

Bichos que se reproducen y amontonan, y su descripción macroscópica.

Emilio Hernández-García y Cristóbal López
Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados (IMEDEA),
CSIC-Universitat de les Illes Balears, 07122 Palma de Mallorca
(Dated: 8 de abril de 2004)

En la Naturaleza y en los sistemas económicos y/o sociales, buena parte de los procesos que ocurren son intrínsecamente discretos, es decir, involucran (o podrían modelarse con) conjuntos discretos de partículas o individuos que interactúan entre sí de una determinada manera. Átomos, moléculas, proteínas, bacterias, células, animales, personas, dinero o vehículos, son ejemplos de agentes activos en estos procesos que, cuando su número es lo bastante grande, dan lugar a comportamientos colectivos que en nada recuerdan a las interacciones microscópicas individuales [1]. Muy a menudo estos fenómenos son descritos mediante ecuaciones deterministas en derivadas parciales que dan cuenta de la evolución espaciotemporal de una cantidad promedio que bien podría ser la densidad de partículas o la concentración de reactivos si estudiamos reacciones químicas. La hipótesis fundamental para que esta descripción sea correcta es que las fluctuaciones de los campos densidad o concentración sean despreciables con respecto a sus valores medios. Cuando esta condición no se da, es decir, cuando las fluctuaciones sí son importantes (lo cual tiene generalmente su origen en el propio carácter discreto de las partículas), la descripción continua determinista falla y nos hemos de servir del ordenador para simular directamente la dinámica de las partículas interactivas, y de métodos rigurosos que permitan obtener ecuaciones macroscópicas (para campos como la densidad o concentración) *estocásticas* donde las fluctuaciones sean descritas correctamente.

En este artículo ilustraremos estas ideas, sencillas pero fundamentales en física estadística, tomando como referencia e hilo conductor un modelo simple de dinámica de poblaciones recientemente analizado en [2]. Este modelo presenta un posible mecanismo, realmente minimalista, para explicar fenómenos de agrupamiento o agregación de organismos, y en donde las fluctuaciones son fundamentales. También discutiremos brevemente otro modelo, propuesto por los autores, que generaliza al anterior y en donde las partículas se organizan formando agregados según un patrón regular. El modelo de Young et al. [2], al que ellos llaman de “*bichos brownianos*” (“Brownian bugs”) considera un conjunto de partículas moviéndose al azar, es decir, realizando lo que se llama movimiento *browniano*, sin interacción entre ellas pero pudiendo en cada instante de tiempo morir o reproducirse con unas determinadas probabilidades. Las partículas se mueven en un recinto cuadrado en dos dimensiones con condiciones de contorno periódicas. Para concretar, si llamamos λ_0 a la probabilidad (por unidad de tiempo) de que los individuos se reproduzcan (dando lugar a dos bichos donde antes había uno), y β_0 a la de que mueran, nos podemos aventurar a escribir la ecuación macroscópica para la densidad de partículas, $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (\lambda_0 - \beta_0)\rho + D\nabla^2 \rho, \quad (1)$$

donde D es el coeficiente de difusión, originado por el movimiento microscópico aleatorio de las partículas, y el otro término lineal describe el crecimiento neto como la diferencia entre nacimientos y muertes. Un rápido análisis de la ecuación (1) nos dice que si los nacimientos predominan sobre las muertes, $\lambda_0 > \beta_0$, la densidad crece indefinidamente; por el contrario, si $\lambda_0 < \beta_0$, la densidad final es cero, es decir, todas las partículas mueren. El caso que va a resultar más interesante es aquél en el que se da un balance entre muertes y nacimientos, esto es, $\lambda_0 = \beta_0$. En este caso la ecuación (1) se reduce a una simple ecuación de difusión. Es bien conocido que dicha ecuación, para cualquier condición inicial y con condiciones de contorno espacialmente periódicas, da una evolución de la densidad en la que las inhomogeneidades desaparecen, llegándose a largos tiempos a una densidad constante en el sistema.

Con la ayuda del ordenador podemos conocer lo que realmente ocurre en este sistema de partículas y establecer si la ecuación para la densidad (1) lo describe correctamente. Es conveniente discretizar el tiempo pero, a diferencia de lo que ocurre con muchas simulaciones basadas en partículas, aquí no hay ningún problema en considerar el espacio continuo. El algoritmo es muy sencillo: Introducimos en el sistema una población inicial de bichos, los etiquetamos y tomamos nota de su posición (que inicialmente puede ser una distribución aleatoria) y en cada paso de tiempo realizamos los siguientes procesos:

1. Para cada individuo lanzamos un número aleatorio, η , uniformemente distribuido en el intervalo $[0, 1]$. Si λ_0 es mayor que η la partícula se reproduce dando lugar a un nuevo individuo que etiquetamos y cuya posición es la misma que la de la partícula *madre*. En caso contrario, el individuo muere y lo eliminamos del sistema. Nótese que con esto estamos escogiendo unidades de tiempo de forma que $\lambda_0 + \beta_0 = 1$.
2. Una vez realizado el paso anterior para cada bicho (o una vez en promedio para cada bicho, ver [3]), cada uno de ellos efectúa un desplazamiento al azar. Para ello generamos para cada uno un vector, (g_i^x, g_i^y) , de números

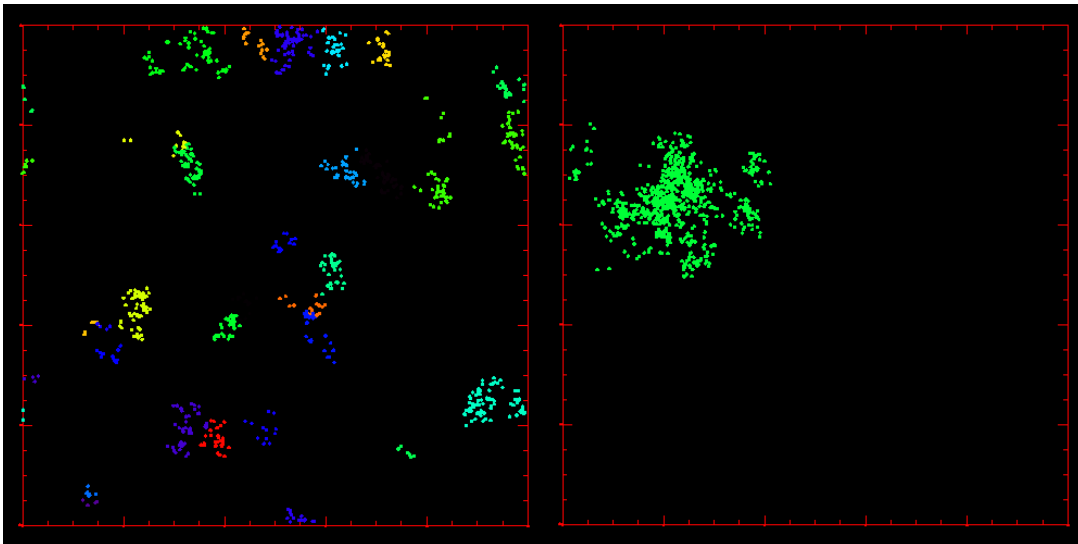


FIG. 1: Distribución de partículas para el modelo de los bichos brownianos después de 53 pasos por partícula (panel izquierdo; hay 890 partículas de 30 familias diferentes, identificadas por los distintos colores) y 1000 pasos por partícula (panel derecho; hay 760 partículas de una única familia). Inicialmente en el sistema había 1000 individuos. $\lambda_0 = \beta_0 = 0.5$, y $D = 1.25 \cdot 10^{-5}$ en las unidades en las que la extensión lateral del sistema es 1.

aleatorios distribuidos según gaussianas normalizadas [4]. La posición de la partícula i es actualizada de la siguiente forma: $(x_i(t+1), y_i(t+1)) = (x_i(t), y_i(t)) + \sqrt{2D}(g_i^x(t), g_i^y(t))$. Así cada bicho ejecuta movimiento browniano asociado a un coeficiente de difusión D .

Con la población resultante y sus nuevas posiciones, el proceso se repite un número elevado de veces. Después, podemos comparar lo que sale de la simulación numérica con lo que predice la ecuación de densidad (1). Se observa que en los casos $\lambda_0 < \beta_0$ y $\lambda_0 > \beta_0$ (1) describe de manera esencialmente correcta lo que ocurre (aunque la simulación de partículas presenta fuertes fluctuaciones superpuestas al comportamiento determinista de (1)). Desavenencias realmente importantes aparecen en el punto crítico $\lambda_0 = \beta_0$. En la parte izquierda de la figura 1 mostramos la distribución espacial de las partículas después de 53 pasos de tiempo por partícula, cuando $\lambda_0 = \beta_0 = 0.5$, $D = 1.25 \cdot 10^{-5}$, y con un número inicial de 1000 individuos.

La distribución que se muestra en la figura es claramente no homogénea. Además, la inhomogeneidad parece incrementarse en el tiempo (el panel derecho es para un tiempo de 1000 pasos por partícula), lo que indica que no está bien descrita por la solución de la ec. (1) cuando $\lambda_0 = \beta_0$. La explicación de la inhomogeneidad espacial es bastante sencilla, y nos la clarifican los colores de los bichos: cada color identifica los miembros de un mismo linaje o familia, es decir, los descendientes de uno de los bichos presentes inicialmente. Vemos que los agregados de partículas son agregados familiares: los bichos pueden morir en cualquier sitio, pero al reproducirse los recién nacidos se sitúan junto a su partícula progenitora. Esto hace que siempre haya un exceso de partículas allá donde ya hay otras partículas. El amontonamiento no es debido a ninguna interacción atractiva, sino simplemente a que, durante su tiempo de vida (β_0^{-1}), es más probable que los bichos estén todavía cerca de su madre que no muy lejos (de hecho estarán predominantemente dentro de una distancia $\sqrt{2D\beta_0^{-1}}$). Con ello, las fluctuaciones en la distribución inicial de partículas se amplifican en el tiempo. Este sencillo mecanismo de agregación estará presente en prácticamente cualquier modelo en que la descendencia nazca junto a los padres, y sin embargo está totalmente ausente de la descripción dada por la ecuación (1).

Dos lecciones fundamentales se pueden aprender de este modelo. La primera, de carácter general, es que las simulaciones por ordenador revelan que las fluctuaciones de un sistema de partículas discreto pueden ser realmente importantes y que, por lo tanto, una descripción continua correcta debería siempre incluirlas; la segunda, más orientada a problemas ecológicos, es que con un mecanismo realmente sencillo de reproducción y muerte se pueden obtener patrones de agregación. Se ha argumentado que no es tan artificioso el hecho de tomar en el modelo $\lambda_0 = \beta_0$, ya que para muchos organismos vivos desarrollándose en su medio natural, la tendencia al crecimiento y la existencia de recursos limitados llevará la población hasta ese estado de equilibrio. Sin embargo sería deseable que el equilibrio apareciera en el modelo gracias a la autoorganización interna del sistema, y no por mantener los parámetros en los valores del punto crítico $\lambda_0 = \beta_0$. Siguiendo, como alumnos aplicados, las dos lecciones que nos enseña este ejemplo, seguidamente esbozaremos cómo escribir las ecuaciones de densidad correctas y, atendiendo a sus aplicaciones

biológicas, cómo generalizar el modelo para hacerlo algo más realista.

Hace ya algún tiempo que se conocen métodos para obtener correctamente descripciones macroscópicas de sistemas *clásicos* (esto es, no cuánticos) de partículas fuera del equilibrio. Uno de los más interesantes es el uso de técnicas matemáticas propias del formalismo de la segunda cuantización de la Teoría Cuántica de Campos [5]. En el modelo que tratamos el proceso sería, sin entrar en detalles, el siguiente: Primero, es conveniente suponer el espacio discretizado, y el tiempo una variable continua. Idealmente, tenemos que las partículas se mueven saltando al azar por los nudos de una red; la dinámica de este sistema se describe entonces mediante una ecuación maestra que gobierna la evolución temporal de las probabilidades $P(\alpha, t)$ de que el sistema esté en el *microestado* α en el instante de tiempo t ; por microestado entendemos el número de individuos que hay en cada uno de los nodos de la red, es decir, en una red de N nodos: $\alpha = (n_1, n_2, \dots, n_N)$. Esta ecuación maestra tiene la forma:

$$\frac{dP(\alpha, t)}{dt} = \sum_{\beta} W(\beta \rightarrow \alpha)P(\beta, t) - \sum_{\beta} W(\alpha \rightarrow \beta)P(\alpha, t). \quad (2)$$

Donde $W(\alpha \rightarrow \beta)$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo de la configuración α a la β , determinada por el coeficiente de difusión y por las probabilidades de morir y reproducirse. El siguiente paso es construir un espacio de Fock con sus operadores de creación y destrucción con reglas de conmutación bosónicas (permitimos ocupación múltiple en los nodos de la red) y definir un *vector estado* del sistema como sigue:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} P(n_1, n_2, \dots, t) (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} \dots |0\rangle. \quad (3)$$

Usando la ecuación maestra (2) podemos obtener una ecuación de evolución para el vector estado del tipo de la de Schrödinger, $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -H|\psi(t)\rangle$, donde el “Hamiltoniano” H viene escrito en función de los operadores de creación y destrucción. El hecho de que ese “Hamiltoniano” no resulte hermítico, y el que en la ecuación de “Schrödinger” no aparezca la unidad imaginaria nos recuerda que, aunque el formalismo parezca cuántico, estamos tratando con un sistema de partículas clásicas. Ello no es obstáculo para que a partir de H y usando una representación en términos de integrales de camino se pueda escribir la acción del sistema y finalmente, con algunas manipulaciones que incluyen el retorno al espacio continuo, encontrar una ecuación estocástica o de Langevin para la evolución del campo asociado a los operadores de destrucción que contiene toda la información sobre la dinámica del sistema (detalles en [5]). Dado que el valor esperado de ese campo coincide con el valor esperado de la densidad del sistema de partículas, lo denominaremos $\rho(\mathbf{x}, t)$ y la ecuación es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = (\lambda_0 - \beta_0)\rho + D\nabla^2\rho + \sqrt{2\lambda_0\rho}\eta, \quad (4)$$

donde η es un ruido blanco Gaussiano de media cero y con correlaciones $\langle \eta(\mathbf{x}, t)\eta(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(t - t')$ (para los entendidos, esta ecuación ha de ser interpretada en el sentido de \hat{I} to). Está claro ahora que en (1) faltaban las fluctuaciones dadas por el último término en la ecuación (4). Es importante darse cuenta que este término de ruido es de los llamados del tipo de “ruido multiplicativo”, ya que está acoplado al propio campo de densidad. Físicamente esto tiene una interpretación sencilla y directa: en el modelo de bichos, en donde no haya partículas no habrá ninguna fluctuación que pueda hacer nacer nuevas. Y eso está bien representado en la ecuación (4), en la que las fluctuaciones son nulas donde $\rho = 0$. Además las fluctuaciones son mayores donde ρ es grande, lo que representa correctamente el mecanismo responsable de la agregación familiar de los bichos brownianos. En el marco de la Mecánica Estadística del No-Equilibrio, ecuaciones de este tipo han sido ampliamente estudiadas (véase por ejemplo [6]), en particular las características de las transiciones de fase a estados absorbentes (el estado en que todos los bichos han muerto es alcanzable, pero una vez en él ya no es posible ningún cambio: absorbe la dinámica), que en muchos casos son de segundo orden y presentan, por lo tanto, propiedades universales.

Hasta ahora nos hemos centrado en aclarar por qué es necesario una derivación *rigurosa* de la descripción continua (es decir, en términos de campos que pueden estar relacionados con la densidad) de sistemas de partículas. En lo que sigue nuestra motivación se orientará a los fenómenos de agregación de individuos en dinámica de poblaciones. El modelo de los bichos brownianos presenta a nuestro entender dos grandes carencias: Por una parte no hay interacción alguna entre los individuos, lo cual no es muy realista. Eso tiene varias consecuencias, entre ellas una que el lector avezado ya habrá descubierto: la evolución temporal del número de bichos es totalmente independiente de que sean brownianos o no. Si las se partículas de dejan quietas, o se las mueve de cualquier manera, su evolución demográfica se mantiene intacta, sólo su distribución espacial se altera. En un sistema biológico normal, uno espera un acoplamiento fuerte entre la distribución espacial de los individuos y sus ritmos de reproducción y fallecimiento. Esa evolución demográfica, independiente del movimiento de los bichos, es precisamente la estudiada por Galton y Watson a finales del siglo XIX para explicar la extinción de apellidos observada en los registros civiles [7]. De hecho la figura 1 muestra

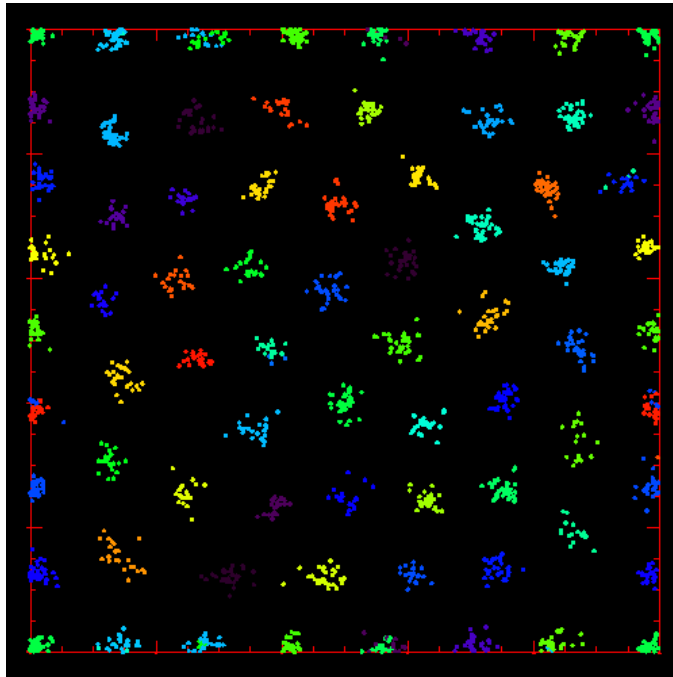


FIG. 2: Distribución de partículas a largos tiempos (100 steps por partícula) para el modelo tribal. Hay 1935 partículas de 58 familias distintas (dando lugar a los diferentes colores). $\lambda_0 = 0.7$, $\beta_0 = 0.3$, $a_1 = 1/30$, $D = 1.25 \cdot 10^{-5}$ y $R = 0.01$ en las unidades en que la extensión lateral del sistema es 1.

gráficamente el resultado de Galton y Watson de que la dinámica de reproducción y muerte a ritmos constantes lleva inevitablemente a la disminución en el número de linajes, con un número creciente de individuos en las familias que sobreviven. En promedio, la población esperada se mantiene constante, pero eso es sólo al promediar sobre diferentes historias. En cada evolución concreta, la extinción en un tiempo finito (pero creciente con el número de partículas) es un suceso seguro. Este es el segundo problema del modelo: la imposibilidad de alcanzar con él un estado no trivial estadísticamente estacionario a largos tiempos, aún cuando artificialmente se está manteniendo el sistema en un estado de igualdad entre el ritmo de nacimientos y el de muertes $\lambda_0 = \beta_0$.

Por todo ello, recientemente los autores hemos presentado un modelo que generaliza el de los bichos aleatorios mediante la introducción de interacciones entre los individuos [8]. La dinámica es de nuevo muy sencilla: como antes, cada partícula se mueve aleatoriamente y a cada paso de tiempo se reproduce o muere con determinadas probabilidades. Pero estas probabilidades, y aquí viene la diferencia, dependen del número de individuos que la rodean (están a una distancia menor a un radio determinado, R). Esto es, si $\lambda(j)$ y $\beta(j)$ son las probabilidades de reproducción y muerte, respectivamente, del individuo j -ésimo, entonces se tiene que $\lambda(j) = \lambda_0 - a_1 N_R^j$, y $\beta(j) = \beta_0 - a_2 N_R^j$. Los a_i son constantes positivas, así como λ_0 y β_0 ; N_R^j es el número total de individuos que están a una distancia menor que R de la partícula j . En lo que sigue sólo discutiremos el caso $a_2 = 0$, de modo que el modelo penaliza la reproducción cuando el entorno de las partículas está densamente poblado. Simulando en el ordenador esta dinámica en dos dimensiones se obtiene, en un rango amplio de valores para los parámetros del sistema [8] la distribución de partículas de la figura 2.

Aquí se observa que el efecto más notable de la introducción de interacciones con una escala espacial característica, R , es la segregación de los individuos en grupos ordenados de manera espacialmente periódica. Como antes, cada agregado de individuos pertenece a la misma familia. Podemos llamar al modelo *modelo tribal*, pues los individuos se agrupan en clanes familiares que guardan las distancias unos con otros. A diferencia del caso de los bichos brownianos, el patrón mostrado en la figura 2 es estadísticamente estacionario, de manera que el sistema se ha autoorganizado en un número de agregados constante en el tiempo (sin necesidad de un ajuste fino de los parámetros). Además, dada la existencia de la interacción no local, cualquier cambio o influjo del entorno como puede ser la presencia de un flujo externo del fluido en el que estén inmersas las partículas, altera notablemente la evolución demográfica [8]. La pregunta que sigue es obvia continuando con la línea de este artículo: ¿Es posible una descripción continua correcta de esta nueva dinámica? La respuesta es que sí, aunque no todos los pasos se pueden llevar a cabo de manera exacta como ocurría con el modelo de bichos brownianos. La ecuación para el campo asociado a la densidad es ahora más complicada: es una ecuación estocástica integro-diferencial con ruido multiplicativo y correlaciones no-locales (veáanse

detalles en [8]). Las fluctuaciones también son importantes en este sistema, pero, por así decirlo, no tanto como en el de los bichos aleatorios. Con esto queremos decir que son más o menos cruciales dependiendo de qué propiedades se quieran analizar. Así por ejemplo, la distribución espacial de las partículas en grupos distribuidos según un patrón aproximadamente hexagonal, como se ve en la figura 2, es un fenómeno determinista donde el papel de las fluctuaciones es irrelevante (eso lo sabemos porque el mismo fenómeno aparece en la ecuación continua cuando se le quita el término de ruido). Por el contrario, el valor de los parámetros del modelo para los cuales se dan transiciones entre la extinción de toda la población o su supervivencia sí depende fuertemente de las fluctuaciones. La menor influencia de las fluctuaciones aquí era de esperar dado que ahora no se mantiene el sistema en un punto crítico.

Resumiendo, modelos estocásticos de sistemas de partículas interaccionantes permiten representar una gran variedad de procesos microscópicos que se dan entre entidades discretas. La facilidad con la que estos modelos se implementan en el ordenador permite obtener resultados sobre el comportamiento colectivo del sistema y sus propiedades emergentes. Aquí hemos visto a modo de ejemplo la aparición de agregados, la segregación de linajes, y la formación de estructuras espacialmente periódicas. Además existen técnicas para representar correctamente esta dinámica de partículas discretas en términos de campos continuos, forma ésta en general más accesible a estudios analíticos.

-
- [1] Hay muchas referencias generales sobre el comportamiento de *sistemas de partículas interaccionantes*. Citamos como buen ejemplo el libro de J. Marro y R. Dickman, *Nonequilibrium phase transitions in lattice models* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998).
- [2] W.R. Young, A.J. Roberts, G. Stuhne, *Reproductive pair correlations and the clustering of organisms*. Nature **412**, 328 (2001). Como ocurre frecuentemente, en este artículo se redescubren bastantes resultados ya establecidos (Y-C. Zhang, M. Serva, M. Polikarpov, J. Stat. Phys. **58**, 849 (1990); R. Adler en *Monte Carlo simulation in oceanography*, Proceedings of the 10th 'Aha Huliko'a Hawaiian Winter Workshop, University of Hawaii at Manoa (1997); otro artículo relacionado es N.M. Shnerb, Y. Louzoun, E. Bettelheim, S. Solomon, Proc. Nat. Acad. Sci. **97**, 10322 (2000)). Sin embargo, el artículo de Young et al. es especialmente claro para las ideas que queremos enfatizar aquí.
- [3] En modelos generales, el orden en que se visitan las partículas puede alterar los resultados. Nosotros siempre usamos lo que se conoce como actualización asíncrona, escogiendo a cada paso una partícula al azar, en lugar de visitarlas en orden o de actualizarlas todas al mismo tiempo (actualización síncrona). Sin embargo, el modelo de bichos brownianos es tan sencillo que los diversos protocolos de actualización no alteran los resultados.
- [4] Veanse las excelentes discusiones sobre generación de variables aleatorias aparecidas en estas páginas: R. Toral, *Los números aleatorios en Sevilla son una maravilla*, Revista Española de Física **16**, 58 (2002); S. Bravo Yuste Héctor Sánchez-Pajares *Una función random poco aleatoria*, Revista Española de Física **16**, 60 (2002).
- [5] M. Doi, *Second Quantization Representation for Classical Many-Particles System*, J. Phys. **A 9**, 1465 (1979); L. Peliti, *Path Integral Approach to Birth-Death Processes on a Lattice*, J. Physique **46**, 1469 (1985). Referencias más recientes con buenas descripciones del formalismo son: J. Cardy, en *The Mathematical Beauty of Physics*, editado por J. M. Drouffe y J. B. Zuber (World Scientific, Singapore, 1996); L. Pechenik, H. Levine, Phys. Rev. E **59**, 3893 (1999); E. Bettelheim, O. Agam, N.M. Shnerb, Physica E **9**, 600 (2001).
- [6] G. Grinstein, M.A. Muñoz, en *Fourth Granada Lectures in Computational Physics*, editado por P.L. Garrido y J. Marro (Springer, Berlin, 1997).
- [7] F. Galton, *Problem 4001: On the extinction of surnames*, Educational Times **1**, 17 (1873); H.W. Watson, *On the probability of the extinction of families*, Journal of the Anthropological Institute **4**, 138 (1875), accesible en <http://www.mugu.com/galton/hereditarian.html>. Ver también el capítulo XVII de W. Feller, *Introducción a la Teoría de la Probabilidad y sus Aplicaciones*, Vol. I (Limusa, Mexico, 1973).
- [8] E. Hernández-García and C. López, *Clustering, advection and patterns in a model of population dynamics with neighborhood-dependent rates*, e-print cond-mat/0310384. Accesible también en http://www.imedea.uib.es/physdept/publications/showpaper_en.php?indice=862