



Universidad Simón Bolívar

Departamento de Procesos Biológicos y Bioquímicos

Sección de Biofísica y Bioingeniería

Termodinámica, Información y Vida

Ricardo José Silva Bustillos

Luis Lara Estrella

Sartenejas, enero del 2001



Índice de Contenido

Introducción.....	3
El Flujo de Energía a Través de la Biosfera	4
Ciclo de la materia:	4
Flujo de energía:.....	4
Aspectos Cuantitativos de la Energética	8
Formulación Estadística de La Segunda Ley	10
Termodinámica de los Microestados	14
Teoría de Información	19
Teoría de Información aplicada a la Termodinámica.....	22

Introducción

La termodinámica es la rama de la física que se encarga del estudio de las transformaciones energéticas en sistemas macroscópicos; más específicamente las relaciones entre calor, trabajo y energía y en particular la conversión de calor en trabajo. Las restricciones que se aplican a estas relaciones se conocen como las leyes de la termodinámica, estas leyes son fundamentales y no pueden ser derivadas de ningún enunciado más primitivo.

La primera ley de la termodinámica, establece que la energía se conserva, esto implica, que aún cuando se puede alterar en forma y transferir de un lugar a otro, la cantidad total permanece constante. En tal sentido, el concepto de equilibrio es fundamental en el campo termodinámico, ya que una condición de equilibrio está asociada al concepto de estado. Un sistema posee un estado identificable y reproducible, cuando todos sus parámetros termodinámicos están fijos. El número de parámetros termodinámicos que se deben especificar para fijar un estado es variable y depende de las características del sistema. Lo que sí está claro es que dichos parámetros son macroscópicos y arrojan un cierto grado de información sobre lo que está ocurriendo microscópicamente en el sistema.

Para entender lo que está ocurriendo microscópicamente en el sistema e interpretar el grado de información que esto proporciona, se debe recurrir a la estadística y a la teoría de la información, como herramientas claves para enlazar los mundos microscópicos y macroscópicos de las variables termodinámicas.



El Flujo de Energía a Través de la Biosfera

Tanto los sistemas vivos como los inanimados, funcionan en un universo que obedece ciertas leyes fundamentales. Estas leyes gobiernan tanto la materia como la energía. Tomadas como un todo, la materia y la energía son finitas, aunque ellas pueden tomar diferentes formas e intercambiarse una en otra. Este concepto se expresa matemáticamente mediante la Primera Ley de la Termodinámica, la cual gobierna el flujo de energía y el ciclo de la materia. Por otra parte, la dirección de los procesos lo determina la Segunda Ley de la Termodinámica. Es en este contexto donde los sistemas vivos se desempeñan.

Ciclo de la materia:

Cada átomo o molécula incorporado a un sistema viviente forma parte de algún ciclo de la naturaleza. A menudo estos ciclos son interrumpidos por la mano del hombre. Ejemplo de ello es cuando un cadáver es enterrado en una caja de hierro y concreto, interrumpiendo así el proceso mediante el cual los átomos y molécula de ese cadáver pasaran a formar parte del suelo. En un contexto más amplio, los ecólogos se preocupan cada día mas por los cambios producidos por la tecnología en la superficie de la tierra, los cuales pueden alterar uno a más ciclos y cortar así las fuentes de algunos tipos de átomos necesarios para todos los seres vivos. Así, nosotros mismos somos parte de esquemas de reciclaje de átomos en los cuales estamos incluidos todos los seres vivos y los sistemas no vivientes. Cada átomo de nuestro cuerpo ha ocupado alguna vez en el pasado un lugar en cientos y cientos de otros sistemas.

Flujo de energía:

Cuando una sustancia como la gasolina es quemada en el motor de un automóvil, parte de la energía química almacenada en la estructura química de la



gasolina es convertida en calor, y otra parte es convertida en otras formas de energía, tales como energía mecánica o energía de movimiento, la cual es en definitiva la utilizada para desplazar el automóvil. En otras palabras, la energía química puede ser convertida en energía mecánica; sin embargo, siempre parte de esta energía es perdida en el proceso de conversión. Tanto los sistemas vivientes como los no vivientes son capaces de convertir directamente energía química en otras formas de energía, tales como: energía eléctrica, en nervios y circuitos eléctricos, en energía mecánica, en maquinarias y músculos, en energía luminosa, en lámparas y algunos insectos, pero siempre en todos estos procesos parte de la energía es perdida en forma de calor.

Los organismos vivientes constituyen sistemas termodinámicos denominados "sistemas abiertos". Estos sistemas se caracterizan por ser "abiertos" al ambiente que los rodea, permitiendo tanto el flujo de energía como de materia: alimentos son ingeridos por los organismos vivos y productos de deshecho son expulsados del organismo. Los organismos vivos también se dice permanecen en un "estado estacionario" en el sentido de que logran un equilibrio dinámico o balance: Aún los huesos de un vertebrado cambian minuto a minuto. Un átomo de calcio que deja el hueso en un momento determinado, entra al torrente sanguíneo, pero es reemplazado por otro exactamente igual, de forma tal que el hueso luce idéntico minuto a minuto.

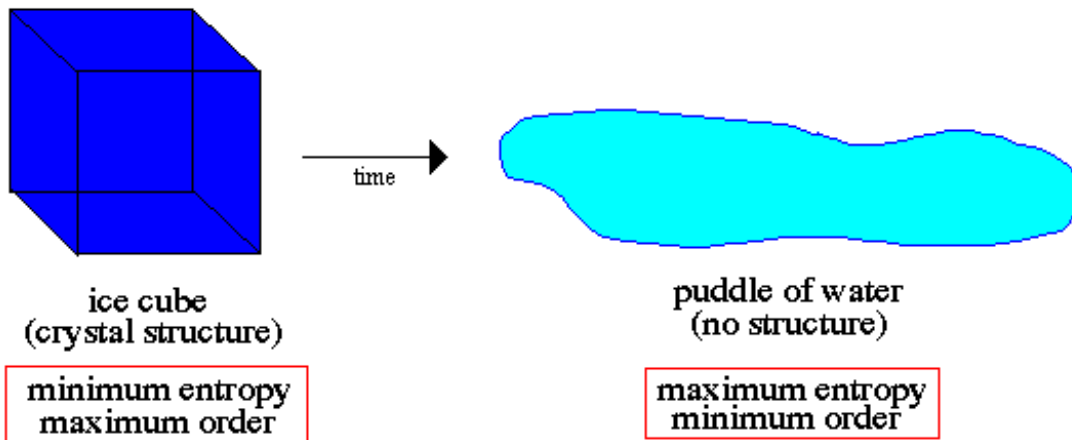
La evolución de los sistemas termodinámicos es descrito por la Segunda Ley de la Termodinámica. Esta ley, al interpretarse su significado, pone de manifiesto que siempre que la energía es convertida de una forma a otra, parte de esta energía es convertida en energía térmica (calor) la cual no puede ser utilizada por otros procesos y es perdida en el ambiente. Dicho de otra forma, esto implica que la entropía del universo siempre se incrementa cuando ocurre un proceso termodinámico. Entropía no es un concepto fácil de definir, como veremos se requieren de conceptos físicos y matemáticos. Sin embargo, usando una terminología relativamente simple, la entropía es a menudo descrita como



"desorden", "no predictabilidad", "energía no utilizable", "caos", etc. Un estado de alta entropía es a menudo descrito como uno que puede ser mantenido con poca energía o sin energía y materia. Por ejemplo en los sistemas vivientes, la muerte representa el estado de máxima entropía, ya que una vez muerto, el sistema no requiere de energía ni materia para permanecer muerto. Los sistemas vivos se caracterizan por ser altamente complejos, organizados y ordenados, por tanto ellos se encuentran en estados de relativamente baja entropía. Requiriendo un continuo consumo de energía y materia para permanecer vivos.

La entropía puede considerarse en una forma amplia como el desorden o el caos de un sistema. Cualquier sistema vivo al cual no se le supe energía tiende hacia un estado de máxima entropía, en otras palabras, el orden del sistema se pierde continuamente y su estructura tiende a desorganizarse paulatinamente, y cada vez menor cantidad de energía útil es disponible para realizar trabajo. Aún en los sistemas cerrados, los cuales ni pierden ni ganan energía del ambiente, la cantidad de energía útil del sistema paulatinamente decrece aunque la cantidad total de energía permanece constante.

Entropy



Todo sistema no capaz de absorber energía del ambiente, siempre evolucionar a estados de mayor entropía. La energía representada en su orden se perderá, dando lugar al desorden y su habilidad de realizar trabajo declina



progresivamente. Una piedra es un sistema termodinámico, como lo es un árbol o un hombre. Para los últimos, los estados de alta entropía ocurren cuando mueren, mientras los estados de baja entropía ocurren durante la vida química de ambos.

Si consideramos "el sistema" como todos los organismos vivos, entonces la biosfera se puede considerar como un sistema termodinámico. Ya que este sistema está constituido por macromoléculas altamente organizadas, las cuales a su vez constituyen sistemas complejos de células y organismos, la biosfera es así un sistema termodinámico de muy baja entropía y alta energía libre; el cual, para mantenerse en este estado termodinámico requiere de un continuo consumo de energía del ambiente. La única fuente de energía utilizable por la biosfera es proveniente de la energía radiante del sol. Las plantas verdes, a través de un proceso denominado "fotosíntesis", convierte la energía radiante en energía química, la cual puede ser almacenada y transferida de un organismo a otro. En las células de plantas y animales, este tipo de energía química es convertida a otras formas útiles de energía química mediante un proceso denominado "respiración celular". Parte de esta energía es utilizada para sintetizar macromoléculas y para organizarlas en complejas estructuras que representan el crecimiento y reproducción de los organismos.

Así pues, la energía en el universo, puede ser considerada como un todo, en su tránsito de energía útil a entropía.



Aspectos Cuantitativos de la Energética

Como vimos el proceso evolutivo hacia la aparición de la vida fue un proceso de creciente complejidad y organización en la formación de moléculas más complejas y ordenadas que requiere de un continuo flujo de energía y materia. Estamos así en presencia de un sistema termodinámico en el cual ocurren procesos que en su conjunto denominamos vida.

El proceso fundamental en el mundo biológico es el mantenimiento de la vida. Así pues, los procesos biológicos son fundamentalmente procesos termodinámicos y por lo tanto su estudio debe comenzar con el estudio de los principios termodinámicos que regulan todos los procesos físicos y químicos.

Por definición, la termodinámica es la rama de la física que trata de la energía y sus transformaciones. Quizá el nombre no sea el más descriptivo, ya que el término se refiere específicamente a calor. Deberíamos utilizar mas bien el término ENERGETICA.

La proposición básica de la termodinámica es que el curso eventual de todo proceso físico o químico está determinado por la naturaleza del contenido energético del sistema material bajo consideración y del intercambio de energía entre el sistema y su ambiente. Todos estos procesos son regidos por dos leyes fundamentales:

1ra Ley: La energía total del universo es constante.

2da Ley: La entropía del universo siempre se incrementa.

Sin embargo, antes de estudiar cualquier proceso termodinámico se debe definir el sistema bajo estudio.

Sistema: Colección de materia bajo investigación.



Ambiente: El resto de la materia o el medio.

Universo: Colección de toda la materia existente en la naturaleza.

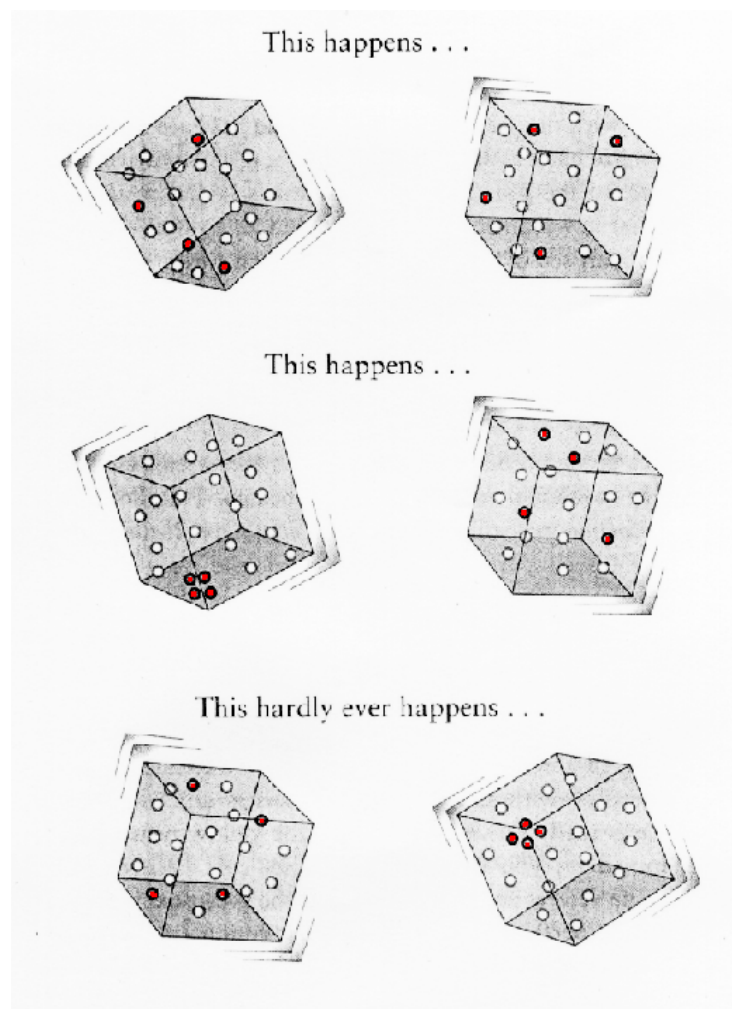
Sistema Cerrado: No intercambia energía o materia

Sistema Abierto: Intercambia energía y materia



Formulación Estadística de La Segunda Ley

El desorden total del universo no disminuye nunca. El concepto de desorden, es una relación entre un estado termodinámico y un estado molecular del sistema. Tal como se mencionó en la introducción, un estado termodinámico (macroestado) queda especificado al definir un determinado número de propiedades moleculares medias, tales como la temperatura y la presión. Por el contrario, un estado molecular (microestado) queda especificado si se conoce la posición y velocidad de cada molécula del sistema. En consecuencia, diferentes microestados con las mismas propiedades medias corresponden al mismo macroestado. Así pues, el número "D" de microestados distintos correspondientes al mismo macroestado es la medida del grado de desorden del sistema.





Cuando las moléculas del sistema cambian sus posiciones y velocidades, el sistema pasa de un microestado a otro. El macroestado de equilibrio es el de máximo desorden, es decir, el macroestado con el mayor número de microestados posibles. En equilibrio, el sistema no cambia de macroestado, aún cuando sus microestados estén constantemente cambiando, ya que casi todos los microestados posibles corresponden al macroestado de equilibrio. Esto es un resultado estadístico y su comprensión se hará más clara una vez explicada la teoría de los microestados.

Estadística de los Microestados

Para la comprensión de la teoría estadística de los microestados, conviene partir del principio de la igualdad de probabilidades. De tal forma, si se lanza una moneda al aire, la probabilidad de que salga cara es exactamente igual a la probabilidad de que salga sello ya que la moneda sólo tiene dos lados. Así pues, la probabilidad de un resultado es el cociente entre el número de sucesos en los cuales se logra el resultado, con respecto al número total de sucesos.

$$P(C) = \frac{n_{\text{caras}}}{n_{\text{lados}}} = \frac{1}{2}$$

Esto no significa que el resultado total de una serie de lanzamientos sea 50 de 100 caras, sino que este es el resultado más probable. Así pues, mientras más se aparte un resultado particular del resultado más probable, menor será el chance de observarlo.



Si se lanzan cuatro monedas de una vez, cada una de ellas puede caer de cierta forma, por ejemplo C,C,C,S (C: cara, S: sello). Esta disposición es lo que se denomina, en física, microestado. Cualquiera de los resultados posibles del lanzamiento simultáneo de las cuatro monedas corresponde a un microestado y en consecuencia, cualquier microestado es igualmente probable.



Ahora bien, si se desea conocer para cuantos lanzamientos se cumple que salen tres caras y un sello, sin importar cual de las monedas es la que exhibe el sello, entonces a este resultado se le denomina macroestado. En el caso de las cuatro monedas existen cuatro formas igualmente probables (cuatro microestados) de que salgan un sello y tres caras (SCCC, CSCC, CCSC, CCCS). Como cualquiera de ellas es válida, la probabilidad total de un sello es la suma de las cuatro probabilidades iguales.



Termodinámica de los Microestados

Si se toma una bandeja y se rellena con 100 fichas de plástico¹, donde cada ficha es blanca por un lado y negra por el otro, cuando se mira la bandeja desde lejos, se observa el color promedio que presenta el conjunto de las fichas. Este color varía entre el blanco puro y el negro puro, pasando por todos los matices de gris, de acuerdo al número de fichas que en un momento dado exhiban su cara negra o su cara blanca. El color de la bandeja, es en consecuencia, una propiedad media del sistema, análoga a una variable termodinámica.

La calidad de gris “g” se define como la fracción de fichas que muestran su cara negra. Esto da una descripción cuantitativa del color. La calidad de gris varía desde 0 (blanco puro) hasta 1 (negro puro). De esta forma, g indica el macroestado de la bandeja, al igual que las variables p (presión) y T (temperatura) especifican el macroestado de un sistema termodinámico.

Para especificar los microestados de la bandeja hay que dar color y posición a cada ficha. Por ejemplo, un microestado puede tener la primera ficha blanca, la segunda blanca, la tercera negra, la cuarta negra y así sucesivamente. Este microestado se presentaría mediante la siguiente sucesión:

bbnn....

Otro microestado puede tener la primera ficha negra, la segunda blanca, la tercera blanca, la cuarta negra y así sucesivamente; representándose de la siguiente manera:

nbbn....

¹ Tomado del capítulo 11 del libro de Física para las Ciencias de la vida de Cromer.



Como cada ficha puede mostrar uno de los dos colores (negro o blanco) el número total N de microestados distintos es:

$$N = 2 \times 2 \times 2 \times 2 \dots = 2^{100}$$

De acuerdo a la definición de logaritmos, se puede hacer la transformación siguiente:

$$2 = 10^{\log 2} = 10^{0,3}$$

$$2^{100} = (10^{0,3})^{100} = 10^{30}$$

Esto demuestra, que incluso un sistema pequeño de unas 100 partículas posee un número inmenso de macroestados. Sin embargo, lo que interesa realmente es conocer el número de microestados $D(g)$ que corresponden a un macroestado dado g .

El macroestado “todas blancas” posee un solo microestado, ya que cada ficha debe mostrar su cara blanca; de aquí que $D(0) = 1$. El macroestado $g = 0,01$ tiene 99 fichas con la cara blanca y una con la cara negra. Como el macroestado es el mismo, independientemente de cual de las fichas sea la que muestre la cara negra, existen 100 microestados correspondientes con $g = 0,01$; por lo tanto $D(0,01) = 100$. El microestado $g = 0,02$ tiene 98 fichas mostrando la cara blanca y 2 fichas mostrando la cara negra; en este caso, existen 4950 microestados diferentes, por lo tanto, $D(0,02) = 4950$.

En la tabla I se muestra el grado de desorden $D(g)$ para diversos microestados comprendidos entre 0 y 1.

Tabla I

Macroestado g	Desorden D(g)
0,00	1
0,02	$4,9 \times 10^3$
0,05	$7,5 \times 10^7$
0,10	$1,7 \times 10^{13}$
0,20	$5,5 \times 10^{20}$
0,40	$1,4 \times 10^{28}$
0,50	$1,0 \times 10^{29}$
0,60	$1,4 \times 10^{28}$
0,80	$5,5 \times 10^{20}$
0,90	$1,7 \times 10^{13}$
0,95	$7,5 \times 10^7$
0,98	$4,9 \times 10^3$
1,00	1

Grado de desorden $D(g)$ para diversos microestados comprendidos entre 0 y 1.

De la tabla I se observa que $D(g)$ es máximo para $g = 0,5$, es decir, cuando 50 fichas muestran la cara blanca y otras 50 muestran la cara negra.

Cuando se sacude la bandeja, las fichas pasan de un lado al otro al azar. En cada sacudida, la bandeja efectúa una transición aleatoria de un microestado a otro. Aunque la probabilidad de un microestado es igual a la de otro cualquiera, unos macroestados son mucho más probables que otros. La probabilidad $P(g)$ de que una bandeja se encuentre en un macroestado cualquiera es igual al número de microestados $D(g)$ correspondientes a ese macroestado g dividido por el número total N de microestados del sistema:

$$P(g) = \frac{D(g)}{N}$$



Por ejemplo, de los 10^{30} microestados posibles del sistema, sólo uno corresponde a $g = 0$. Por lo tanto, la probabilidad de que este macroestado se presente después de una sacudida cualquiera de la bandeja es de:

$$P(g) = \frac{D(0)}{N} = \frac{1}{10^{30}} = 10^{-30}$$

Esta probabilidad de ocurrencia es tan baja, que a todas luces resulta imposible la ocurrencia del macroestado todas blancas, si la bandeja se sacude al azar. Por el contrario, el macroestado de máximo desorden ($g = 0,5$) se presenta con la máxima probabilidad:

$$P(0,5) = \frac{1,0 \times 10^{29}}{10^{30}} = 0,10$$

Esto quiere decir que por término medio, la bandeja, se encontrará en el estado $g = 0,5$ tras una de cada 10 sacudidas. Si apreciamos otra variable probabilística, como lo es la varianza, observaremos, que los macroestados próximos a 0,50 también se presentan frecuentemente. Es más, el 98 % de todos los microestados por los que pasa la bandeja corresponderán a macroestados entre $g = 0,4$ y $g = 0,6$. Por lo tanto, aunque los microestados cambian en cada sacudida, los macroestados se mantienen en promedio próximos a $g = 0,5$. Esto es aún más cierto si se incrementa el número de fichas de la bandeja; por ejemplo, si la bandeja posee un millón de fichas, el 99,99 % de los microestados corresponderán a macroestados entre 0,499 y 0,501.

En un sistema termodinámico, que se compone de números enormes de partículas, el número de microestados correspondientes a un macroestado de mayor desorden es abrumadoramente más grande que el número de microestados que corresponden a un macroestado de menor desorden. En consecuencia, el sistema no podrá cambiar espontáneamente de un macroestado



de mayor desorden a uno de menor desorden. Así pues, la segunda ley de la termodinámica es esencialmente una ley estadística. No existe ninguna ley física, que le impida a las partículas agruparse en el macroestado “todas blancas”, sin embargo, hay muchos más modos de disponer a las partículas que proporcionan macroestados mucho más estables.

Ahora bien, el grado de desorden de un sistema es un parámetro muy difícil de medir. La variable termodinámica que mide macroscópicamente el grado de desorden de un sistema se conoce como entropía S . Eso quiere decir que cada estado termodinámico tiene una entropía y que la entropía de un estado es mayor a la de otro, si el desorden del primero es mayor al del segundo. La entropía de un estado es proporcional al logaritmo de su desorden:

$$S = k \log(D)$$

Esta ecuación, así como las bases de la termodinámica estadística fueron establecidas por el físico austríaco Ludwig Boltzmann en 1870. En esta ecuación k es la constante de Boltzmann y vale $1,38 \times 10^{-23}$ J / K, ésta es una constante universal que no depende del sistema ni de ninguna circunstancia, por lo cual es muy importante para la física.

Adicionalmente, se puede establecer que la entropía de un sistema proporciona un cierto grado de información con respecto a las características del macroestado que representa. De ahí la importancia y la relación de la teoría de información con la termodinámica y en particular con la medición de la entropía.



Teoría de Información

La teoría de información es una rama de las matemáticas aplicadas, que proporciona las bases para el tratamiento matemático cuantitativo del almacenamiento, transporte y procesamiento de información. Así pues, se debe discutir el concepto de información, que en sentido técnico restringido, se puede definir como remoción de la duda o incertidumbre.

La unidad básica de información la constituyen los símbolos, que agrupados en palabras, permiten transmitir un mensaje, que representa una información. Por ejemplo, el sistema numérico indoarábico se basa en un código formado de $B = 10$ símbolos distintos y si uno agrupa los símbolos en pares, puede escribir $B^2 = 10^2 = 100$ palabras distintas.

El número de conceptos o elementos distintos, que se deben describir recibe el nombre de surtido elemental SE. Así pues, el SE de palabras con n letras que se obtiene con un alfabeto de B signos distintos es:

$$SE = B^n$$

En teoría de información, se suele trabajar con valores digitales, por lo tanto el surtido elemental queda definido como $SE = 2^n$.

El número n es muy importante en teoría de la información y recibe el nombre de cantidad de decisión CD:

$$CD_1 = n = \log_2 SE = ldSE$$

Donde ld es la abreviatura de logarithmus dualis (logaritmo en base 2).



Ahora bien, las palabras de este surtido elemental se pueden agrupar (codificar) para dar origen a nuevos caracteres, con los cuales, realmente, se construirán las palabras del mensaje. Esta metodología es la que emplea el código morse y la que se emplea para codificar los caracteres en computación (código ASCII). De tal forma, con un surtido elemental de 3 bits, se pueden codificar 8 caracteres. Si este es el caso, para cada letra, la cantidad de decisión $CD_1 = 3$ bit, por lo que la cantidad de decisión para una palabra de 4 letras será $CD_4 = 3+3+3+3 = 12$ bits. De manera general, la cantidad de decisión para una palabra de n símbolos será $CD_n = nCD_1$.

Si los símbolos de la serie poseen distinta frecuencia de aparición p_i , entonces la cantidad de decisión por símbolo quedará definida de la siguiente manera:

$$CD_{\bar{1}} = \sum_i p_i \cdot ld \frac{1}{p_i}$$

La cantidad de decisión media por símbolo, así expresada, recibe el nombre de cantidad de información del símbolo CI. Este concepto no implica ninguna restricción para los símbolos que se expresan con probabilidad p_i . En tal sentido, estos pueden representar distintos estados físicos tales como masas, pesos, temperaturas, etc., siempre y cuando estos se puedan expresar en función de una frecuencia p_i conocida. Por lo tanto el concepto de información tiene múltiples aplicaciones y refleja las múltiples formas en que una información puede ser almacenada. Así pues, el concepto de información aplicado a sistemas, que a primera vista parecen no tener ninguna relación con la misma, puede arrojar resultados muy interesantes.

Otro concepto fundamental asociado al de información es el concepto de inseguridad. Por ejemplo, cuando se arroja una moneda al aire existe una cierta inseguridad sobre si esta caerá cara o sello. Esta inseguridad desaparece



justamente lanzando la moneda al aire. Esto implica que la información compensa exactamente a la inseguridad. Por lo tanto:

$$I = \sum_i p_i \cdot \text{ld} \frac{1}{p_i}$$

Según la fórmula anterior, si lanzamos una moneda al aire, la inseguridad será de un bit, ya que $P_{\text{cara}} = P_{\text{sello}} = 0,5$. En el caso de un dado, dado que la probabilidad de aparición de cada cara es $1/6$, la inseguridad de que aparezca un número determinado será $\text{ld}(6) = 2,58$ bits.

Una vez definidos todos estos conceptos de teoría de información, se puede proceder a observar su aplicabilidad en el campo de la termodinámica.





Teoría de Información aplicada a la Termodinámica

Supongamos que tenemos un grupo de N celdas, cada una de los cuales puede contener M letras, donde:

$$N = \sum_{j=1}^M N_j$$

La probabilidad de ocurrencia de una letra particular $p_j = N_j / N$ para $j = 1, 2, \dots, M$, con:

$$\sum_{j=1}^M p_j = 1$$

El número de mensajes de N letras posibles con el alfabeto de M letras es:

$$P = \frac{N!}{\sum_{j=1}^M N_j!}$$

Para $N_j > 100$, la información (o inseguridad) de un mensaje se puede expresar mediante la fórmula de Stirling, de la siguiente manera:

$$CI = ld(P) = ld(N!) - \sum_{j=1}^M ld(N_j!) \approx N ld(N) - \sum_{j=1}^M N_j ld(N_j)$$

De donde,

$$CI = N \sum_i p_i \cdot ld \frac{1}{p_i}$$



Si en vez de expresar la información en bits, se expresa en función de un número de caracteres K cualesquiera, la ecuación anterior se transforma en:

$$CI = K \sum_{j=1}^M p_j \ln(p_j)$$

Si se expresa la cantidad de información en términos de J / K , y se toma $K = k = 1,38 \times 10^{-23} J / K$ (La constante de Boltzman), la cantidad de información resulta ser igual a la entropía. Esta ecuación se denomina Fórmula de Shannon y se expresa de la siguiente manera:

$$S = -k \sum_{j=1}^M p_j \ln p_j$$

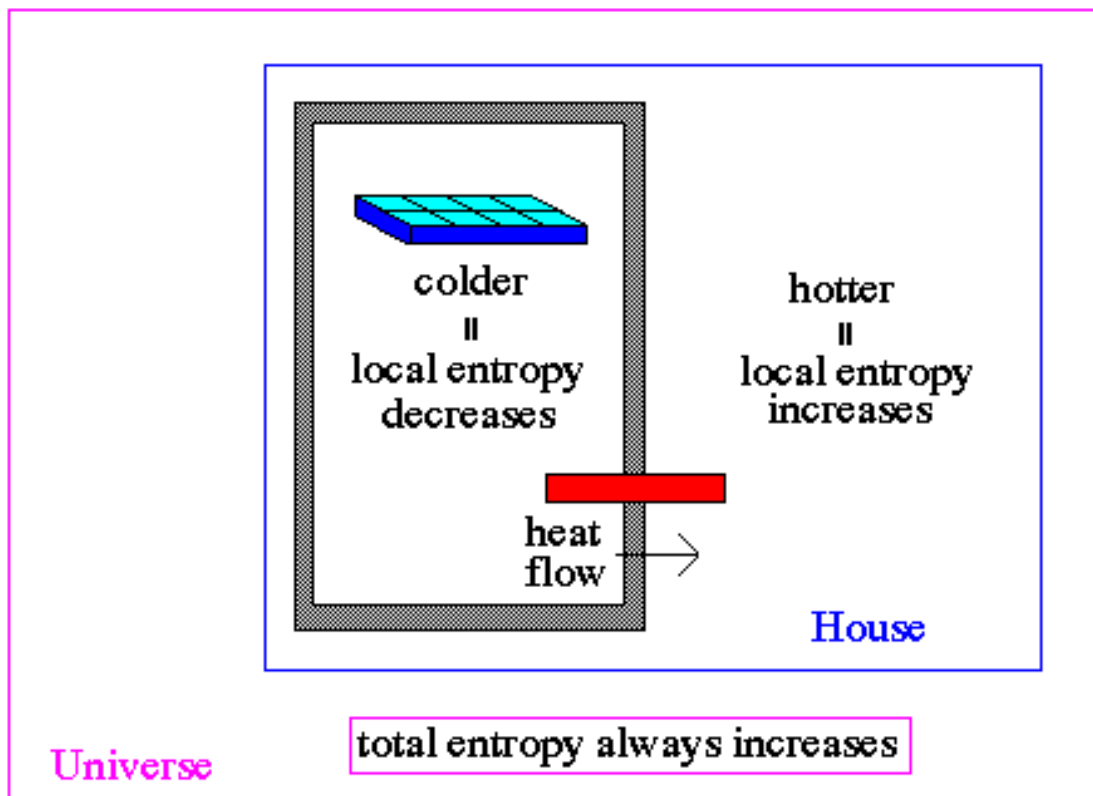
Dado que el grado de desorden de un sistema es una medida de su distribución de probabilidad, se observa como en efecto, la entropía es proporcional al logaritmo del grado de desorden, tal y como se indicó empíricamente en la página 8.

Si se realiza una transformación de la probabilidad de distribución P (p_1, p_2, \dots, p_n) a la probabilidad de distribución Q (q_1, q_2, \dots, q_n) el cambio en la cantidad de información se expresa de la siguiente manera:

Esto implica que si se varía completamente la distribución de probabilidades de P a Q , es decir, si ocurre un cambio de un macroestado del sistema a otro, el cambio en la cantidad de información del sistema es igual a ΔI multiplicado por una probabilidad finita q_j .

$$\Delta CI = k \sum_j q_j \ln \frac{q_j}{p_j}$$

Esta cantidad es siempre positiva, excepto cuando $Q = P$, ya que en este caso no ocurre cambio en la información del sistema. Esto quiere decir, que si se conoce con certeza la ocurrencia de un cambio de distribución de probabilidad de P a Q , se reduce la inseguridad y aumenta la cantidad de información que se tiene acerca del sistema.



Si p_j denota la probabilidad de que el sistema se encuentre en un estado con energía E_j , entonces:

$$E = \sum_j p_j E_j$$

Empleando esta definición de energía y a partir de la Ecuación de Shannon, tomando en cuenta que la sumatoria de las probabilidades individuales de todos los estados posibles es igual a uno y empleando el método de los multiplicadores de Lagrange, se deduce la siguiente expresión:

$$\delta \left[\frac{1}{k} S - (\alpha - 1) \sum_j p_j - \beta \sum_j p_j E_j \right] = 0.$$

Donde α y β son variables auxiliares que ayudan a la resolución del problema. Diferenciando con respecto a p_j e igualando la derivada a cero, se obtiene:

$$-\ln p_j - 1 - (\alpha - 1) - \beta E_j = 0$$

De donde se deduce la Función de Distribución de Boltzman:

$$p_j = \exp(-\alpha - \beta E_j)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación de Shannon se obtiene la siguiente relación para la entropía máxima:

$$\frac{1}{k} S_{max} = \alpha \sum p_j + \beta \sum p_j E_j = \alpha + \beta E$$

Además se tiene lo siguiente:

$$\sum_j p_j = e^{-\alpha} \sum_j e^{-\beta E_j} = e^{-\alpha} Z$$

A partir de estas dos ecuaciones se puede deducir la siguiente relación:



$$E - \frac{1}{k\beta} S_{max} = -\frac{1}{\beta} \ln Z$$

Donde:

$$Z = \sum_j \exp(-\beta E_j)$$

Esta es una ecuación reconocida de la física estadística, donde Z es la función de partición; S_{max} es la entropía de equilibrio, E la energía promedio y $\beta^{-1} = kT$, donde T es la temperatura absoluta expresada en grados Kelvin. Tomando en cuenta que E y S son funciones del volumen V , esta ecuación se convierte en la Ecuación de Energía Libre de Helmholtz:

$$E - TS = -kT \ln Z = F$$

La energía libre de Gibbs se define de la siguiente manera:

$$G = F + pV = E + pV - TS = H - TS$$

Donde H es la entalpía y p la presión. Por lo tanto, la entropía calculada por medio de la teoría de información coincide con la entropía termodinámica y con la entropía definida en función de los macroestados del sistema. Así pues, la interpretación física es que un mayor grado de información con respecto a un sistema implica un incremento en la entropía del mismo. Esto quiere decir, que cualquier medición se traduce en un incremento en la entropía del ambiente. Es más, si la cantidad de información y la entropía se miden bajo las mismas unidades, la ley de conservación de la energía puede expresarse de la siguiente manera:

$$CI + S = constante$$

De aquí se deduce que la entropía es una medida de la deficiencia de información sobre un sistema; que la entropía decrece con el aumento de la cantidad de información y que tanto la cantidad de información como la entropía son variables macroscópicas que se pueden emplear para definir los macroestados de un sistema. Por ejemplo, cuando un líquido se evapora, la información macroscópica sobre la localización de las moléculas en una determinada región del espacio desaparece; en consecuencia, la entropía aumenta. Simultáneamente, la información macroscópica (macroestado) se traduce en información microscópica (microestados) tal como la correlación entre las velocidades de las moléculas en el gas, en función de sus colisiones. Sin embargo, ésta ya no se puede catalogar como información, ya que no puede ser medida ni almacenada.

En la escala termodinámica, un bit de información es equivalente a $k \ln(2) = 10^{-23} \text{ J / K}$, lo cual representa un valor termodinámico bastante bajo. Sin embargo, en términos de trabajo este valor se hace más notable. Así, si se tiene un gas ideal con N partículas a una presión p y una temperatura T y como resultado de fluctuaciones, el volumen se reduce desde un valor inicial V a $V - \delta V$. El trabajo empleado para tal fin es $W = p\delta V$. Si cada molécula se encuentra en V con probabilidad 1, en $V - \delta V$ se encontrará con probabilidad $1 - \delta V/V$. Para N moléculas, la probabilidad es $(1 - \delta V/V)^N$, por lo tanto, el incremento en cantidad de información es:

$$\Delta CI = K \ln \frac{1}{(1 - \delta V / V)^N} \approx KN \frac{\delta V}{V} \text{ para } N \gg 1$$

En consecuencia:

$$\frac{W}{\Delta CI} = \frac{p\delta V}{KN\delta V} V = \frac{pV}{KN} = \frac{kT}{T}$$

De donde, el trabajo realizado por bit de información es proporcional a la temperatura a la cual la información ha sido determinada. Si ΔCI se evalúa en bits, entonces $K = 1 / \ln(2)$ y para obtener un bit de información se debe consumir una cantidad de energía igual a $kT\ln(2)$, que a 300 K es equivalente a 2×10^{21} J.

En consecuencia el estudio estadístico de los sistemas termodinámicos, bien sea por el método de los microestados o en función de la teoría de información, proporcionan una base sólida para el sustento de la segunda ley de la termodinámica y para el estudio macroscópico de los mismos. Adicionalmente, presentan unos mecanismos efectivos para inferir el comportamiento microscópico de un sistema en función de los parámetros macroscópicos medidos. Además, estas herramientas estadísticas pueden extrapolarse a otros campos de la física donde se trabaje con un elevado número de partículas, permitiendo así inferir las características microscópicas del sistema a partir de parámetros macroscópicos.

En tal sentido, se desarrolla la teoría cinética de los gases. Aquí se pueden determinar microscópicamente los contenidos energéticos de un gas en función de sus parámetros macroscópicos, deduciendo nuevamente la relación de Boltzmann y demostrando la universalidad de este parámetro estadístico. De tal forma, las herramientas estadísticas analizadas a lo largo de este trabajo muestran ser fundamentales para el estudio de cualquier campo de la física, relacionado con parámetros estadísticos.

Otro campo de estudio donde estas teorías estadísticas juegan un papel fundamental es en el caso de la biofísica y en particular de los organismos vivos, donde se trabaja con un elevado número de partículas orgánicas, que se estudian a partir de parámetros macroscópicos. En tal sentido, se puede estudiar la vida en función de la termodinámica estadística.

Termodinámica Estadística aplicada a los Seres Vivos

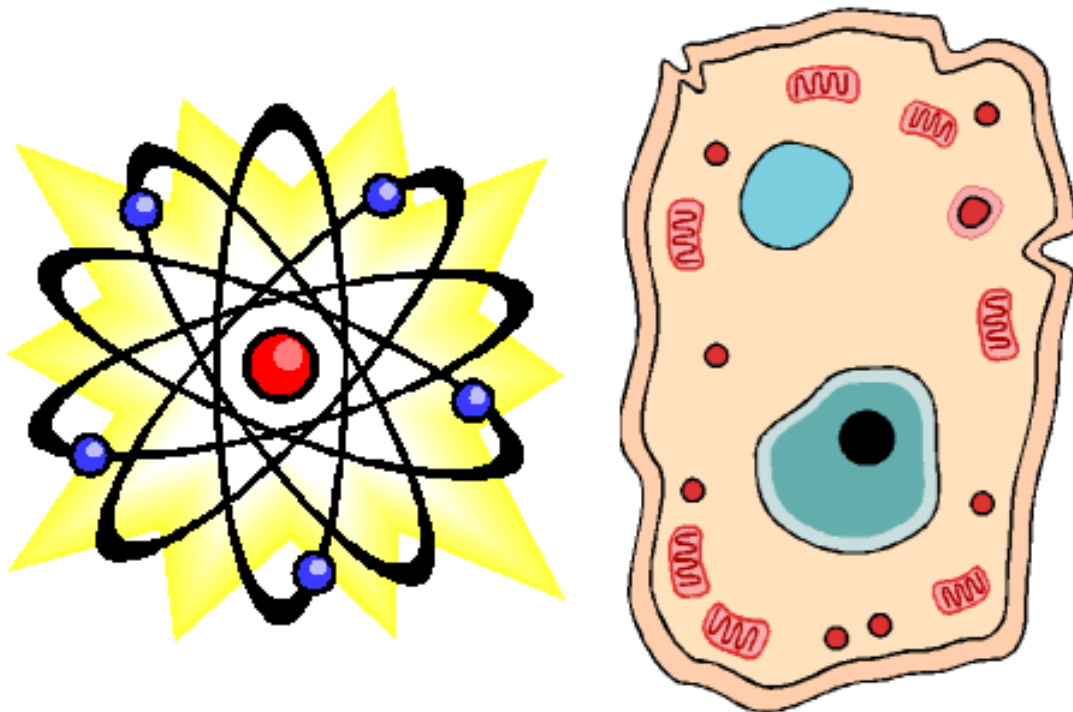
Cualquier célula de un organismo vivo contiene un nivel de orden extraordinario y en consecuencia una baja entropía. Los átomos que integran los componentes moleculares ocupan posiciones finitas en el espacio, mucho menores en número que las que podrían ocupar si se soltaran aleatoriamente en el espacio. Así pues, empleando la teoría de la información, se puede estimar que la cantidad de información contenida en las moléculas de un organismo vivo de 8 Kg. es aproximadamente $1,3 \times 10^3 \text{ J / K} \approx 300 \text{ cal / K}^2$. Este valor, en términos termodinámicos, es muy pequeño, incluso menor que el grado de orden de una roca del mismo peso debido a que los organismos vivos son sistemas activos, que constantemente están intercambiando información con el medio. Sin embargo, la cantidad de información que se debe analizar en un organismo vivo, no es aquella que tiene que ver con el ordenamiento de sus células en el espacio, sino mas bien aquella que está relacionada con la codificación y transmisión de información.

Si se analiza el proceso de cristalización de un líquido, se tiene que el sistema entra en una región del espacio de fases donde se hace estable bajo ciertas condiciones. La información aumenta, sin embargo no es nueva, ya que ésta se encuentra previamente programada en la estructura de las moléculas. El crecimiento, la reproducción y el desarrollo de las células puede interpretarse como un proceso que impone orden sobre el movimiento anárquico de los átomos y las moléculas y en consecuencia genera información. Esta ganancia de información debe ser compensada por medio de la realización de trabajo sobre el sistema o mediante el aumento del desorden en el medio ambiente (ambos inclusive).

En 1867, James Clerk Maxwell planteó el siguiente rompecabezas (Demonio de Maxwell), suponga que un demonio se encuentra ubicado en la pared que separa dos compartimientos aislados rellenos de un gas a igual

² Ver página 318 del libro Biophysics de Volkenshtein

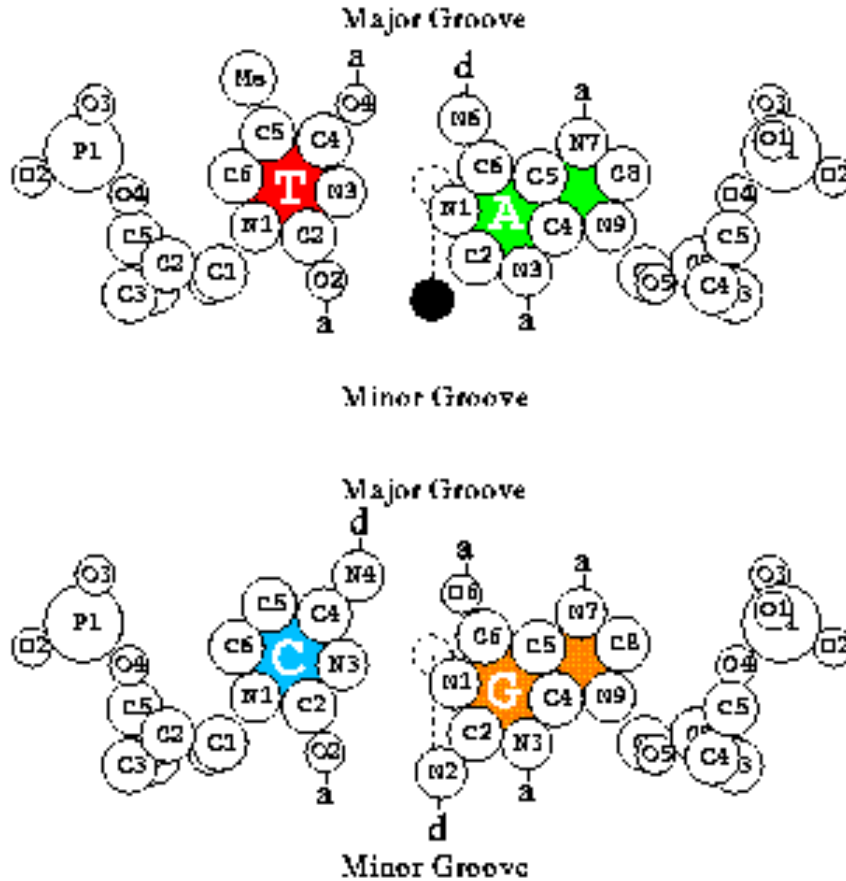
temperatura y presión. El demonio maneja una compuerta sin roce entre los dos compartimientos; cada vez que se aproxima una molécula a la puerta desde el lado derecho y no se aproxima ninguna desde el izquierdo, abre la misma para que la molécula pase de un lado al otro. Pasado un tiempo, se establecerá una diferencia de presión entre ambos compartimientos, que podría ser empleada para realizar trabajo. El problema es que el demonio viola la segunda ley, reduciendo la entropía del gas gracias a sus conocimientos y sin realizar ningún trabajo. Este demonio opera un *perpetuum mobile*. Ahora bien, parece razonable pensar que en la práctica es imposible que tal demonio exista, sin embargo, los organismos vivos tienen la capacidad de reconocer y manipular moléculas individuales en aparente contradicción con la segunda ley.



Esto fue demostrado gracias a los trabajos de Leo Szilard y L. Brillouin, quienes concluyeron que para poder realizar esta proeza el demonio requiere información sobre las moléculas tal como su posición y su dirección de propagación. Para obtener tal información el demonio debe gastar energía y este



gasto es siempre superior a la ganancia adquirida en función del conocimiento. Esta relación puede ser expresada en términos de la teoría de información de la siguiente manera: la cantidad de información ganada cuando se sabe en cual de los compartimientos se encuentra la molécula es igual a un bit. Los costos energéticos de tal conocimiento son iguales a $kT \ln(2)$ y es igual a la máxima reducción de entropía que el demonio puede obtener con su aparato. Así pues, para que un organismo adquiriera información del medio ambiente, debe emplear energía en el desarrollo y empleo de elementos sensoriales. Sin embargo, este costo es el mismo, independientemente de que la información sea valiosa o no. Sin embargo, en los seres vivos la discriminación de la información valiosa no requiere de costos adicionales. Por ejemplo, un canal en la membrana de una célula receptora, permite el paso de iones de una determinada forma y tamaño, adquiriendo información valiosa sin gastos adicionales de energía. La energía asociada con la formación de los canales especializados ha sido consumida en los estados previos de la evolución orgánica.



Ahora bien, si se desea transmitir orden de una generación a otra se debe realizar trabajo para codificar la información en secuencias genéticas, que garanticen su fiabilidad y que se puedan transmitir y traducir sin posibilidad de error. En tal sentido, para ensamblar una proteína se deben escoger los aminoácidos apropiados y ubicarlos de acuerdo a un orden predefinido en con una configuración espacial adecuada. Este proceso no es tan simple, ya que si se toman por ejemplo cinco aminoácidos predeterminados, existe una cantidad de formas de ordenar los mismos que se eleva a $5!$ y cada uno de estos arreglos corresponde a un macroestado independiente, ya que la naturaleza de las uniones peptídicas es asimétrica ($pg \neq gp$). Sin embargo, las moléculas orgánicas que se construyen normalmente tienen unas estructuras predeterminadas muy claras y si se toma una proteína con un número N de residuos de un total de m aminoácidos, se encuentra que la cantidad de información contenida en la molécula se acerca a

un máximo. En términos de entropía, esto implica que las cadenas de aminoácidos están organizadas en una forma tal que minimiza la entropía.

Se puede obtener un estimado numérico de la cantidad de orden de un sistema determinado calculando el número de decisiones binarias que se deben realizar para especificar su estructura. Así pues, la selección de un aminoácido de entre 20 posibles requiere $D = \log_2(20) = 4,3$ bits. La información total contenida en una proteína de 300 residuos es $D = 300 \log_2(20) = 1300$ bits. Por lo tanto, una sola molécula de ADN de 900 nucleótidos contiene $900 \log_2(4) = 1800$ bits de información. Si se continúa el proceso hasta las dimensiones de una célula, se obtiene que (Setlow y Pollard 1964, Morowitz 1978 y Riedl 1978) el contenido de información de una célula bacteriana es del orden de 10^{12} a 10^{13} bits, mientras que el contenido de información de un ser humano completo es del orden de 10^{28} bits. Es importante resaltar que la cantidad de información contenida en un volumen de la Enciclopedia Británica es del orden de 10^9 bits (Morowitz 1978).



Tomo de Enciclopedia 10^9 bits

Durante el proceso de la evolución biológica no sólo aumenta el nivel de información presente en el organismo sino también la habilidad de los mismos para seleccionar la información adecuada. Esta habilidad alcanza su nivel más alto en los animales superiores, cuyos órganos sensoriales se han desarrollado para tal selección. Una rana responde únicamente a insectos en movimiento, un murciélago mediante la emisión de ondas ultrasónicas responde sólo las ondas reflejadas pero no las que provienen de fuentes directas. Por último, la selección de información adecuada refleja la totalidad de la capacidad creativa humana.



Para concluir, se puede decir que la teoría de la información es una herramienta matemática, que permite expresar cuantitativamente muchos de los conceptos relacionados con el campo de las ciencias de la vida y que serían imposibles de medir sin la ayuda de esta valiosa herramienta. Además permite aumentar la tasa de transmisión de información de un individuo a otro, ya que simbólicamente es posible expresar una mayor cantidad de conceptos con esta teoría que con el lenguaje gramatical. Así pues, en el futuro es posible que la teoría de la información pase a ser una herramienta de trabajo para el campo de la biología con una importancia similar a la que presenta el cálculo para el campo de la física.



Bibliografía

ACKERMAN, Eugene. (1962): Biophysical Science. Editorial Prentice Hall inc. Englewood, N.J., Estados Unidos.

CROMER, A. (1982): Física par las Ciencias de la Vida. (Segunda Edición). Editorial Reverté. Barcelona, España..

EISBERG, R. y Lerner, R. (1981): Física Fundamentos y Aplicaciones. Mc Graw Hill. Caracas, Venezuela.

GREEN, D. (1984) Perry's Chemical Engineers Handbook (5^a Edición). Mc Graw Hill. New York, Estados Unidos.

JOU, D. y otros. (1996): Física para las Ciencias de la Vida. Mc Graw Hill, Caracas, Venezuela.

LASKOWSKI, W. y Pohlit, W. (1976): Biofísica. Ediciones Omega. Barcelona, España.

VOLKENSHTEIN, M. (1983). Biophysics. Mir Publishers. Moscú, Rusia.
