

Procesos difusivos: de moléculas a animales

por
Denis Boyer

Este es un capítulo separado que integra el libro

Fronteras de la Física en el Siglo XXI

Octavio Miramontes y Karen Volke (Editores)

CopIt-arXives, 2013

México, D.F.

ISBN: 978-1-938128-03-5

©CopIt-arXives

<http://scifunam.fisica.unam.mx/mir/copit/TS0011ES/TS0011ES.html>

Índice general

Denis Boyer	Procesos difusivos: de moléculas a animales	1
1.	Introducción	1
2.	Difusión simple	2
	Caminatas aleatorias y Teorema Límite Central	2
	Propiedades de primer paso	5
	Número de sitios distintos visitados y procesos de aniquilación	7
3.	Movilidad de organismos complejos: perspectivas presentes y futuras	9
	Más allá de la difusión simple	9
	Biología y modelos basados en agentes	15
4.	Conclusiones	19
5.	Referencias	20

Procesos difusivos: de moléculas a animales

Denis Boyer, Instituto de Física, UNAM, México

Los devenires son geografía, son orientaciones, direcciones, entradas y salidas. Son actos que sólo pueden estar contenidos en una vida y expresados en un estilo. A medida que alguien deviene, aquello en lo que deviene cambia tanto como él.
Gilles Deleuze

1. Introducción

La difusión es tal vez el mecanismo más básico de transporte en la materia y se encuentra al origen de muchos procesos, tanto de equilibrio como fuera de equilibrio, en termodinámica y física estadística. Las caminatas aleatorias ofrecen un marco teórico útil para entender la difusión a un nivel microscópico. Estas caminatas se han utilizado para describir el movimiento browniano de una partícula sujeta a colisiones con las moléculas de un fluido que la rodea, así como para entender la cinética de reacciones químicas, las propiedades estadísticas de avalanchas en medios granulares o las conformaciones de polímeros. En áreas distintas a la Física, las caminatas aleatorias aparecen de manera ubicua en la descripción de problemas donde el ruido y la incertidumbre juegan un papel fundamental, por ejemplo: cómo una proteína encuentra un sitio funcional en la célula, cómo los animales usan el espacio y los recursos de un ecosistema, cómo los precios evolucionan en mercados bursátiles o en problemas de adopción de opiniones por agentes sociales. A pesar de la simplicidad de su formulación probabilística original, los procesos difusivos siguen siendo un tema de investigación muy activo en la actualidad. En este capítulo presentaremos algunas técnicas y resultados básicos sobre la difusión, así como sus aplicaciones recientes en temas interdisciplinarios. Nos enfocaremos en el estudio de los patrones de movilidad individual en animales o humanos y discutiremos perspectivas en esa área. Muchos de nuestros problemas de interés involucran una partícula pero mencionaremos fenómenos colectivos que pueden emerger en sistemas compuestos de muchos elementos.

2. Difusión simple

Caminatas aleatorias y Teorema Límite Central

Iniciamos considerando una partícula que puede ocupar posiciones discretas $x(t)$ equidistantes a lo largo de una línea, moviéndose a cada paso en tiempo discreto ($t \rightarrow t + 1$) al sitio más cercano ubicado a su derecha o a su izquierda con igual probabilidad $1/2$, ver figura 1a. La probabilidad $P_t(n)$ de que el caminante esté en el sitio n ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) al instante t obedece a una ecuación recursiva de dos variables:

$$P_t(n) = \frac{1}{2}P_{t-1}(n-1) + \frac{1}{2}P_{t-1}(n+1). \quad (1)$$

Esta expresión suma la probabilidad de que en el instante $t-1$, la partícula esté en $n-1$ y dé un salto hacia adelante y la probabilidad de que esté en $n+1$ y dé un salto hacia atrás. Si el caminante se encuentra en la posición $n=0$ al tiempo inicial $t=0$, después de t pasos la probabilidad de que haya dado n_d pasos a la derecha y $t-n_d$ pasos a la izquierda en un orden cualquiera está dada por la fórmula del binomio:

$$P_t(n) = \binom{t}{n_d} \frac{1}{2^t} \quad (2)$$

En esta fórmula se tomó en cuenta el hecho de que cualquier secuencia dada de t pasos tiene probabilidad $(1/2)^t$ de ocurrir y que la posición n vale $2n_d - t$ (si los enteros n y t tienen la misma paridad). Se puede comprobar que (2) es solución de (1). A tiempos grandes ($t \gg 1$) usamos la aproximación de Stirling y obtenemos la bien conocida distribución gaussiana [1]:

$$P_t(n) \simeq \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-n^2/4Dt}, \quad (3)$$

donde $D (= 1/2$ en este caso) es la constante de difusión. Se puede re-obtener este resultado a partir de un modelo un poco diferente, en el cual el tiempo es continuo y la probabilidad de saltar a la derecha en el intervalo de tiempo $[t, t + dt]$ es αdt (lo mismo sucede a la izquierda) [2]. Eligiendo la tasa $\alpha = 1$, podemos escribir una ecuación maestra para la evolución de $P_t(n)$:

$$\frac{\partial P_t(n)}{\partial t} = P_t(n+1) - 2P_t(n) + P_t(n-1). \quad (4)$$

El término $-2P_t(n)$ proviene del hecho de que el caminante deje su posición actual con probabilidad $2dt$ en $[t, t + dt]$. Para resolver (4) se introduce la transformada de Fourier discreta:

$$P(k, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P_t(n) e^{ikn}. \quad (5)$$

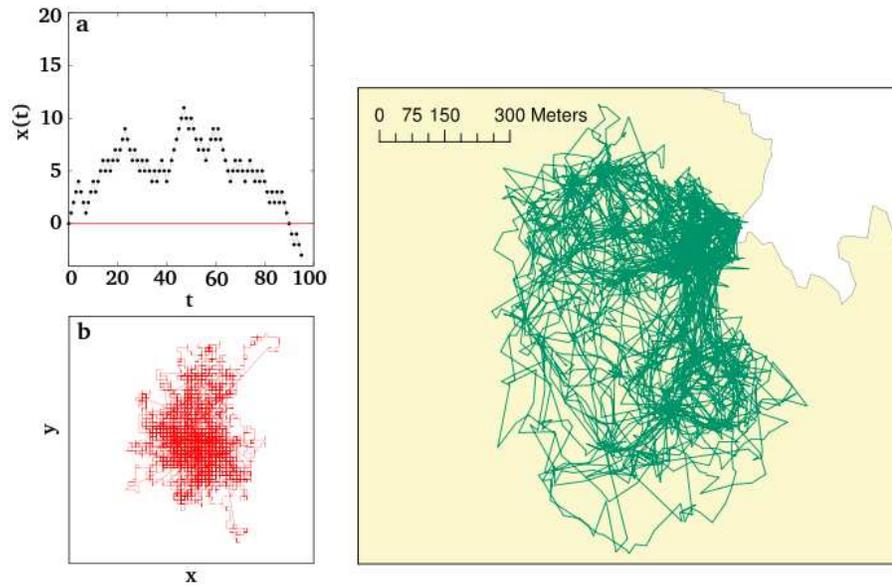


Figura 1: Izquierda: a) Posición en función del tiempo de una caminata aleatoria discreta en una dimensión espacial, que da pasos con igual probabilidad a la derecha o a la izquierda. En este ejemplo, el caminante regresa por primera vez a su punto de partida a $t = 90$. b) Caminata aleatoria en dos dimensiones espaciales con saltos intermitentes a lugares visitados anteriormente, ver sección 3. Derecha: Trayectoria recorrida durante un mes por un primate (mono capuchino) obtenida con un GPS en la isla de Barro Colorado, Panamá [cortesía de Meg Crofoot].

De (4), obtenemos

$$\frac{\partial P(k, t)}{\partial t} = [e^{ik} + e^{-ik} - 2]P(k, t). \quad (6)$$

Dado que $P_{t=0}(n) = \delta_{n,0}$ entonces $P(k, t = 0) = 1$ y (6) se puede integrar con esta condición inicial:

$$P(k, t) = e^{2(\cos k - 1)t}. \quad (7)$$

La solución $P_t(n)$ se obtiene usando la identidad $e^{z \cos k} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ikn} I_n(z)$ donde I_n son las funciones de Bessel modificadas. Comparando con (7):

$$P_t(n) = I_n(2t) e^{-2t}, \quad (8)$$

la cual converge a la forma asintótica (3) cuando $t \gg 1$, con $D = 1$. En un espacio continuo se sustituye n por una posición real x , reconociendo que el lado derecho de (4) tiene forma de una segunda derivada espacial. Esta ecuación se convierte una ecuación diferencial parcial:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (9)$$

que es la bien conocida ecuación de la difusión. $P(x, t)$ es una densidad de probabilidad: $P(x, t)dx$ es la probabilidad de que la partícula se encuentre entre x y $x + dx$ al instante t . Por normalización, $\int_{-\infty}^{\infty} P(x, t)dx = 1$ para todo t . Si la partícula se encuentra al origen $x = 0$ en $t = 0$, entonces $P(x, t = 0) = \delta(x)$ ¹ y la forma gaussiana (3) es solución exacta de (9) para $t > 0$, sustituyendo $n \rightarrow x$. Una consecuencia importante de este resultado es que por paridad, la posición media de la partícula $\langle x \rangle = \int xP(x, t)dx$ es cero: no hay *en promedio* transporte en ninguna dirección preferente. Sin embargo, el segundo momento de la distribución $P(x, t)$, también llamado desplazamiento cuadrático medio $\langle x^2 \rangle$ se relaciona con el ancho de la distribución gaussiana y no es cero. En una trayectoria dada, los números de pasos a la derecha y a la izquierda no son iguales en general y la diferencia tiende a crecer con el tiempo debido a fluctuaciones estadísticas. En otras palabras, $\langle x^2 \rangle$ crece con el tiempo:

$$\langle x^2 \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 P(x, t)dx = 2Dt. \quad (10)$$

Esta es la ley de Smoluchowski-Einstein. La cantidad $l = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ representa la distancia típica entre el caminante y su punto de origen después de t pasos. Esta distancia crece como $t^{1/2}$, indefinidamente, aunque mucho más lentamente que una partícula en movimiento uniforme ($l \sim t$).

Además de describir la densidad de probabilidad del desplazamiento x para los modelos de caminatas aleatorias descritos arriba, la distribución gaussiana se aplica más generalmente a la suma de variables aleatorias reales independientes (es decir, sin correlaciones entre sí) cuando la suma contiene un gran número de términos. Esta universalidad se explica por el *Teorema Límite Central* (ver por ejemplo [3]). Consideremos una suma (posición) x que contiene N términos (pasos),

$$x = \sum_{n=1}^N u_n, \quad (11)$$

donde los u_n no necesariamente toman los valores ± 1 sino que están generados aleatoriamente a partir de una distribución de probabilidad $p(u)$ arbitraria². La relación (1) toma la forma general:

$$P(x, N) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x', N-1)p(x-x')dx'. \quad (12)$$

Para llegar al valor x en N pasos, hay que llegar a algún x' en $N-1$ pasos y luego añadir $x-x'$, lo cual ocurre con probabilidad $p(x-x')dx'$. La integral (12) es una convolución entre P y p . Definiendo la transformada de Fourier continua,

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx, \quad (13)$$

¹ $\delta(x)$ es la función delta de Dirac y δ_{ij} la función de Krönecker.

²La probabilidad que u tome un valor en $[U, U + dU]$ es $p(U)dU$.

obtenemos de (12) la relación $P(k, N) = P(k, N - 1)p(k)$. Esta relación se resuelve fácilmente por iteración³ y se obtiene $P(k, N) = [p(k)]^N$. Notamos que $p(k = 0) = \int p(u)du = 1$ por normalización y que $|p(k)| < 1$ si $k \neq 0$: entonces $P(k, N)$ es exponencialmente chico cuando $N \gg 1$, excepto para k cerca de 0. Esto explica la universalidad de las funciones gaussianas. Desarrollando en serie de Taylor con k pequeño obtenemos $e^{iku} \simeq 1 - iku - \frac{1}{2}k^2u^2$ y deducimos que $p(k) \simeq 1 - ik\langle u \rangle - \frac{1}{2}k^2\langle u^2 \rangle$. Para simplificar consideramos $\langle u \rangle = 0$ y suponiendo $\langle u^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} u^2 p(u)du$ finito ($< \infty$), la distribución $P(x, N)$ que buscamos se obtiene por transformada inversa de Fourier de la función $[p(k)]^N$:

$$\begin{aligned} P(x, N) &\simeq \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 - \frac{1}{2N} N k^2 \langle u^2 \rangle \right]^N e^{ikx} dk \\ &\simeq \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{N\langle u^2 \rangle}{2} k^2 + ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi N \langle u^2 \rangle}} e^{-\frac{x^2}{2N \langle u^2 \rangle}}. \end{aligned} \quad (14)$$

En resumen, la suma de N variables aleatorias de varianza finita tiende a una distribución gaussiana, sin importar la forma analítica de la distribución $p(u)$ de estas variables. Los resultados anteriores se generalizan fácilmente en espacios d -dimensionales, en donde se sustituye x por el vector posición \mathbf{r} y se obtiene:

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-\frac{\mathbf{r}^2}{4Dt}}, \quad \langle \mathbf{r}^2 \rangle = 2dDt. \quad (15)$$

La figura 1b muestra un ejemplo de caminata en dos dimensiones.

Propiedades de primer paso

Consideramos un caminante con posición \mathbf{r} en una red discreta infinita dentro de un espacio de dimensión d (\mathbf{r} es por lo tanto un vector con d componentes enteros relativos). La función $P(\mathbf{r}, t)$ describe la probabilidad de *estar* en \mathbf{r} al instante t . Sin embargo, podemos plantear otra clase de preguntas. Si $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ a $t = 0$, ¿Cuál es la probabilidad de que el caminante llegue *por primera vez* a un sitio \mathbf{r}_0 dado al instante t ? ¿Cuál es la probabilidad de que el caminante vuelva a su punto de origen? ¿Cuántos sitios *distintos* son visitados en promedio en t pasos?

Las propiedades de primer paso son importantes en problemas de búsqueda aleatorias, en donde el caminante puede estar representando un animal o una molécula y \mathbf{r}_0 un sitio de alimento o un sitio de reacción [4]. Las respuestas a las preguntas anteriores no son triviales y dependen de la dimensión espacial d . En un espacio no acotado, si $d \leq 2$, las caminatas aleatorias son *recurrentes*, es decir visitan muchas veces los mismos sitios,

³Con $N = 0$, la suma x vale 0 con probabilidad 1: $P(x, 0) = \delta(x)$ o $P(k, 0) = 1$.

mientras que si $d > 3$ las caminatas son *transientes*: los sitios visitados son pocas veces revisitados y existe una probabilidad > 0 de nunca regresar a un sitio que ya ha sido visitado. Heurísticamente, a partir de la ley de la difusión (10), la trayectoria de un caminante hasta un tiempo t se encuentra en un dominio de radio $l(t) \sim t^{1/2}$. Hay t visitas en t pasos (no necesariamente a sitios distintos) por lo tanto el número de visitas a un sitio dado dentro del dominio es $n_v(t) \sim t/l(t)^d \sim t^{1-d/2}$. Si $d < 2$, $n_v(t)$ crece con t y casi seguramente todos los sitios del dominio son visitados muchas veces; si $d > 2$, $n_v(t) \rightarrow 0$: muchos sitios en el dominio nunca serán visitados.

Estas propiedades de recurrencia se pueden derivar de manera rigurosa. Considerando un caminante que sigue el proceso de difusión en tiempo continuo descrito en (4), definimos la probabilidad $P_1(\mathbf{r}_0, t)dt$ de alcanzar por primera vez una posición \mathbf{r}_0 dada entre t y $t + dt$. La variable t suele llamarse en este contexto un tiempo de primer paso (en \mathbf{r}_0). En un espacio homogéneo:

$$P(\mathbf{r}_0, t) = \int_0^t P_1(\mathbf{r}_0, t')P(\mathbf{0}, t - t') dt' + \delta_{\mathbf{r}_0, \mathbf{0}} e^{-2dt}. \quad (16)$$

Para estar en \mathbf{r}_0 al tiempo t , es necesario llegar ahí por primera vez en algún tiempo $t' \leq t$ y haber regresado a ese origen en un tiempo $t - t'$. El segundo término representa el caso $\mathbf{r}_0 = \mathbf{0}$: la probabilidad de haberse quedado en el origen hasta t es $[\exp(-t)]^{2d}$, dado que el caminante puede saltar con tasa unidad a uno de $2d$ sitios más cercanos en la red. Como conocemos P , podemos obtener P_1 de (16). Con este fin, es conveniente usar la transformada de Laplace definida para cualquier función $f(t)$ como:

$$f(s) = \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt, \quad (17)$$

donde s es la variable conjugada al tiempo. La convolución temporal en (16) se traduce como:

$$P_1(\mathbf{r}_0, s) = \frac{P(\mathbf{r}_0, s) - \delta_{\mathbf{r}_0, \mathbf{0}}/(s + 2d)}{P(\mathbf{0}, s)}. \quad (18)$$

Elegimos ahora $\mathbf{r}_0 = \mathbf{0}$ y queremos determinar $P_1(\mathbf{0}, t) \rightarrow P_1(t)$, la distribución de los tiempos de primer retorno al origen (ver un ejemplo de primer retorno en la figura 1a). La cantidad $\mathcal{R} = P_1(s = 0) = \int_0^\infty P_1(t) dt$ representa entonces la probabilidad de que el caminante regrese en algún momento a su punto de partida. Usando (18) y (15) se obtiene:

$$\mathcal{R} = 1 - \frac{1}{P(\mathbf{0}, s = 0)}. \quad (19)$$

$P(\mathbf{0}, s = 0) = \int_0^\infty P(\mathbf{0}, t) dt$ es la densidad de presencia en el origen integrada sobre todos los tiempos. De (15), $P(\mathbf{0}, t) \propto t^{-d/2}$ a t grande. Para $d \leq 2$ esa función decae más lentamente que $1/t$, por lo tanto $P(\mathbf{0}, s = 0) = \infty$. Usando (19), concluimos que $\mathcal{R} = 1$: las caminatas siempre vuelven a pasar por su punto de origen. En dimensiones mayores que

2, $P(\mathbf{0}, s = 0) < \infty$ y su valor preciso para redes hiper-cúbicas puede ser calculado a partir de (8). En $d = 3$, la caminata regresa al origen solamente con probabilidad $\mathcal{R} = 0.3405\dots$

También podemos derivar el comportamiento de la distribución $P_1(t)$ de los tiempos del primer retorno al origen, a tiempos grandes. Esto se obtiene analizando la ecuación (18) para s pequeño. En $d = 1$, $P(\mathbf{0}, t) \simeq (4t)^{-1/2}$ implicando que $P(\mathbf{0}, s) \simeq 4s^{-1/2}$ cuando $s \rightarrow 0$. Deducimos de (18) que $P_1(\mathbf{0}, s) \simeq 1 - \sqrt{s}$, que es la transformada de Laplace de la función:

$$P_1(t) \simeq \frac{1}{\sqrt{4\pi}} t^{-3/2}, \quad t \gg 1 \quad (d = 1). \quad (20)$$

Esta distribución es una ley de potencia decreciente: es más probable que el caminante regrese al origen (o a cualquier punto previamente visitado) en un plazo corto que después de mucho tiempo. Sin embargo, el decaimiento de $P_1(t)$ con t es lento, por ejemplo, cuando se compara con una exponencial, incluso algunas excursiones son muy largas, tan largas que el tiempo medio de primer retorno al origen diverge: $\langle t \rangle = \int_0^\infty t P_1(t) dt \propto \int_1^\infty t^{-1/2} dt = \infty$. Los caminantes siempre regresan pero en promedio se tardan un tiempo infinito para hacerlo... En $d = 2$, para s pequeño $P(\mathbf{0}, s) \simeq \int_1^\infty (4\pi t)^{-1} e^{-st} dt \simeq -1/(4\pi) \ln s$. Usando (18), obtenemos $P_1(s) = 1 + \pi \ln s$, que es la transformada de Laplace de

$$P_1(t) \simeq \frac{\pi}{t(\ln t)^2}, \quad t \gg 1 \quad (d = 2). \quad (21)$$

Esta distribución decae aún más lentamente con t que en el caso $1d$ y su tiempo medio de primer retorno $\langle t \rangle$ es infinito también.

Número de sitios distintos visitados y procesos de aniquilación

También es de particular interés el número $S(t)$ de sitios distintos visitados en promedio durante un intervalo de tiempo t [5]. Esta cantidad representa el territorio cubierto o "conocido" por el caminante. Dado que el caminante puede visitar varias veces un mismo sitio, $S(t)$ no puede ser mayor a $\mathcal{O}(t)$. La probabilidad de que \mathbf{r} haya sido visitado durante $[0, t]$ es $\int_0^t P_1(\mathbf{r}, t') dt'$, entonces

$$S(t) = 1 + \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{0}} \int_0^t P_1(\mathbf{r}, t') dt'. \quad (22)$$

Usando (18), obtenemos para la transformada de Laplace de $S(t)$: $S(s) \simeq 1/[s^2 P(\mathbf{0}, s)]$ cuando $s \rightarrow 0$. Del comportamiento de $P(\mathbf{0}, s)$ para s pequeño (ver arriba) deducimos que:

$$S(t) \sim \begin{cases} t^{1/2}, & d = 1 \\ t/\ln t, & d = 2. \\ t & d > 2 \end{cases} \quad (23)$$

De acuerdo con el argumento heurístico anterior, la dimensión 2 marca una transición recurrencia/no-recurrencia arriba de la cual las propiedades de $S(t)$ no cambian fundamentalmente. Por esta razón, la dimensión $d_c = 2$ se denomina dimensión crítica para el número de sitios visitados. Como suele pasar en otros fenómenos críticos, aquí también aparecen correcciones logarítmicas en d_c , ver la ecuación (23). Un sitio visitado durante $[0, t]$ se visita en promedio $t/S(t)$ veces. En $d = 2$ este número crece de manera logarítmica pero es una propiedad difícil de predecir heurísticamente.

Los resultados mostrados tienen aplicaciones a problemas de cinética de reacciones químicas, entre otros [2]. Consideremos un conjunto de partículas que se difunden libremente en un medio. Supongamos que cuando 2 partículas se encuentran en un mismo sitio se aniquilan, es decir, desaparecen: $A + A \rightarrow \emptyset$. Dado un número inicial de partículas $N_0 \gg 1$ en un volumen L^d (densidad $\rho_0 = N_0/L^d$), en promedio ¿cuál es el número de partículas $N(t)$ sobrevivientes al instante t ?

En este problema con muchos cuerpos interactuando entre sí, un argumento de tipo cualitativo puede ser muy útil. Consideremos al tiempo t una partícula sobreviviente y mantengamos las otras $N(t) - 1 \simeq N(t)$ fijas en sus posiciones. Al tiempo $t + \tau$, el número medio n_e de partículas encontradas por la partícula focal es proporcional al número de sitios distintos que visitó durante el tiempo τ y a la densidad media en $[t, t + \tau]$: $S(\tau)\bar{\rho} = S(\tau)\tau^{-1} \int_t^{t+\tau} dt' N(t')/L^d$. Suponiendo que $N(t)$ decae como una ley de potencia, $N(t) \sim t^{-\alpha}$, entonces $n_e \propto S(\tau)[(t + \tau)^{-\alpha+1} - t^{-\alpha+1}]/\tau$. Cuando n_e es de orden 1, la probabilidad de que la partícula considerada desaparezca es bastante alta, independientemente de t . Eso es posible si $\tau = \text{const} \times t$ y $S(t) \times t^{-\alpha} = \text{const}$. Concluimos que:

$$N(t) \propto 1/S(t). \quad (24)$$

Dado (23), $N(t)$ decae asintóticamente como $1/t$ si $d > 2$, como $\ln t/t$ en $d = 2$ y como $1/\sqrt{t}$ en $d = 1$. Es interesante observar que estos resultados se comprueban en simulaciones numéricas.

Podemos comparar estos resultados con lo que predice una ecuación cinética de tipo campo medio que ignora las fluctuaciones espaciales de densidad. Tradicionalmente, la evolución de las densidades medias en reacciones químicas se describe con ecuaciones diferenciales ordinarias. Para el proceso de aniquilación considerado aquí:

$$\frac{d\rho}{dt} = -2K\rho^2, \quad (25)$$

que tiene como solución $\rho(t) \sim 1/t$. Este comportamiento es correcto solamente en $d > 2$, ya que en dimensiones bajas, la recurrencia de las caminatas aleatorias modifica de manera importante el resultado de campo medio. Estos argumentos también se pueden aplicar a otros tipos de reacciones. Para procesos de aniquilación entre dos especies distintas, $A + B \rightarrow \emptyset$, se obtiene $d_c = 4$: los efectos de la difusión son aún más fuertes y siguen presentes en el caso $d = 3$ de mayor relevancia física [2].

3. Movilidad de organismos complejos: perspectivas presentes y futuras

Más de un siglo después de los experimentos clásicos de Jean Perrin, quien rastreaba con precisión el movimiento browniano de partículas microscópicas de látex, los avances tecnológicos de hoy en día permiten realizar experimentos similares y por largos periodos de tiempos (típicamente meses) sobre tiburones, babuinos, tortugas, albatros, roedores, etcétera; sin olvidar a los humanos. Desde hace apenas algunos años, el interés por el estudio de la movilidad de los organismos vivos ha conocido un crecimiento exponencial. Es sorprendente constatar que se sabe más sobre la difusión de proteínas en una célula que sobre las propiedades estadísticas de los desplazamientos de un humano en una ciudad o de un animal en un ecosistema silvestre. Sin embargo, la movilidad individual es de gran importancia en problemas de dinámica poblacional, de tránsito o de propagación de enfermedades. Dado su carácter interdisciplinario, cada vez es más frecuente que físicos colaboren con biólogos, ecólogos o antropólogos en estos temas.

Más allá de la difusión simple

Desde un punto de vista teórico, el movimiento de organismos complejos en ambientes no menos complejos plantea varios retos matemáticos y computacionales. Los modelos de caminatas aleatorias antes mencionados son relativamente fáciles de resolver porque se trata de procesos markovianos o sin memoria: la evolución de t a $t + 1$ depende del estado del sistema a t . Sin embargo, muchos procesos en la naturaleza no son markovianos. Por ejemplo, los mamíferos y vertebrados en general tienen memoria y la capacidad de crear mapas mentales, es decir representaciones espacio-temporales de mayor alcance que la vecindad de la posición \mathbf{r} y del tiempo t actuales. Aunque las caminatas aleatorias han sido muy útiles para describir el movimiento animal en escalas temporales cortas [6], el uso de las capacidades cognitivas debería tener repercusiones importantes en varias propiedades dinámicas asintóticas y en lo que los ecólogos llaman “el uso del espacio”. Desafortunadamente estas repercusiones han sido poco exploradas.

Una limitación de las caminatas aleatorias en la naturaleza se manifiesta, por ejemplo, en el poco entendido fenómeno del *ámbito hogareño*. Los animales no se difunden libremente y su desplazamiento cuadrático medio no crece indefinidamente según una ley de Smoluchowski-Einstein (10). Más bien, los individuos en general se quedan confinados en ciertas áreas relativamente pequeñas (“territorios”), a menudo sin fronteras físicas visibles. La probabilidad de ver al animal fuera de esa área es prácticamente nula (ver figura 1-derecha). De manera similar, muchos humanos deben ir al trabajo y regresar a casa tarde o temprano, lo cual limita los lugares que puede visitar un individuo. En otras palabras, somos *muy* recurrentes, aunque no totalmente predecibles. Datos obtenidos de animales equipados de collares con GPS [7] o de humanos usuarios de teléfonos celulares [8] muestran que el desplazamiento cuadrático medio de un individuo $\langle \mathbf{r}^2 \rangle(t)$ tiende

asintóticamente a un valor constante o crece muy lentamente, típicamente con una ley logarítmica de t .

Visitas preferenciales

En [9], se discute cualitativamente en contextos ecológicos un modelo donde un ámbito hogareño emerge a partir de reglas estocásticas simples. Sea un parámetro $0 \leq p \leq 1$. A cada paso de tiempo $t \rightarrow t + 1$, un caminante con posición discreta elige con probabilidad $1 - p$ moverse a uno de los sitios vecinos más cercanos (cada uno con igual probabilidad), o con probabilidad complementaria p , elige un tiempo al azar t' de manera uniforme en $[0, t]$ y salta directamente al sitio donde estaba al instante t' . Por lo tanto, el movimiento combina una exploración local aleatoria estándar y pasos que pueden ser muchos más largos (pero menos frecuentes si $p \ll 1$). Dicha combinación se observa empíricamente en muchas especies y a veces se le denomina movimiento *intermitente* [10]. El presente modelo supone que estos pasos hacia lugares más lejanos se deben al uso intermitente de la memoria (la cual es ilimitada porque todas las posiciones pasadas se recuerdan). Un ejemplo de una trayectoria generada por estas reglas se muestra en la figura 1b. En una dimensión espacial, la ecuación de recurrencia generaliza la ecuación (1):

$$P_t(n) = \frac{1-p}{2}P_{t-1}(n-1) + \frac{1-p}{2}P_{t-1}(n+1) + \frac{p}{t} \sum_{t'=0}^{t-1} P_{t'}(n). \quad (26)$$

El último término de memoria indica que el sitio n puede ser visitado desde cualquier lugar si ha sido visitado antes. La regla de memoria tiene una interpretación simple: la probabilidad de que el caminante elija un sitio particular es proporcional al número de veces que este sitio fue visitado antes. Un sitio familiar tiene mayor posibilidades (tiempos t') de ser elegido para visitas futuras que un sitio visitado pocas veces. Es similar al principio “el rico se vuelve más rico” o de “vinculación preferencial” muy popular actualmente en la ciencia de las redes complejas. La transformada de Fourier-Laplace discreta⁴ de $P_t(n)$, definida como

$$P(z, \lambda) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{t=0}^{\infty} z^n \lambda^t P_t(n), \quad (27)$$

se puede obtener analíticamente a partir de (26):

$$P(z, \lambda) = (1 - \lambda)^{-a} [1 - u(1 - p)\lambda]^{-b/u(1-p)}, \quad (28)$$

donde $u = (z + z^{-1})/2$, $a = p/[1 - u(1 - p)]$ y $b = 1 + u(1 - p) - a$. Esta relación es difícil de invertir pero el desplazamiento cuadrático medio $\langle x^2 \rangle(t) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 P_t(n)$ se puede obtener sin conocer $P_t(n)$. Notamos que la transformada de Laplace $\langle x^2 \rangle(\lambda)$ obedece a la

⁴En las notaciones anteriores, $z = e^{ik}$ y $\lambda = e^{-s}$.

relación general $\langle x^2 \rangle(\lambda) = \frac{\partial}{\partial z} (z \frac{\partial}{\partial z} P(z, \lambda))|_{z=1}$. El análisis del límite $\lambda \rightarrow 1$ (equivalente al $s \rightarrow 0$ de la sección anterior) permite determinar el comportamiento asintótico $t \rightarrow \infty$:

$$\langle x^2 \rangle(\lambda) \simeq -\frac{(1-p)}{p(1-\lambda)} [\ln(1-\lambda) - \ln p] \implies \langle x^2 \rangle(t) \simeq \frac{1-p}{p} [\ln(pt) + \gamma], \quad (29)$$

con $\gamma = 0.57721\dots$ Concluimos que la difusión es logarítmicamente lenta en este modelo. La memoria convierte al caminante en muy recurrente, a tal punto de modificar drásticamente, para todo $p > 0$, la ley estándar (10) lineal en t . Un modelo similar basado en visitas preferenciales pudo reproducir patrones de movilidad humana observados recientemente [8].

Una consecuencia importante del principio “el rico se vuelve más rico” es la de generar mucha heterogeneidad entre sitios o entre nodos en caso de redes: hay muchos “pobres” (sitios poco populares/poco visitados) y pocos “ricos” (sitios muy populares/-de uso muy rutinario). Un sitio “rico” suele ser mucho más visitado que un sitio típico elegido al azar. Frecuentemente, esta disparidad creada por la asociación preferencial se manifiesta por la emergencia de distribuciones en *leyes de potencias* o *libres de escala*⁵. Sea un sitio elegido al azar dentro de los sitios visitados mínimo una vez por un caminante durante un cierto intervalo de tiempo. En los modelos preferenciales discutidos arriba, la probabilidad $P(k)$ de que este sitio haya sido visitado exactamente k veces sigue una ley de potencia:

$$P(k) \propto k^{-\gamma}, \quad (30)$$

con $\gamma > 1$ un exponente que puede depender de los parámetros del modelo considerado. Es bastante probable que el sitio haya sido visitado solamente 1 vez, pero como la función $x^{-\gamma}$ decae lentamente con x , no es imposible que algunos sitios hayan recibido 10, 100 o más visitas. En el mundo real, dicho uso muy heterogéneo del espacio se observa efectivamente tanto en humanos como en otros animales. Subdividiendo el espacio continuo (por ejemplo una ciudad) en celdas y contando el número de visitas a cada celda por un mismo individuo durante un periodo dado (6 meses, típicamente), la probabilidad $P(k)$ de popularidad definida arriba se aproxima bien por (30) con $\gamma \approx 1.8$ en humanos en EU [8] y $\gamma \approx 1.2$ en monos capuchinos en una selva de Panamá [7]. Unos pocos sitios reciben una enorme cantidad de visitas (la casa y el lugar de trabajo para los humanos). En la figura 1-derecha, se aprecia cómo un mono capuchino también usa el espacio de manera muy heterogénea. A pesar de la elegancia y éxito del principio de visitas preferenciales para reproducir datos empíricos, no queda muy claro que dicho principio estocástico gobierne exclusivamente el movimiento de organismos complejos.

Caminatas reforzadas

Otra clase de procesos en donde los sitios visitados en el pasado tienden a ser revisitados preferentemente son las caminatas reforzadas. A diferencia del modelo anterior,

⁵Vimos un ejemplo de dicha distribución en la sección 2.

los pasos siempre se dan hacia los vecinos más cercanos, por lo tanto no hay pasos largos. Esta propiedad complica el análisis porque la ecuación maestra se convierte en *no lineal*. Lo interesante es que por efectos de no linealidad se pueden presentar fenómenos nuevos como *transiciones de fase* entre regímenes dinámicos muy diferentes cuando algún parámetro rebasa un valor crítico.

Un modelo propuesto recientemente [11] muestra una transición de fase entre un régimen en donde el caminante se localiza estrictamente y un régimen en donde el caminante se difunde sin límites. A cada paso de tiempo con probabilidad $1-p$ el caminante ubicado en el sitio n salta a un sitio vecino más cercano $m = n \pm 1$ elegido al azar con probabilidad $w_{n \rightarrow m} = 1/2$ (en una dimensión). Con probabilidad p el caminante salta a m con probabilidad $w_{n \rightarrow m} \propto [v_m(t) + 1]^\alpha$ donde $v_m(t)$ es el número de visitas recibidas por el sitio m en el intervalo $[0, t]$ y α una constante. Si $\alpha > 0$, cuanto más visitas haya recibido un sitio, se vuelve más atractivo cuando el caminante pasa cerca⁶; p representa la frecuencia con la cual se toman decisiones basadas en este mecanismo. La ecuación maestra en su forma más general

$$P_{t+1}(n) = \sum_{m \text{ vecino de } n} w_{m \rightarrow n} P_t(m), \quad (31)$$

es ahora no lineal dado que $w_{m \rightarrow n}$ depende del número de visitas pasadas y por lo tanto de P . Tomando el límite continuo y usando la relación $v_x(t) = \int_0^t P(x, t') dt'$, se obtiene la siguiente ecuación de difusión para la densidad de probabilidad de presencia $P(x, t)$:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} - \alpha p \frac{\partial}{\partial x} \left\{ P(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \ln \left[1 + \int_0^t P(x, t') dt' \right] \right\}. \quad (32)$$

La densidad de probabilidad de una partícula que se difunde libremente en un medio infinito se diluye cuando $t \rightarrow \infty$, es decir $P(x, t) \rightarrow 0$ para todo x , como en (15). A pesar de la complejidad de (32), se pueden buscar condiciones para la existencia de soluciones estacionarias espacialmente localizadas en el límite $t \rightarrow \infty$, es decir un patrón territorial permanente. Sustituyendo en el lado derecho de (32) $P(x, t)$ por una función de x , $P(x) \neq 0$, pero manteniendo en primera aproximación la dependencia temporal del lado izquierdo, se obtiene:

$$\frac{\partial P}{\partial t} \approx \tilde{D} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \quad \text{con } \tilde{D} = \frac{1}{2} - \alpha p. \quad (33)$$

Si $\tilde{D} > 0$, las soluciones de (33) son difusivas, ver (32), y se contradice la suposición $P(x, t = \infty) = P(x) \neq 0$. Sin embargo, si $\tilde{D} < 0$, se observa un fenómeno inverso a la difusión⁷: típicamente la partícula se va concentrando en algún punto x_0 a un cierto tiempo, y para tiempos mayores $P(x) = \delta(x - x_0)$. Por lo tanto, fijando α , existe una frecuencia crítica de uso de la memoria $p_c = 1/(2\alpha)$ tal que si $p > p_c$ el caminante se convierte en sedentario en tiempos suficientemente grandes mientras se difunde si $p < p_c$.

⁶Si $\alpha < 0$, un caso no discutido aquí, los sitios nunca visitados antes son los más atractivos.

⁷Equivalente a mantener $\tilde{D} > 0$ e invertir el tiempo, $t \rightarrow -t$.

Esta transición es posible si $p_c < 1$, es decir si $\alpha > 1/2$. Estos resultados se confirman por simulaciones numéricas en dos dimensiones. Algo nuevo mostrado por las simulaciones es que el caminante parece restringir sus visitas a unos cuantos sitios y no a uno sólo [11]. En resumen, en este modelo una región limitada de presencia se auto-organiza dinámicamente debido a la interacción del caminante con su propia trayectoria, por arriba de un umbral crítico de memoria.

Exclusión y efectos de muchos cuerpos

Existen otros mecanismos relevantes para los organismos vivos que pueden causar difusión restringida. Con el propósito de tener un acceso exclusivo a ciertos recursos, muchos animales marcan los sitios que visitan con olores para excluir a otros individuos de la misma especie. Esta interacción repulsiva entre animales tiene conexiones con una clase de procesos muy estudiados en física estadística fuera de equilibrio: los procesos de exclusión. El modelo más sencillo de este tipo consiste en una línea uni-dimensional discreta donde N caminantes aleatorios se difunden sin poder ocupar un mismo sitio (ver figura 2, arriba). Cuando un caminante se encuentra en un sitio vecino de otro caminante, el único cambio permitido de t a $t + 1$ es retroceder en la dirección opuesta (o quedarse inmóvil si está bloqueado entre dos caminantes). En este sistema de muchas partículas en interacción⁸ los efectos de exclusión frenan de manera drástica la difusión individual. Contrariamente al caso una partícula libre, el desplazamiento cuadrático medio no crece linealmente con el tiempo como en (10) sino mucho más lentamente. La ley asintótica exacta fue derivada por Arratia [12]:

$$\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle \simeq \frac{1 - \rho}{\rho} \sqrt{\frac{2t}{\pi}}, \quad t \rightarrow \infty, \quad (34)$$

donde $x(t)$ es la posición de algún caminante y ρ la densidad de caminantes (N dividido por el número de sitios). Este es un resultado notable porque indica que, debido a efectos colectivos, la distancia típica entre un caminante y su punto de origen, $l(t) = \sqrt{\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle}$, crece como $t^{1/4}$ en lugar de $t^{1/2}$ en la difusión normal. Este resultado se puede entender de manera cualitativa en altas densidades ($\rho \sim 1$), donde los caminantes son a menudo inmóviles. En este límite, las vacancias (sitios desocupados, en densidad $1 - \rho$) recorren caminatas aleatorias normales e independientes; dos vacancias se cruzan sin interactuar. Cada vez que una vacancia alcanza desde la izquierda a un caminante (inicialmente ubicado en el origen), éste puede dar un paso hacia la izquierda. En un tiempo t , las vacancias recorren típicamente una longitud $l_v \sim t^{1/2}$. Entonces, son $N_v \sim 2(1 - \rho)l_v$ vacancias que pueden alcanzar al caminante focal desde la izquierda o derecha en $[0, t]$. El desplazamiento $x(t) - x(0)$ del caminante se puede ver como una caminata aleatoria de N_v pasos independientes, $x(t) - x(0) \approx \sum_{i=1}^{N_v} \epsilon_i$, con $\epsilon_i = \pm 1$. De (14), deducimos $\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle \approx N_v \langle \epsilon_i^2 \rangle \sim (1 - \rho)t^{1/2}$, en acuerdo cualitativo con (34).

⁸O procesos de Markov interactuando en \mathbb{Z} .

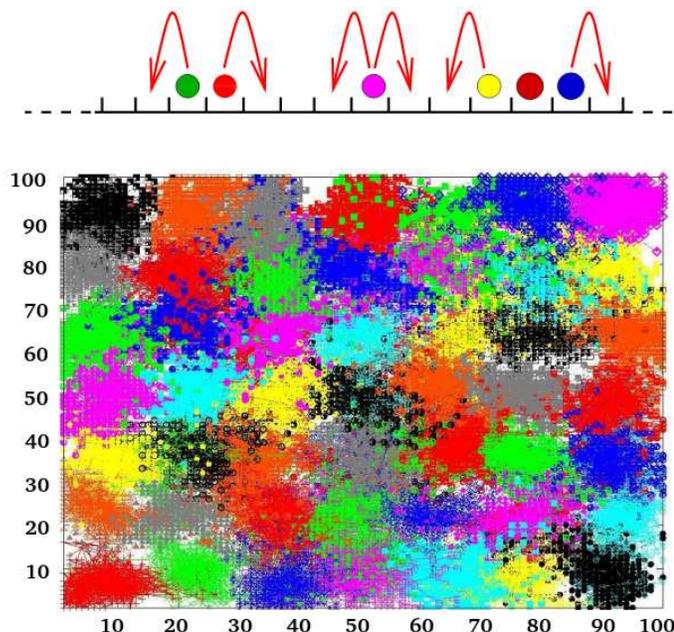


Figura 2: Arriba: Proceso de exclusión simétrica entre N caminantes en $1d$. Cada caminante puede saltar hacia uno de sus dos sitios más cercanos con igual probabilidad, siempre y cuando el sitio este desocupado. Abajo: Patrón territorial numérico formado por 49 caminantes con tendencia a excluirse (ver texto). Cada mancha de color ilustra el área ocupada por un caminante.

Sin embargo, se trata de un crecimiento algebraico con t , que sigue siendo mucho más rápido que una ley logarítmica como en (29). Se pueden considerar reglas de exclusión más severas y también más realistas. En una extensión de este modelo [13], cada caminante deposita en los sitios discretos que visita un olor que tarda un tiempo T_{AS} en desaparecer. Si un caminante llega a un sitio marcado, donde el olor de otro está todavía activo, éste retrocede. Entonces, las zonas de exclusión pueden ser grandes y no solamente limitadas a la posición actual de los animales. Si el parámetro T_{AS} es $\gg 1$, se forma un patrón espacial de olores activos (es decir, ámbitos hogareños) similares a los mostrados en la figura 2 (abajo) en un espacio bidimensional. En el caso más simple unidimensional, se muestra que, aunque este mecanismo no elimina por completo la difusión en tiempos muy largos, disminuye fuertemente su amplitud. Se muestra en [13] que las fronteras que separan ámbitos hogareños vecinos se difunden con la ley (34) modificada con un prefactor exponencialmente pequeño:

$$\langle [x_f(t) - x_f(0)]^2 \rangle \propto e^{-\frac{1}{2}\rho^2 T_{AS}} \sqrt{t}, \quad (35)$$

en donde x_f denota la posición de una frontera. Los dominios se vuelven casi estacionarios si T_{AB} es muy grande. Un efecto cualitativamente similar se observa en $2d$. Este

modelo con valores realistas de T_{AB} ha sido aplicado a la descripción de la distribución de zorros en el área urbana de Bristol, Reino Unido.

Biología y modelos basados en agentes

Los modelos expuestos desde el inicio de este capítulo generan trayectorias individuales (posición, tiempo) a partir de reglas dinámicas. Una ventaja de este enfoque es que las trayectorias se pueden simular y analizar de la misma manera que los datos reales, lo cual permite *a posteriori* evaluar la relevancia de las reglas propuestas. Este es el principio de los modelos basados en agentes. Debido a que el uso de las computadoras se está generalizando, en un futuro cercano la complejidad de las reglas a modelar se podrá incrementar prácticamente *ad libitum*, dependiendo del grado de realismo que se desee alcanzar en el estudio de un sistema específico o de los mecanismos de movimiento de interés. Aunque una solución matemática esté fuera de alcance, un modelo computacional puede ser valioso para identificar mecanismos biológicos en un patrón observado y/o para predecir algún fenómeno nuevo.

Una pregunta que no se planteó en las secciones anteriores es ¿por qué los organismos vivos hacen lo que hacen? Según la teoría de la evolución, si un animal tiene cierto comportamiento al recorrer su ambiente, es que este comportamiento ha evolucionado (por ejemplo con el desarrollo de ciertas capacidades cognitivas) para mejorar la adecuación del animal con su medio y su facultad para sobrevivir. Una limitación de los modelos presentados en las secciones anteriores es que en gran parte ignoran la existencia de un medio ambiente con el cual el animal interactúa. Tomemos el ejemplo de las *búsquedas aleatorias* [10, 14, 15]: consideremos un ambiente con puntos de alimentos distribuidos al azar y un animal que desconoce la ubicación de estos puntos. Supongamos que la alimentación es un factor limitante y que el animal adopta una estrategia que le permite encontrar más lugares de alimentos por unidad de tiempo comparado con lo que haría con otra estrategia (por ejemplo una caminata aleatoria simple), esta estrategia tendrá una ventaja evolutiva. Muchas teorías biológicas recientes (por ejemplo [16]) deberían ser comprobadas o invalidadas con datos de campo y modelos basados en agentes, hacerlo significa un gran reto. A continuación mencionaremos esfuerzos recientes en esta dirección.

¿Agruparse o andar solo?

Los mejillones, como muchos otros animales, se enfrentan a un dilema: si se agrupan densamente sobre rocas en el mar pueden resistir más fácilmente a factores externos adversos, como corrientes y depredadores, a los cuales un individuo aislado es más vulnerable. Sin embargo, en grupos deben competir por recursos limitados (alimentos), mientras que un mejillón sin vecinos cercanos tiene más recursos para él solo. La figura 3 ilustra un modelo basado en agentes propuesto recientemente en donde cada mejillón simplemente combina periodos de movimiento aleatorio con periodos de inmovilidad [17]. Se

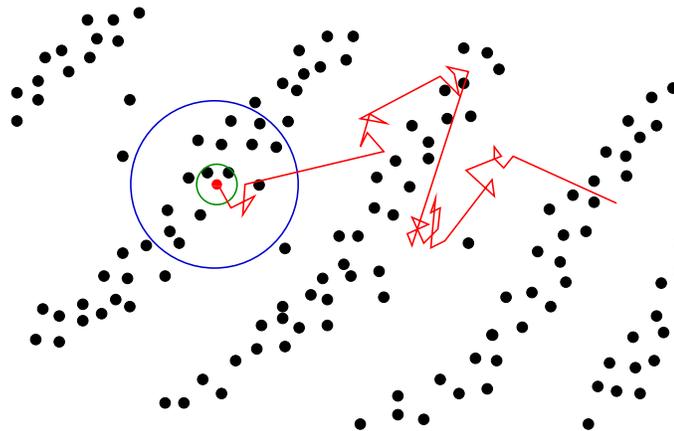


Figura 3: Cada agente de esta población, por ejemplo el señalado en rojo, decide en cada intervalo de tiempo dar un paso aleatorio o quedarse inmóvil. Se supone que la probabilidad de quedarse inmóvil crece cuando hay más vecinos a corta distancia (dentro del círculo pequeño) porque la agregación disminuye los riesgos de mortalidad. Pero si hay demasiados agentes a distancias mayores (dentro del círculo grande), aumenta la probabilidad de que el agente decida moverse para no competir por alimentos. Por estas dos reglas antagonistas, el sistema se auto-organiza rápidamente en bandas, parecidas a las observadas en colonias de mejillones en el mar. La velocidad a la cual se forma este patrón es máxima si los caminantes se mueven combinando pasos cortos con pasos largos menos frecuentes (caminatas de Lévy, como lo muestra la línea roja). Además, la adecuación media de los individuos es también máxima para este tipo de movimiento [17].

encontró que cierto tipo de caminatas aleatorias (llamadas de Lévy [14]), permiten *maximizar* la adecuación media (o probabilidad de sobrevivencia) de los mejillones. Además, esta estrategia óptima individual hace emerger por efectos de retroalimentación patrones colectivos de agrupación espacialmente *no-uniformes*. Estos patrones están caracterizados por la alternancia periódica de zonas pobladas y poco pobladas en forma de rayas. Finalmente, si se permiten mutaciones aleatorias en el comportamiento, cualquier estado sub-óptimo forzosamente evoluciona en el tiempo hacia el estado óptimo, siendo por lo tanto un punto atractor estable [17].

La importancia de este modelo es que ha sido capaz de explicar con un mismo mecanismo motivado biológicamente, la función de dos observaciones empíricas *a priori* sin conexión: los movimientos de Lévy de mejillones individuales, que han sido analizados cuidadosamente en el laboratorio, y sus patrones de agrupación en el mar en forma de rayas. Además, el modelo hizo la predicción de que esta especie tenía que haber evolucionado hacia un estado óptimo, detalle que no es nada trivial y raramente es considerado en estudios del movimiento animal.

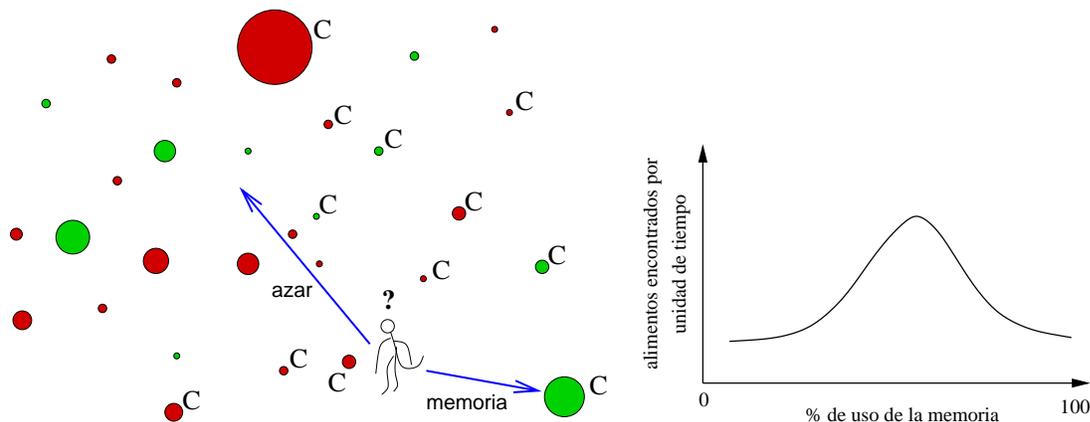


Figura 4: Izquierda: Un agente (mono) conoce ciertos árboles (marcados con una “C”) por haberlos visitado en el pasado. Puede decidir usar este mapa mental para visitar un árbol conocido que esté fructificando (color verde), o bien dar un paso al azar, sin certeza de encontrar recursos pero con la posibilidad de incrementar su conocimiento del bosque. Si los árboles fructifican por poco tiempo y de manera estocástica, los recursos son efímeros y el medio es poco predecible. En tal caso, si el agente usa solamente su memoria, puede ser que muchos de los árboles que conoce ya no estén fructificando (de color café) y que ignore por falta de exploración árboles que ya están siendo productivos. Derecha: Existe un balance óptimo entre el uso del azar y de la memoria que permite maximizar la cantidad de alimentos ingeridos por unidad de tiempo. (Adaptado de [18]).

¿Usar su memoria o explorar al azar?

Ahora consideremos a un animal que se mueve solo en un ambiente con fuentes de alimentos (árboles con fruta), ver la figura 4. Supongamos, como se observa en muchas selvas, que los árboles no son todos del mismo tamaño: la mayoría son pequeños/poco productivos, pero existen unos cuantos árboles muy grandes/productivos, es decir la distribución espacial de los recursos es heterogénea. Además, aunque siempre hay frutos en el ambiente, un árbol no tiene frutos todo el año sino durante un periodo relativamente corto, que varía entre árboles. Cuando fructifica un árbol, produce cierta cantidad de fruta cada día. Después de un tiempo, los frutos no consumidos se caen y se pudren. Supongamos finalmente que el caminante tiene la capacidad de construirse *mapas mentales*: al moverse, recuerda las posiciones, tamaños y estados de fructificación de los árboles que visita. ¿Cuál es la mejor estrategia a seguir para maximizar la cantidad de frutos ingeridos por unidad de distancia recorrida?

Este es un problema muy complejo de optimización combinatoria (aún más difícil que el Problema del Agente Viajero). Para simplificar, podemos tratar de optimizar las siguientes reglas: a cada paso el caminante se pregunta: ¿Me muevo hacia una dirección al azar o voy hacia un árbol que conozco y que tiene frutos? Si siempre camina al azar, el animal

no saca provecho de su memoria: en lugar de dirigirse directamente a un buen árbol ya visitado, lo revisitaría solamente si lo encuentra otra vez por azar. Un resultado poco intuitivo es que tampoco un uso excesivo de la memoria es eficiente, porque en este caso el caminante se limita a una misma zona reducida, ignorando otras regiones con recursos disponibles [18]. Como se muestra en la figura 4 (derecha), la estrategia óptima combina tanto el azar como el uso de la memoria.⁹ Una dosis de exploración al azar es valiosa sobretudo cuando los recursos son efímeros, es decir cuando el caminante necesita actualizar constantemente sus conocimientos. También se demuestra que la memoria es de mayor utilidad en ambientes más heterogéneos espacialmente, lo cual sugiere que ecosistemas complejos pudieron haber propiciado el desarrollo de la memoria en los animales [18].

Debido al uso de mapas mentales, este modelo genera caminatas poco aleatorias y con un alto grado de determinismo. Además de formar un ámbito hogareño, las trayectorias son bastante *predecibles* o de baja entropía: el caminante visita frecuentemente secuencias de lugares en el mismo orden. Esta propiedad también caracteriza los trayectos humanos [19].

El tipo de estrategia descrita arriba, que consiste en combinar *explotación* de información disponible con *exploración* para adquirir información nueva, tiene aplicaciones para organismos muy sencillos en otros contextos. Consideremos una bacteria móvil buscando una fuente de alimento fija en un punto. Supongamos que esta fuente emite moléculas (“olores”) que se difunden en el medio y que representan índices que proporcionan información sobre la ubicación de la fuente cuando la bacteria encuentra estas moléculas. Si la fuente emite muy pocas moléculas por unidad de tiempo, la información disponible para la bacteria es muy escasa y desconectada espacialmente. En este caso, la bacteria no puede seguir los gradientes de concentración¹⁰ porque éstos son muy pequeños y fragmentados. Una estrategia adecuada para este caso llamada *infotaxis*, ha sido planteada recientemente [20]. A medida que encuentra moléculas, el caminante se va construyendo con el tiempo una idea sobre dónde puede estar la fuente de alimento. Esta información, a un tiempo t , está contenida en una densidad de probabilidad esperada $P(\mathbf{x}, t)$ de que la fuente esté en la posición \mathbf{x} . A esta distribución se le puede asociar una entropía de Shannon, $S = - \int d\mathbf{x} P(\mathbf{x}, t) \ln P(\mathbf{x}, t)$. Cuando más localizada es $P(\mathbf{x}, t)$, menos incertidumbre hay sobre la ubicación de la fuente y más baja es la entropía S . Cada vez que se mueve de un paso (exploración) y encuentre o no una molécula, el caminante usa un modelo de inferencia estadística para actualizar la densidad de probabilidad esperada (y por lo tanto S). La *infotaxis* consiste en moverse en la dirección hacia donde se maximiza la disminución de la entropía S , es decir, se maximiza la ganancia en información a partir de la información previa disponible (explotación). Esta estrategia permite al organismo tener tiempos de búsqueda bastante cortos, aún en ambientes escasos.

⁹Cualquiera puede haber experimentado este dilema a la hora de salir a comer y tener que elegir un restaurante.

¹⁰Tal estrategia es adecuada cuando las concentraciones son altas y se le conoce como *quimiotaxis*.

4. Conclusiones

En años recientes, el estudio del movimiento de organismos vivos ha permitido ampliar el marco de los procesos difusivos, mediante el planteamiento de nuevas preguntas teóricas y la introducción de nuevos modelos con propiedades físicas y matemáticas inéditas. Paralelamente, se están acumulando enormes cantidades de datos de movilidad, que hace unos años eran imposibles adquirir. No cabe duda que las tecnologías de rastreo empleadas en estudios de campo van a progresar aún más. Sin embargo, aún con estos datos, el proceso de validación de las teorías clásicas y modelos conocidos se está apenas iniciando. Solamente el análisis conjunto de modelos y datos permitirá determinar cuáles son los procesos generadores de movimiento y entender su origen. Los datos empíricos motivarán nuevos enfoques teóricos y estos últimos permitirán extraer más información cuantitativa de los datos. Una pregunta abierta importante, es si existen principios universales que gobiernen el movimiento de todos los organismos vivos, de bacterias a elefantes. Existen opiniones divergentes al respecto [7, 8, 16], pero esta pregunta tuvo el mérito a nutrir el crecimiento de una nueva rama de las ciencias naturales en la cual la Física puede aportar mucho: la Ecología del Movimiento [16].

Varias de las consideraciones expuestas se pueden aplicar a los Sistemas Complejos en general. Si bien es difícil predecir dónde estaremos en el futuro, podemos afirmar que la investigación en muchos temas ha cambiado significativamente durante las últimas dos décadas. Entre otros aspectos nuevos, existe ahora un mar de datos, muchos de los cuales están disponibles libremente en el Internet y a menudo los podemos encontrar sin haber sido nunca analizados por un científico. De alguna manera, esperan que alguien descifre los secretos que encierran. Entender matemáticamente un modelo puede ser muy satisfactorio y enriquecedor, sin embargo esto no significa necesariamente entender el mundo real. Por citar dos ejemplos entre muchos posibles, los estudios [17] y [21] son fuentes de inspiración y esperanza para futuras investigaciones.

Nota: Debido a la falta de espacio, muchos temas de interés actual y relacionados con la difusión no se pudieron abordar en este capítulo. Simplemente hemos mencionado brevemente los procesos de búsqueda aleatoria y su aplicación al forrajeo animal. Para más detalles sobre las búsquedas de Lévy, intermitentes o de reseteo se recomiendan las referencias [14], [10] y [15], respectivamente. Las búsquedas bayesianas se exponen en [22]. El estudio de los efectos de la movilidad de individuos sobre la propagación de enfermedades en humanos y animales es un tema de intensa investigación actual [23]. Modelos epidemiológicos basados en agentes móviles pueden ayudar a diseñar políticas de conservación de primates en parques de África [24]. En [21] se estudia con un enfoque similar, la lenta propagación de palabras nuevas en un país (Japón). Finalmente, el movimiento colectivo de animales en grupos se discute por F. Sevilla en este libro.

5. Referencias

- [1] S. Chandrasekhar, "Stochastic problems in physics and astronomy," *Reviews of modern physics*, vol. 15, no. 1, pp. 1–89, 1943.
- [2] P. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim, *A kinetic view of statistical physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [3] B. Hughes, M. Shlesinger, and E. Montroll, "Random walks with self-similar clusters," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 78, no. 6, pp. 3287–3291, 1981.
- [4] S. Redner, *A guide to first-passage processes*. Cambridge University Press, 2001.
- [5] B. Hughes, *Random Walks and Random Environments: Volume 1: Random Walks*. Clarendon Press, Oxford, 1995.
- [6] P. Smouse, S. Focardi, P. Moorcroft, J. Kie, J. Forester, and J. Morales, "Stochastic modelling of animal movement," *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, vol. 365, no. 1550, pp. 2201–2211, 2010.
- [7] D. Boyer, M. Crofoot, and P. Walsh, "Non-random walks in monkeys and humans," *Journal of The Royal Society Interface*, vol. 9, pp. 842–847, 2012.
- [8] C. Song, T. Koren, P. Wang, and A. Barabási, "Modelling the scaling properties of human mobility," *Nature Physics*, vol. 6, no. 10, pp. 818–823, 2010.
- [9] L. Börger, B. Dalziel, and J. Fryxell, "Are there general mechanisms of animal home range behaviour? a review and prospects for future research," *Ecology Letters*, vol. 11, pp. 637–650, 2008.
- [10] O. Bénichou, C. Loverdo, M. Moreau, and R. Voituriez, "Intermittent search strategies," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 83, pp. 81–129, Mar 2011.
- [11] J. Choi, J. Sohn, K. Goh, and I. Kim, "Modeling the mobility with memory," *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 99, no. 5, p. 50001, 2012.
- [12] R. Arratia, "The motion of a tagged particle in the simple symmetric exclusion system on \mathbb{Z}^1 ," *The Annals of Probability*, vol. 11, no. 2, pp. 362–373, 1983.
- [13] L. Giuggioli, J. Potts, and S. Harris, "Animal interactions and the emergence of territoriality," *PLoS Computational Biology*, vol. 7, no. 3, p. e1002008, 2011.
- [14] G. Viswanathan, E. Raposo, and M. Da Luz, "Lévy flights and superdiffusion in the context of biological encounters and random searches," *Physics of Life Reviews*, vol. 5, no. 3, pp. 133–150, 2008.

- [15] M. Evans and S. Majumdar, "Diffusion with stochastic resetting," *Physical Review Letters*, vol. 106, no. 16, p. 160601, 2011.
- [16] R. Nathan, W. Getz, E. Revilla, M. Holyoak, R. Kadmon, D. Saltz, and P. Smouse, "A movement ecology paradigm for unifying organismal movement research," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 105, no. 49, pp. 19 052–19 059, 2008.
- [17] M. de Jager, F. Weissing, P. Herman, B. Nolet, and J. van de Koppel, "Lévy walks evolve through interaction between movement and environmental complexity," *Science*, vol. 332, no. 6037, pp. 1551–1553, 2011.
- [18] D. Boyer and P. Walsh, "Modelling the mobility of living organisms in heterogeneous landscapes: does memory improve foraging success?" *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 368, no. 1933, pp. 5645–5659, 2010.
- [19] C. Song, Z. Qu, N. Blumm, and A. Barabási, "Limits of predictability in human mobility," *Science*, vol. 327, no. 5968, pp. 1018–1021, 2010.
- [20] M. Vergassola, E. Villermaux, and B. Shraiman, "Infotaxis as a strategy for searching without gradients," *Nature*, vol. 445, no. 7126, pp. 406–409, 2007.
- [21] L. Lizana, N. Mitarai, K. Sneppen, and H. Nakanishi, "Modeling the spatial dynamics of culture spreading in the presence of cultural strongholds," *Physical Review E*, vol. 83, no. 6, p. 066116, 2011.
- [22] A. Hein and S. McKinley, "Sensing and decision-making in random search," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 109, no. 30, pp. 12 070–12 074, 2012.
- [23] V. Belik, T. Geisel, and D. Brockmann, "Natural human mobility patterns and spatial spread of infectious diseases," *Physical Review X*, vol. 1, no. 1, p. 011001, 2011.
- [24] T. Bonnell, R. Sengupta, C. Chapman, and T. Goldberg, "An agent-based model of red colobus resources and disease dynamics implicates key resource sites as hot spots of disease transmission," *Ecological Modelling*, vol. 221, no. 20, pp. 2491–2500, 2010.