de las abstracciones finales más frecuentes sin perturbación (No) y con perturbación (Sí). Cálculos obtenidos en *Python<sup>TM</sup>* (ver Apéndice A.2).



Para facilitar la comprensión del análisis realizado, a partir del resumen de resultados presentados en el Cuadro 4.4, como apoyo visual se presenta cada gráfica obtenida para las condiciones evaluadas en la exploración estructural en los Cuadros A.5 y A.6.



## Apéndice B

# Apéndice

### B.1. Sobre la librería pyCOT.

La librería PyCOT incorpora en su ontología la librería NetworkX (Aric Hagberg, 2024) que es muy utilizada para la creación, manipulación y estudio de la estructura, dinámica y funciones de redes complejas.

Finalmente, es importante destacar que en el desarrollo de PyCOT se contempla la potencial incorporación de las siguientes librerías complementarias a NetworkX para la obtención de resultados y simulaciones:

- NumPy: Permite la manipulación eficiente de matrices multidimensionales y su utilización para cálculos numéricos (Oliphant, 2024).
- Pandas: Permite el manejo y análisis tablas ofreciendo la estructura de datos como DataFrames (McKinney, 2024).
- bitarray: Utilizada para realizar arreglos de datos en formato de bits de manera eficiente, se utiliza para manipulación y almacenamiento de datos binarios (Schnell, 2024).
- SciPy: Amplía las funcionalidades de la librería NumPy incorporando funciones avanzadas de álgebra lineal, optimización, integración y estadística (Virtanen, 2024).
- libroadrunner: Tiene la capacidad de realizar simulaciones de modelos biológicos en formato SBML, muy utilizado en biología computacional (Kiri Choi, 2024).
- pyvis: Permite visualizar interactivamente redes, generando gráficos en formato JavaScript para su visualización en formato web, principalmente HTML (Rotolo, 2024).
- matplotlib: Permite generar gráficos estáticos, animados e interactivos, ampliamente para visualización de datos (Hunter, 2024).

- joblib: Permite almacenar y ejecutar eficientemente tareas paralelas y serialización de objetos, como base de datos de una red (Grisel, 2024).
- PuLP: Permite modelar y solucionar problemas de programación lineal definiendo y resolviendo problemas de optimización (Mitchell, 2024).
- Seaborn: Permite visualizar datos estadísticos por medio de gráficas llamativas e integrables fácilmente con la librería Matplotlib (Waskom, 2024).

La incorporación de estas librerías estuvo condicionada al rendimiento del algoritmo implementado en PyCOT, el cual debía garantizar la ejecución eficiente de los cálculos y simulaciones numéricas requeridas.