

Juegos paradójicos y máquinas térmicas brownianas

Paradoxical games and Brownian thermal engines

Juan M.R. Parrondo y Borja Jiménez de Cisneros.
Dep Física Atómica, Molecular y Nuclear
Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid, Spain.

16 de febrero de 2000

Resumen

Dos juegos de azar en los que el jugador tiende a perder, dan lugar, cuando se alternan periódica o aleatoriamente, a un juego en el que la tendencia es ganadora. Se trata de una paradoja que ocurre en sistemas aleatorios: si se combinan dos o más dinámicas en las que una cierta cantidad decrece, el resultado puede ser una dinámica en la que dicha cantidad crece. La paradoja puede tener aplicaciones en una gran variedad de sistemas estocásticos y está despertando cierto interés en diferentes campos científicos. En este trabajo mostramos cómo se puede utilizar el fenómeno para construir *motores brownianos* o *moleculares*, es decir, máquinas térmicas que funcionan rectificando fluctuaciones. Hacemos una breve revisión de la literatura sobre motores moleculares y discutimos cómo una Termodinámica de motores brownianos será básica para entender la mayoría de los procesos de conversión de energía en Biología Molecular.

Abstract

Two games in which the player has a tendency to lose, when alternated in a random or periodic way, a game with a winning tendency. This paradox occurs in a family of stochastic processes: if one combines two or more dynamics where a given quantity decreases, the result can be a dynamic system where this quantity increases. The paradox could be applied to a variety of stochastic systems and has drawn the attention of researchers from different areas. In this paper we show how the phenomenon can be used to design *Brownian* or *molecular motors*, i.e., thermal engines which work rectifying fluctuations. We briefly review the literature on Brownian motors, pointing out that a new Thermodynamics of Brownian motors will be fundamental to understand most processes of energy transduction in Molecular Biology.

1 Juegos paradójicos

Supongamos que tengo una moneda ligeramente sesgada, de modo que la probabilidad de obtener “cara” al lanzarla al aire sea $1/2 - \epsilon$, en donde ϵ es un número pequeño y positivo. Con ella, a la que denominaremos moneda 1, le ofrezco jugar del siguiente modo: cada vez que salga cruz le doy mil pesetas y cada vez que salga cara usted me da mil pesetas a mí. Si usted dispone de un capital ilimitado, debería aceptar sin dudarle un momento: si $x(t)$ es lo que llevo ganado después de jugar t veces, no le será difícil demostrar que el valor medio de esta ganancia, $\langle x(t) \rangle$, es una función estrictamente decreciente de t (mientras que *su* ganancia es estrictamente creciente con t).

Ahora le propongo un segundo juego que utiliza dos monedas, que llamaremos 2 y 3. La moneda 3 se lanza cuando lo que llevo ganado es múltiplo de tres y la moneda 2 en el resto de los casos (recuerde que la ganancia puede ser negativa; por múltiplo de tres entendemos cualquier número entero que se pueda escribir como $3n$ con n entero). La probabilidad de que yo gane con la moneda 2 es $p_2 = 3/4 - \epsilon$ y con la moneda 3, $p_3 = 1/10 - \epsilon$, tal y como se muestra en la figura 1. El análisis de este segundo juego no es tan simple como en el caso anterior. Sin embargo, puede demostrarse (ver cuadro 1 y figura 1) que el juego es también favorable para usted, en el sentido de que el valor medio de mi ganancia $\langle x(t) \rangle$ es de nuevo una función estrictamente decreciente de t . Llamemos A al primero de los juegos que hemos descrito y B al segundo.

Una vez que está usted convencido de que yo pierdo en ambos juegos, le haré una tercera proposición: alternemos los dos juegos con la secuencia AABBAABB... Si usted frunce el ceño, puedo modificar ligeramente la propuesta para hacerla menos sospechosa: en cada turno, elijamos al azar cuál de los dos juegos jugamos.

Si acepta cualquiera de estas dos propuestas habrá confiado demasiado en su intuición, sin tener en cuenta que los sistemas aleatorios, aún tan simples como los que hemos descrito, pueden comportarse de manera sorprendente.

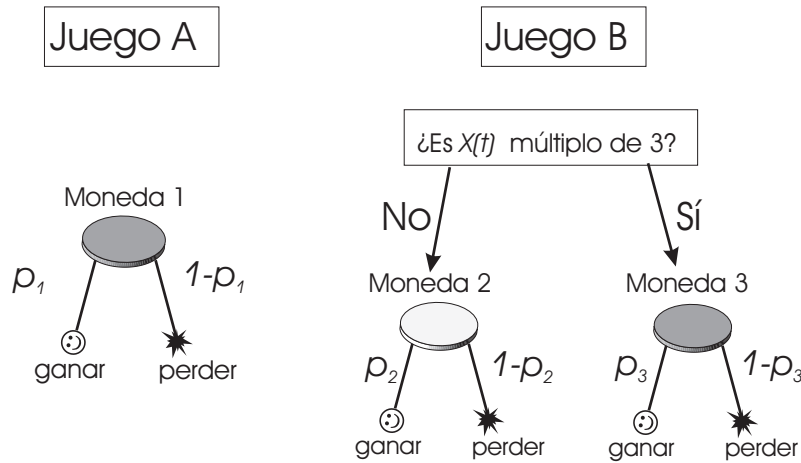


Figura 1: Reglas de los juegos A y B. Los valores de las probabilidades son: $p_1 = 1/2 - \epsilon$, $p_2 = 3/4 - \epsilon$ y $p_3 = 1/10 - \epsilon$, con ϵ un número pequeño y positivo, que favorece en todos los casos la opción “perder”. El color más claro de la moneda 2 indica que en esta moneda la probabilidad de ganar es mayor que $1/2$ y que, por tanto, se trata de una moneda favorable.

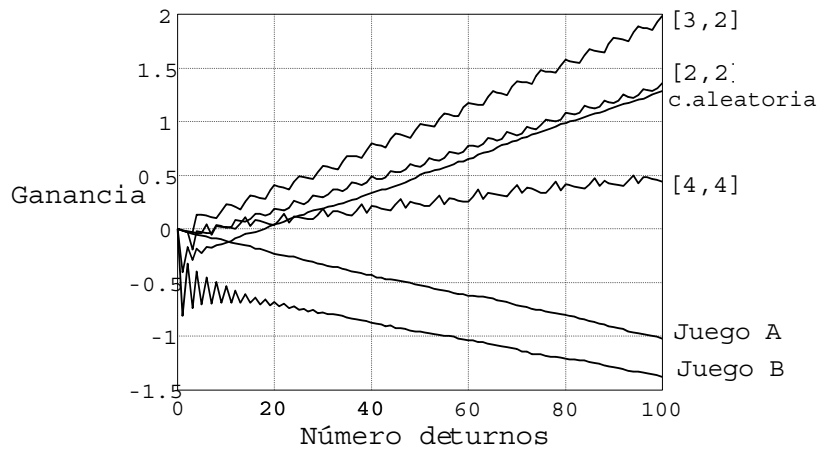


Figura 2: Ganancia media (sobre 5 000 jugadores), en función del número de turnos, en cada uno de los juegos y en varias de sus combinaciones, incluyendo la combinación aleatoria. En todos ellos $\epsilon = 0.0005$ y se ha utilizado la notación $[a, b]$ para indicar que se juega a turnos al juego A seguidos de b turnos del juego B y así sucesivamente. La combinación aleatoria no difiere mucho de la combinación $[2, 2]$, es decir, la combinación AABBAA...(Figura tomada de [5]).

En efecto, tanto si alternamos los juegos formando una secuencia fija, AABBAABB..., como si lo hacemos de forma aleatoria, el resultado es que mi ganancia media $\langle x(t) \rangle$ es una función *estrictamente creciente* de t . La figura 1 muestra mi ganancia en distintas situaciones: juegos A y B por separado, varias combinaciones periódicas y la combinación aleatoria.

2 Análisis detallado de los juegos

El fenómeno descrito en la sección anterior se conoce como *Paradoja de Parrondo*, está recibiendo cierta atención [5, 6] y se piensa que puede tener aplicaciones en distintos ámbitos, como economía o teoría de la evolución. Es cierto que el fenómeno puede aparecer en cualquier situación en la que se combinen dos o más dinámicas aleatorias. Sin embargo, hasta ahora no se ha descrito ninguna situación real en la que tenga lugar la paradoja.

Veamos cómo pueden analizarse estos juegos paradójicos. El juego B, así como la combinación aleatoria de A y B, puede reducirse a una *cadena de Markov* de tres estados [7]. Estos tres estados son: ganancia igual a un múltiplo de 3, a un múltiplo de 3 más 1, o a un múltiplo de 3 más 2. La variable que determina estos tres estados es

$$y \equiv x \pmod{3} \tag{1}$$

que puede tomar sólo tres valores: 0, 1 o 2. El análisis de esta cadena de Markov se puede realizar diagonalizando una matriz 3 por 3 (ver cuadro 1).

Este análisis nos proporciona la siguiente explicación intuitiva de la paradoja. El juego B utiliza dos monedas: una "mala", la moneda 3, y otra "buena", la moneda 2. Cuando se juega sólo el juego B, la probabilidad de utilizar la moneda 3 es:

$$\pi_0 = \frac{5}{13} - \frac{440}{2197}\epsilon + \dots \tag{2}$$

en donde hemos depreciado término de orden ϵ^2 para simplificar la exposición. Obsérvese también que la probabilidad π_0 no es $1/3$, como se podría pensar en un principio, sino mayor. La probabilidad de ganar es por tanto:

$$P_{\text{ganar}} = \pi_0 p_3 + (1 - \pi_0) p_2 = \frac{1}{2} - \frac{147}{169} \epsilon + \dots \quad (3)$$

que es menor que $1/2$ para cualquier ϵ positivo. Sin embargo, cuando combinamos aleatoriamente los juegos A y B, la probabilidad con la que jugamos la moneda 3 pasa a ser:

$$\pi'_0 = \frac{245}{709} - \frac{48880}{502681} \epsilon + \dots \quad (4)$$

que es menor que π_0 . La probabilidad de ganar es ahora:

$$P'_{\text{ganar}} = \pi'_0 \frac{p_3 + p_1}{2} + (1 - \pi'_0) \frac{p_2 + p_1}{2} = \frac{727}{1418} - \frac{486795}{502681} \epsilon + \dots \quad (5)$$

que es mayor que $1/2$ si ϵ es suficientemente pequeño. Lo que ocurre por tanto es que el juego A, a pesar de consistir en una única moneda “mala”, redistribuye las frecuencias con las que se juegan las dos monedas del juego B haciendo que la moneda “buena” se utilice un mayor número de veces. Esta es la esencia de la paradoja: la tendencia ganadora está ya en el juego B, pero cuando éste se juega aisladamente la tendencia perdedora es dominante; el papel del juego A es invertir esta dominancia. A pesar de que el juego A es perdedor, el efecto de potenciar la moneda “buena” del juego B es mayor que la propia tendencia perdedora de A y el resultado neto es que la combinación de A y B es ganadora.

3 Un motor browniano sencillo

¿Qué tiene que ver todo lo anterior con la Física? Aunque la paradoja pertenece ya a la teoría de la probabilidad, originalmente fue inspirada por un sistema físico: un motor browniano o motor molecular [2, 14].

Con una pequeña variación en las probabilidades de ganar y perder, los juegos descritos en las secciones anteriores pueden interpretarse como una partícula browniana en una dimensión sometida a ciertos potenciales.

Consideremos el siguiente modelo de partícula browniana unidimensional, en el que ésta puede ocupar un conjunto discreto de posiciones $x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. La partícula salta de forma probabilística de unas posiciones a otras en instantes de tiempo también discretos, $t = 0, 1, 2, \dots$. Supondremos que la partícula está sometida a un cierto potencial $V(x)$, periódico en x con periodo 3, es decir $V(x+3) = V(x)$. El potencial está entonces definido sólo por los tres valores: $V(0)$, $V(1)$ y $V(2)$, que denotaremos V_0 , V_1 y V_2 respectivamente. Tomaremos $V_0 = 0$, $V_1 = V$ y $V_2 = V/2$, de modo que el potencial es asimétrico (ver figura 3). Finalmente, la partícula está también sometida a una fuerza externa F dirigida hacia la izquierda. La energía en cada punto x es entonces:

$$E(x) = V(x) + Fx \quad (6)$$

¿Cómo se mueve esta partícula browniana a una cierta temperatura T ? Cuando un sistema físico está a temperatura T y puede encontrarse en distintos estados i con energías

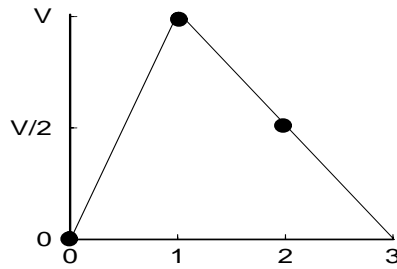


Figura 3: Potencial al que está sometida la partícula browniana descrita en el texto.

E_i , su evolución se describe mediante una cadena de Markov [8]. Su dinámica viene dada por la probabilidad $p_{i \rightarrow j}$ de saltar de un estado i a otro j . Estas probabilidades deben verificar la *condición de balance detallado* y una de las dinámicas que la verifican es el llamado *algoritmo de Metropolis* (ver cuadro 2), utilizado en las simulaciones Monte-Carlo de sistemas en equilibrio a una cierta temperatura [8].

Cuando nuestra partícula browniana evoluciona siguiendo el algoritmo de Metropolis con temperatura finita T , la posición $x(t)$ se comporta de forma parecida a la ganancia en el juego B. Por otro lado, si el algoritmo de Metropolis se hace a temperatura muy alta, el sistema es muy parecido al juego A. En ambos casos, la fuerza externa cumple el mismo papel que el parámetro ϵ de los juegos.

Estas analogías nos indican cómo reproducir la paradoja en el comportamiento de la partícula browniana. A cualquier temperatura finita, la partícula se mueve hacia la izquierda, ya que es en esa dirección hacia donde apunta la fuerza externa F . Por tanto, el valor medio de $x(t)$ decrece con t . Sin embargo, si alternamos dos temperaturas distintas, T_1 y T_2 , la partícula, se mueve hacia la derecha, en contra de la fuerza externa. Es decir, $\langle x(t) \rangle$ crece. De nuevo dos dinámicas en donde $\langle x(t) \rangle$ decrece dan lugar, cuando se combinan, a una dinámica en donde $\langle x(t) \rangle$ crece. El fenómeno es patente en la figura 4, en donde mostramos la posición de la partícula en función del tiempo, obtenida mediante simulación numérica, para dos temperaturas, $T_1 = 1$ y $T_2 = 0.3$, y para la alternancia $T_1 T_1 T_2 T_2 T_1 T_1 \dots$.

Aún más interesante es comprobar que la partícula es una máquina térmica. Consideremos una alternancia periódica del tipo $T_1 T_1 T_2 T_2 T_1 T_1 \dots$, es decir, ponemos a la partícula en contacto con un baño térmico a temperatura T_1 durante dos pasos de tiempo, a continuación en contacto con un segundo baño a T_2 durante otros dos pasos de tiempo, y así sucesivamente. Supondremos también que $T_1 > T_2$. Tenemos por tanto un sistema que está en contacto con dos baños térmicos a distintas temperaturas, de forma análoga a los ciclos conocidos de las máquinas térmicas clásicas. Pues bien, la partícula se comporta exactamente igual que una máquina térmica: extrae energía del foco caliente, realiza trabajo en contra de la fuerza externa y disipa parte de la energía extraída al foco frío en forma de calor.

Veamos cómo estudiar la energética de esta máquina de un modo cuantitativo.

En un cierto paso $t \rightarrow t + 1$, en el que la partícula está en contacto, por ejemplo, con

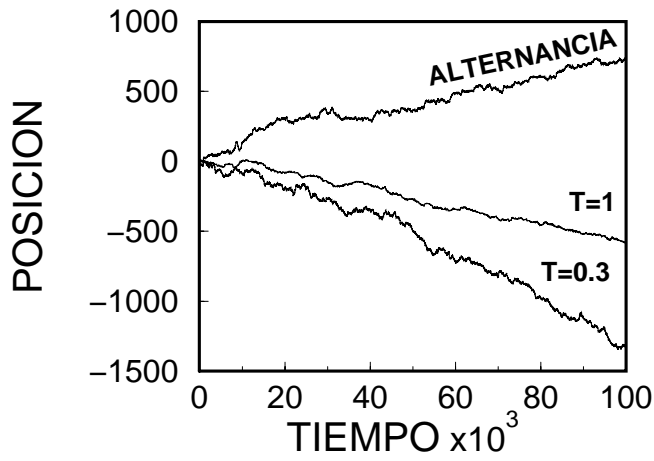


Figura 4: Posición de la partícula browniana para dos temperaturas, $T_1 = 1$ y $T_2 = 0.3$, y para la alternancia $T_1 T_1 T_2 T_2 T_1 T_1 \dots$. Al igual que en los juegos (fig. 1), se aprecia con claridad la inversión del movimiento cuando se alternan las dos temperaturas.

el baño 1, la energía que pasa del baño a la partícula es:

$$Q_{t \rightarrow t+1}^{(1)} = \sum_{x=-\infty}^{\infty} [\pi_x(t+1) - \pi_x(t)] (V(x) + Fx) \quad (7)$$

en donde $\pi_x(t)$ es la probabilidad de que la partícula se encuentre en el punto x en el tiempo t . El segundo miembro de la ecuación (7) puede descomponerse en dos términos:

$$Q_{t \rightarrow t+1}^{(1)} = \Delta \mathcal{U}_{t \rightarrow t+1} - W_{t \rightarrow t+1}. \quad (8)$$

El primero de ellos es $\Delta \mathcal{U}_{t \rightarrow t+1} = \mathcal{U}(t+1) - \mathcal{U}(t)$, en donde $\mathcal{U}(t)$ es la energía interna del sistema:

$$\mathcal{U}(t) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} \pi_x(t) V(x) = \langle V(x(t)) \rangle \quad (9)$$

El segundo término es el cambio de energía asociado a la fuerza externa F , es decir, el trabajo que dicha fuerza realiza sobre la partícula:

$$W_{t \rightarrow t+1} = -F \langle v(t) \rangle \quad (10)$$

en donde $\langle v \rangle \equiv \langle x(t+1) \rangle - \langle x(t) \rangle$ es la velocidad media de la partícula. La ecuación (10) tiene así una interpretación sencilla: el trabajo realizado por la fuerza sobre la partícula en la unidad de tiempo o *potencia* desarrollada por la fuerza, es el producto de la fuerza por la velocidad media de la partícula. El signo menos proviene de que la fuerza está dirigida hacia la izquierda.

Las tres cantidades definidas, energía interna, calor y trabajo están relacionadas por la ecuación (8), que no es otra cosa que el Primer Principio de la Termodinámica¹ (el

¹El tratamiento del motor puede hacerse considerando el término $-Fx(t)$ como parte de la energía interna. Con esta elección, el calor disipado en cada baño es el mismo que el calculado en el texto. Cambian sin embargo, el trabajo, que es siempre cero, y la energía interna. Esta interpretación tiene dos problemas. En primer lugar, la máquina no es estrictamente cíclica, porque la energía interna aumenta en cada ciclo. En segundo lugar, no es posible definir de forma simple el rendimiento de la máquina térmica.

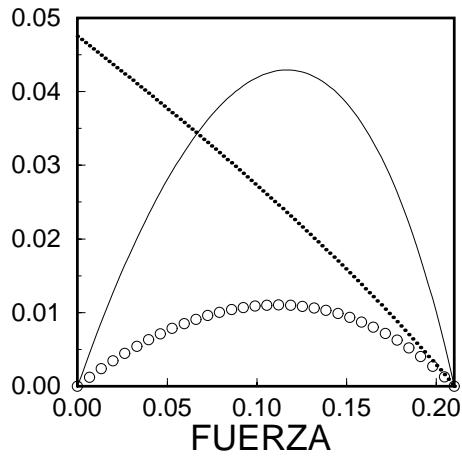


Figura 5: Rendimiento η de la máquina térmica (línea continua), trabajo W realizado en cada ciclo (círculos) y corriente de partículas (línea punteada) en función de la fuerza externa F para $T_1 = 1$, $T_2 = 0.1$ y $V = 1$.

convenio de signos que utilizamos es el habitual en Física, según el cual tanto el calor como el trabajo son positivos si entra energía en el sistema).

El mismo tratamiento se aplica a los pasos de tiempo en donde el sistema está en contacto con el baño 2. Cuando se alternan los dos baños en un ciclo de cuatro pasos, $T_1 T_1 T_2 T_2 \dots$, el sistema, tras un cierto número de ciclos, alcanza un régimen en el que la energía interna y la velocidad media son periódicas en el tiempo. En este régimen se puede calcular el calor extraído de cada baño y el trabajo total realizado por la fuerza. El tratamiento analítico es análogo al realizado para los juegos y se basa en una cadena de Markov de tres estados. No vamos a incluir aquí los detalles del cálculo, pero sí alguno de los resultados que pueden obtenerse. Aplicando la ecuación (7) a los dos primeros pasos del ciclo, se calcula la energía Q_1 transferida del baño 1 al sistema, que es positiva si $T_1 > T_2$. Sin embargo, al aplicar la misma ecuación a los dos últimos pasos del ciclo obtenemos una energía Q_2 negativa, y, si F es suficientemente débil, con $W = -Q_1 - Q_2$ negativo. Este resultado nos indica que el sistema está extrayendo energía del baño caliente, disipa parte de esta energía al baño frío y utiliza el resto para realizar trabajo en contra de la fuerza externa. El rendimiento de la máquina es:

$$\eta = -\frac{W}{Q_1} = 1 + \frac{Q_2}{Q_1} \quad (11)$$

que es positivo y menor que 1.

En la figura 5 se representa el rendimiento en función de la fuerza externa F . Para fuerza nula, a pesar de existir una corriente de partículas, el rendimiento es nulo ya que la máquina no realiza trabajo alguno y, sin embargo, existe una transferencia irreversible de calor del foco caliente al frío. Para una fuerza suficientemente grande, el rendimiento vuelve a anularse. La razón es que la partícula no es capaz de moverse en contra de fuerzas grandes. Existe una fuerza para la cual la partícula está, en media, en reposo y no realiza trabajo, mientras que sigue existiendo una transferencia de calor entre el baño caliente y el frío.

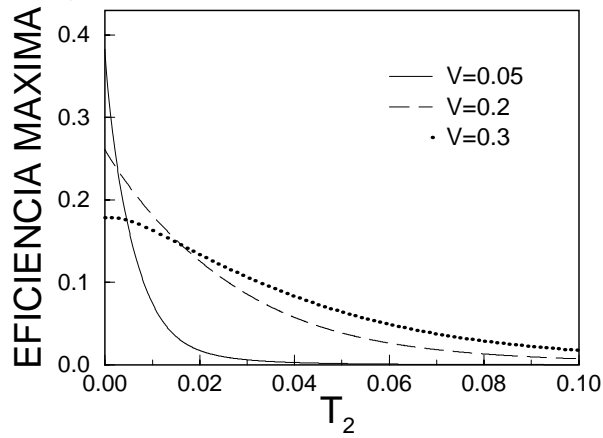


Figura 6: Rendimiento de la máquina térmica en función de la temperatura del foco frío T_2 , para $T_1 = 1$ y varios valores de V . Para cada punto, se ha tomado el valor de la fuerza externa que maximiza el rendimiento.

Como puede observarse, la máquina trabaja siempre de forma irreversible. Por ello, no puede nunca alcanzar la eficiencia de Carnot. Este es un hecho común en la mayoría de los motores brownianos [14, 13] (una excepción son las llamadas *reversible ratchets* [12], cuyo rendimiento puede ser arbitrariamente cercano al rendimiento de Carnot [13]), incluida la conocida *ratchet* de Feynman [4]. Conviene destacar que el propio Feynman no advirtió la irreversibilidad intrínseca de su máquina térmica y demostró que, bajo ciertas hipótesis, la máquina era capaz de alcanzar el rendimiento de Carnot. Recientemente, se ha demostrado que tales hipótesis son incorrectas [11].

En la gráfica 6, mostramos el rendimiento de la máquina para varias temperaturas T_2 manteniendo fija T_1 . Obsérvese que el rendimiento de Carnot, $1 - T_2/T_1 = 1 - T_2$ está muy por encima de todas las curvas representadas.

4 Conclusiones

Hemos mostrado una aplicación física de los juegos paradójicos: los motores brownianos o moleculares. La denominación “motores moleculares” proviene de la Biofísica, en donde se estudian diferentes modos de conversión de energía dentro de la célula: “bombas” capaces de transportar iones de una parte a otra de una membrana biológica, en contra del gradiente electroquímico del ion [1, 3]; moléculas que avanzan a lo largo de microtúbulos transportando diverso material celular; o moléculas capaces de “tirar” de un filamento y que forman los tejidos musculares [3]. Cada uno de estos sistemas consta de una única proteína, que cambia su configuración tridimensional al hidrolizar ATP. La proteína es distinta según el sistema considerado (quinesinas en el transporte a lo largo de microtúbulos, miosinas en el tejido muscular), pero todos ellos son motores capaces de extraer la energía almacenada en los enlaces de ATP y transformarla en energía mecánica. Y esta transformación se realiza a escalas en donde las fluctuaciones térmicas son ineludibles.

Por todo ello creemos que, para entender los procesos de intercambio de energía a nivel celular, será imprescindible disponer de una auténtica Termodinámica de motores

brownianos. La Termodinámica de la que hablamos tendrá que ser, como hemos visto, una Termodinámica de procesos irreversibles en los que jueguen un papel relevante las fluctuaciones térmicas. Deberá ser distinta, por ejemplo, de la llamada Termodinámica de tiempo finito, ya que ésta estudia motores irreversibles pero de carácter macroscópico.

En estos últimos años se han dado los primeros pasos para construir esta teoría de motores moleculares. Sin embargo, salvo algunos trabajos que demuestran propiedades generales [9, 10, 11, 12, 13], la mayoría de los resultados se refieren a modelos concretos [2, 14], que son demasiado simples para reproducir el comportamiento de motores moleculares biológicos.

Finalmente, quisiéramos terminar recordando que los juegos paradójicos pueden tener aplicaciones en otras situaciones. La paradoja muestra que el resultado de alternar dos dinámicas aleatorias está lejos de ser una especie de “suma” o combinación de los efectos de cada dinámica por separado y puede ser de hecho completamente inesperado. Este resultado debería despertar el interés por situaciones de alternancia de dinámicas en sistemas físicos, biológicos y económicos.

Cuadro 1: Cadenas de Markov

Una cadena de Markov es un conjunto de N estados y una partícula que salta, en pasos discretos de tiempo y de forma probabilística, de unos estados a otros. La cadena de Markov está definida por la matriz

$$\Pi = \{p_{i \rightarrow j}\}_{i,j=1}^N$$

siendo $p_{i \rightarrow j}$ la probabilidad de que, estando la partícula en el estado i , salte al estado j . Al contrario que en la notación habitual de matrices, el primer subíndice i denotará la columna y el segundo j la fila. Puede comprobarse fácilmente que las entradas de la matriz Π son números reales entre 0 y 1 y que la suma de las entradas en cada columna debe ser igual a 1.

Llamemos $\pi_i(t)$ a la probabilidad de que la partícula esté en el estado i en el tiempo t . La probabilidad de estar en el estado i en el tiempo $t + 1$ es igual a la probabilidad de haber saltado en el paso $t \rightarrow t + 1$ desde cualquier otro sitio j (incluyendo el caso $i = j$), es decir:

$$\pi_i(t + 1) = \sum_{j=1}^N \pi_j(t) p_{j \rightarrow i} \quad (12)$$

Por tanto, la distribución de probabilidad $\vec{\pi}(t) = (\pi_1(t), \pi_2(t), \dots, \pi_N(t))$ verifica la siguiente ecuación de evolución:

$$\vec{\pi}(t + 1) = \Pi \vec{\pi}(t) \quad (13)$$

La distribución $\vec{\pi}(t)$ tiende, para t muy grande, a una distribución *estacionaria*, $\vec{\pi}^{\text{st}}$, que verifica:

$$\vec{\pi}^{\text{st}} = \Pi \vec{\pi}^{\text{st}} \quad (14)$$

es decir, $\vec{\pi}^{\text{st}}$ es el autovector de la matriz Π con autovalor 1.

La distribución estacionaria nos dice cuál es, para tiempos suficientemente largos, la probabilidad de que la partícula esté en los distintos estados $i = 1, 2, \dots, N$.

El juego B consiste en una cadena de Markov de tres estados: 0, 1 y 2. La matriz Π es:

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 - p_2 & p_2 \\ p_3 & 0 & 1 - p_2 \\ 1 - p_3 & p_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Obsérvese cómo las entradas de cada columna suman 1. La distribución de probabilidad estacionaria es:

$$\vec{\pi}^{\text{st}} = \frac{1}{Z} \left(1, \frac{p_2 p_3 + 1 - p_2}{1 - p_2 + p_2^2}, \frac{p_2 p_3 + 1 - p_3}{1 - p_2 + p_2^2} \right) \quad (16)$$

En donde Z es una constante de normalización. Finalmente, para la combinación aleatoria del juego A y el B, el análisis es idéntico, sustituyendo p_2 por $(p_2 + p_1)/2$ y p_3 por $(p_3 + p_1)/2$. A partir de la distribución de probabilidad $\vec{\pi}^{\text{st}}$, es sencillo calcular la probabilidad de ganar en un turno, tal y como se hace en el texto.

Cuadro 2: El algoritmo de Metropolis

Supongamos un sistema físico que puede estar en cualquiera de los estados $i = 1, 2, \dots, N$ con energías E_i . ¿Cuáles son las probabilidades de salto $p_{i \rightarrow j}$ que rigen la evolución probabilística del sistema cuando éste se encuentra en contacto con un baño térmico a temperatura T ?

El requisito que tienen que cumplir las probabilidades de salto es que el sistema alcance, para tiempos suficientemente largos, la distribución de Boltzmann, es decir, que su distribución estacionaria sea:

$$\pi_i^{\text{st}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i / kT} \quad (17)$$

en donde Z es una constante de normalización y $\beta = 1/kT$ con k igual a la constante de Boltzmann. Por tanto, la matriz Π de probabilidades de salto tiene que ser tal que la distribución $\vec{\pi}^{\text{st}}$ dada por (17) sea su autovector con autovalor 1 (ver cuadro 1).

Un caso particular es aquél en el que las probabilidades de salto verifican la llamada *condición de balance detallado*:

$$\pi_i^{\text{st}} p_{i \rightarrow j} = \pi_j^{\text{st}} p_{j \rightarrow i} \quad (18)$$

Un caso aún más particular es el llamado *algoritmo de Metropoli*, en el que las probabilidades de salto vienen dadas por la siguiente regla, para $i \neq j$: o bien i y j están desconectados y $p_{i \rightarrow j} = p_{j \rightarrow i} = 0$; o bien están conectados y entonces:

$$p_{i \rightarrow j} = \begin{cases} \frac{1}{C_i} & \text{si } E_j \leq E_i \\ \frac{1}{C_i} e^{-(E_j - E_i)\beta} & \text{si } E_j \geq E_i \end{cases} \quad (19)$$

siendo C_i un número tal que todas las probabilidades de salto estén entre 0 y 1 (y que suele ser igual al número de coordinación, o número de estados conectados al estado i). Finalmente, la probabilidad de saltar de i a i es:

$$p_{i \rightarrow i} = 1 - \sum_{j \neq i} p_{i \rightarrow j} \quad (20)$$

en donde la suma se extiende a todos los estados j conectados con el i . Puede comprobarse que estas probabilidades de salto verifican la condición de balance detallado.

El algoritmo de Metropolis es el que utilizaremos a lo largo del artículo para modelar una partícula en contacto con un baño térmico. Obsérvese también en (19) que existe una probabilidad no nula de que la partícula gane energía. Estos saltos son el resultado de fluctuaciones térmicas en donde un baño térmico puede ceder energía a una partícula.

Referencias

- [1] ALBERTS B., BRAY D., LEWIS J., RAFF M., ROBERTS K. y WATSON J.D., *Molecular Biology of The Cell* (Garland Publishing Inc., Nueva York, 1994) capítulos 11 y 14.
- [2] ASTUMIAN R.D. y BIER M., *Fluctuation driven ratchets: molecular motors*. Phys. Rev. Lett. **72**, 1766–1769 (1994).
- [3] COOPER G.M., *The Cell: A Molecular Approach* (Sinauer, Sunderland, Massachussets, 1997), capítulo 11.
- [4] FEYNMAN R.P., LEIGHTON R.B. y SANDS M., *The Feynman Lectures on Physics* (Addison-Wesley, Reading, Masachussets, 1963), Vol. **1**, secciones 46.1–46.9.
- [5] HARMER G.P. y ABBOTT D., *Parrondo's paradox*. Statistical Science **14**, 206–213 (1999); HARMER G.P. y ABBOTT D., *Losing strategies can win by Parrondo's paradox*. Nature **402**, 864 (1999).
- [6] HARMER G.P., ABBOTT D., TAYLOR P.G. y PARRONDO J.M.R., *Parrondo's paradoxical games and the discrete Brownian ratchet*. En *Proceedings of the 2nd International Conference on Unsolved Problems of Noise and fluctuations*. ABBOTT D. y KISS L.B., editores (American Institute of Physics, en prensa).
- [7] KARLIN S. y TAYLOR H.M., *A First Course in Stochastic Processes* (Academic Press, Nueva York, 1975).
- [8] KOONIN S.E., *Computational Physics* (Benjamin/Cumings Publishing Inc., Menlo Park, California, 1975) sección 8.3.
- [9] LEIBLER S. y HUSE D.A., *Porters versus rowers: a unified stochastic model of motor proteins*. J. of Cell Biol. **121**, 1357–1368 (1993).
- [10] MAGNASCO M.O., *Molecular combustion motors*. Phys. Rev. Lett. **72**, 2656 (1994).
- [11] PARRONDO J.M.R. y ESPAÑOL P., *Criticism of Feynman's analysis of the ratchet as an engine*. Am. J. Phys. **64**, 1125–1130 (1996).
- [12] PARRONDO J.M.R., *Reversible ratchets as Brownian particles in an adiabatically changing periodic potential*. Phys. Rev. E **57**, 7297–7300 (1998).
- [13] PARRONDO J.M.R., BLANCO J.M., CAO F. y BRITO R., *Efficiency of Brownian motors*. Europhys. Lett. **43**, 248–254 (1998).
- [14] SOKOLOV I.M. y BLUMEN A., *Non-equilibrium directed diffusion and inherently irreversible heat engines*. J. Phys. A **30**, 3021–3027 (1997).