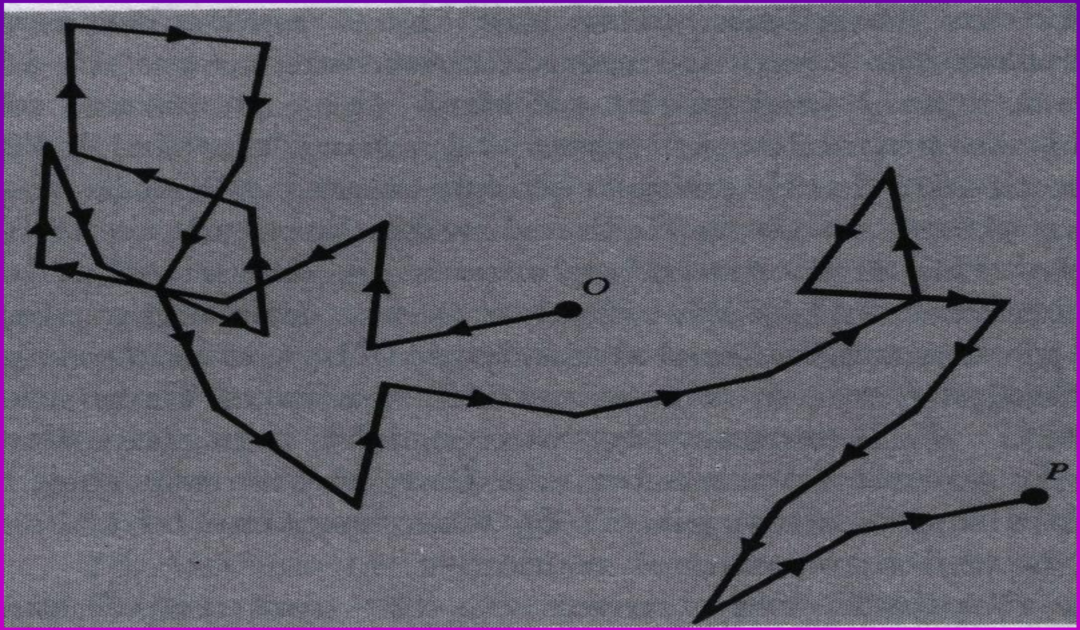
Termo - Estatística
21ª aula

Prof. Alvaro Vannucci

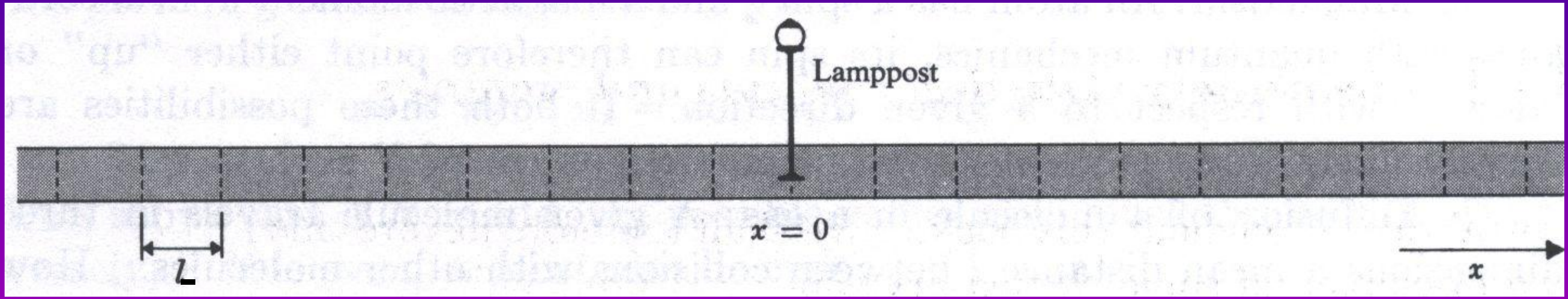
• Lembremos o problema dos ‘***sucessivos deslocamentos aleatórios***’ (***random - DRUNK - walk***)

• Consideramos <u>cada deslocamento </u>(passo dado pela pessoa) como tendo <u>sempre o mesmo comprimento</u> L.



Chamamos de ***p*** a probabilidade de passo para a direita e de ***q = 1-p*** a probabilidade de passo para a esquerda (em ***1D***) que podem – ou não (rua inclinada, por ex.) – serem iguais (*1/2*).

• Na figura abaixo, em ***1D***, vemos que a posição final será ***x = mL***; sendo $m = n_1 - n_2$.



• Desejamos a probabilidade do deslocamento (posição) final sendo dado por $x = mL$ após N passos, tendo-se n_1 para a direita e n_2 passos para a esquerda ($n_1 + n_2 = N$).

• Note: $m = n_1 - n_2$; e como $n_2 = N - n_1 \rightarrow m = n_1 - N + n_1 =$
$= 2n_1 - N$.

• Lembrando, sendo ***p*** a probabilidade de um passo para a direita e de ***q = 1- p*** a probabilidade de um passo para a esquerda, a probabilidade de serem dado n_1 passos para a direita ***e*** n_2 passos para a esquerda será:

$$\underbrace{(p \cdot p \cdot p \,.....\, p)}_{(n_1 \text{ termos})} \cdot \underbrace{(q \cdot q \cdot q \,.....\, q)}_{(n_2 \text{ termos})} = p^{n_1} q^{n_2}$$

• Há muitas maneiras possíveis para que os passos sejam dados. Note, porém, que estes n_1 e n_2 passos, por se tratarem de ***grandezas indistinguíveis***, o número de possibilidades será:

$$\boxed{\frac{N!}{n_1!n_2!} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!}}$$

; como no caso das bolas de bilhar

• Desta forma, ***a probabilidade de que aconteça uma certa sequência de passos*** (***p*** passos para a direita e ***q = 1- p*** passos para a esquerda), será fornecida multiplicando-se a probabilidade desta sequência ($p^{n_1} \cdot q^{n_2}$) pelo *número de combinações* possíveis, ou seja:

$$P_{N,n_1} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!}\, \mathrm{p}^{n_1}\, \mathrm{q}^{N - n_1}$$

• Determinação do '*valor esperado*' através do cálculo do '***valor médio***'.

• Lembrando: dado uma grandeza $\boldsymbol{u}$ que pode assumir valores $u_1, u_2, u_3, \ldots, u_M$, com probabilidades específicas: $p_1, p_2, p_3, \ldots, p_M$, o ***valor médio*** de $\boldsymbol{u}$ é dado por:

$$\bar{u} = \langle u \rangle = \frac{p_1 u_1 + p_2 u_2 + p_3 u_3 + \ldots + p_M u_M}{p_1 + p_2 + p_3 + \ldots + p_M} = \frac{\sum_{i=1}^{M} p_i u_i}{\sum_{i=1}^{M} p_i}$$

- O valor médio de qualquer função de **u**: (***f(u) = u*** ***f(u) = u²***, ***f(u) = u^{1/2}***, etc.) pode ser calculado fazendo:

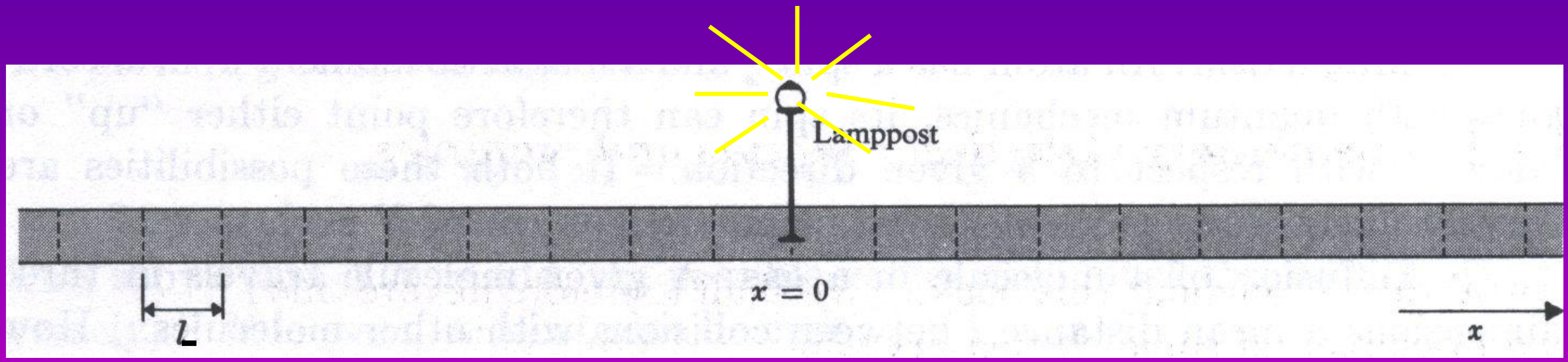
$$< f(u) >= \frac{\sum_{i=1}^{M} p_i f(u_i)}{\sum_{i=1}^{M} p_i}$$

- Sendo que, usualmente: $\sum_{i=1}^{M} p_i = 1$ (normalização)

- Desta forma: $\boxed{< f(u) >= \sum_{i=1}^{M} p_i f(u_i)}$

• Vamos ver agora como estes conceitos estão relacionados com a ***Entropia***.

• Retornando ao problema do ***random – drunk – walk***, supor que no ponto de partida a luz do poste esteja ***acesa***.



• Pergunta: é razoável supor que haverá uma probabilidade maior de encontrar a pessoa, em torno de ***x = 0***, quando a luz está acesa do que quando ela está apagada?

• E se a luz estiver apagada e, ainda por cima, existir uma colmeia de abelhas no poste?

• Resumindo, será que poderíamos associar um certo grau de ordem/desordem a esta ‘maior probabilidade’ de encontrar a pessoa não longe do poste?

• Ou seja, haveria um maior ‘ordenamento do problema’ na situação de luz acesa do que apagada (e com abelhas)?

• Para responder esta última pergunta, vamos imaginar um ***ensamble*** composto de vários arranjos idênticos a este anteriormente discutido (*random – drunk – walk*).

• Se fizermos uma medida de posição da pessoa, em qual situação, ***na média***, teremos maior probabilidade de encontra-la perto do poste?

• E a esta situação de ***maior probabilidade***, ela corresponderia a uma condição de ***maior*** ou ***menor entropia***?

• Responder esta pergunta seria muito fácil se conseguíssemos obter alguma equação que relacionasse *cálculo de probabilidade* com a própria *entropia*.

• Uma condição que devemos ter em mente, para nos guiar nesta empreitada, é que entropia trata-se de uma grandeza ***extensível***, i. e., se um sistema *C* tem componentes A e B, então $\mathbf{S_C = S_A + S_B}$ (por ex., $\Delta S_{universo} = \Delta S_{sistema} + \Delta S_{vizinhança}$).

• A questão, agora, é descobrir ***como*** relacionar a entropia ***S*** (que mede grau de ordem/desordem) com a distribuição de probabilidade p_i .

• Note que o **produto das probabilidades**, $(\mathbf{p_1 \cdot p_2 \cdot \ldots \cdot p_n})$ apenas não serve, porque basta uma das probabilidades $p_i = 0$ que o produto todo se anula, em qualquer situação!

• Agora, a ***soma das probabilidades*** **($p_1 + p_2 + \ldots + p_n$)** também não serve porque o resultado será sempre ***1*** (sistemas normalizados)

• E que tal tentarmos relacionar ***Entropia*** com cálculo da ***Probabilidade Média***?

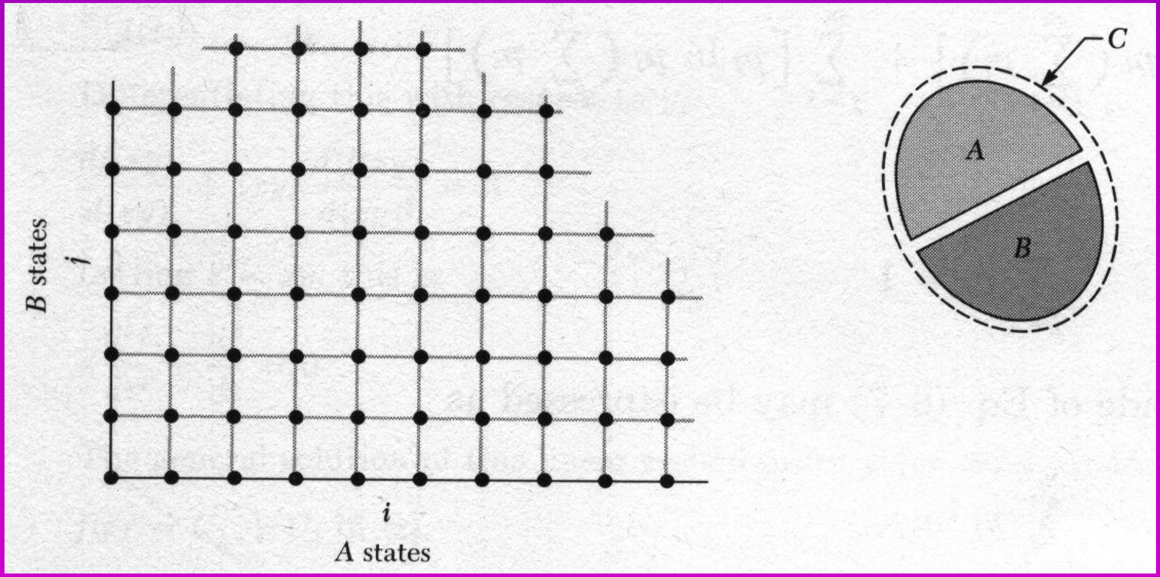
• Pelo que já discutimos no problema do *random-walk*, esta pode ser uma boa alternativa .

• Aplicando o resultado ao qual chegamos anteriormente:

$$< f(u) > = \sum_{i=1}^{M} p_i f(u_i) \quad \rightarrow \quad < p > = \sum_i p_i p_i = \sum_i p_i^2$$

• Vamos agora verificar a questão da ‘extensibilidade’, supondo um sistema ***C*** composto de sub-sistemas ***A*** (com ***m*** estados possíveis) e ***B*** (com ***n*** estados possíveis), uns independentes dos outros, de forma que ***os estados possíveis de C resultarão de uma combinação dos estados de A e de B***.

• Ou seja, se os estados de ***A*** são numerados (de ***i = 1*** a ***n***) ; e de **B** (de ***j = 1*** a ***m)***, os estados possíveis de ***C*** serão determinados por pares específicos de ***i, j***.



• Agora, se p_i corresponde à probabilidade do *i-ésimo* estado de ***A***, e p_j do j-ésimo estado de ***B***, então o produto $p_i \cdot p_j = p_{ij}$ será a probabilidade de ocorrência do ***estado i,j*** de ***C***.

• Por exemplo, se a chance do **estado** ***n=2*** (de *A*) existir for 0,2 e a do **estado** ***m=6*** (de B) for 0,3, então haverá ***0,06 de chance*** dos ***dois estados existirem ao mesmo tempo***; ou seja, a probabilidade do estado (2,6) de ***C*** existir será **0,06** ou **6%:**

• Agora, em termos dos ***valores médios***:

$$< p >_A = \sum_{i=1}^{n} p_i^2 \quad \text{e} \quad < p >_B = \sum_{j=1}^{m} p_j^2$$

• E para ***C***:

$$< p >_C = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} (p_i p_j)^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_{ij}^2 \qquad \rightarrow$$

$$\rightarrow \quad <p>_C = \sum_{i=1}^{n} \left[p_i^2 \left(\sum_{j=1}^{m} p_j^2 \right) \right] = \sum_{i=1}^{n} p_i^2 <p>_B = <p>_A <p>_B$$

• Ou seja, $<p>_C \neq <p>_A + <p>_B$; de forma que a probabilidade média ***Não É*** extensiva e, portanto, não pode representar a Entropia do sistema.

• Mas, como descobrir então a função que estamos pocurando para a entropia ***S***?

• Mantendo a idéia de que o cálculo da '***alguma média***' parece ser representativo da ordem/desordem, vamos calcular:

$$S = <f> = \sum_i p_i \cdot f(p_i)$$

e tentar descobrir a função ***f*** adequada

- Assim:

$$S_A = \sum_{i=1}^{n} p_i \cdot f(p_i) \qquad S_B = \sum_{j=1}^{m} p_j \cdot f(p_j)$$

- De forma que:

$$S_C = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_{ij}\, f(p_{ij}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} (p_i \cdot p_j)\, f(p_{ij})$$

- Mas, como <u>desejamos</u> que $S_A + S_B = S_C$ (*extensível*), então vamos impor:

$$\sum_{i=1}^{n}(p_i) f(p_i) + \sum_{j=1}^{m}(p_j) f(p_j) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} (p_i \cdot p_j)\, f(p_{ij})$$

- E esta igualdade <u>***deve valer***</u> para quaisquer valores de p_i e p_j.

Lembrando que ***ln a + ln b = ln (a·b)*** e <u>escolhendo</u> ***f ( ) = ln ( )***:

$$S_C = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}(p_i \cdot p_j) f(p_{ij}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_i p_j \ln(p_{ij}) \quad =$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_i p_j \ln(p_i) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} p_i p_j \ln(p_j) \quad =$$

$$= \sum_{i=1}^{n}[p_i \ln p_i \, (\underbrace{\sum_{j=1}^{m} p_j}_{=1})] + \sum_{j=1}^{m}[p_j \ln p_j \, (\underbrace{\sum_{i=1}^{n} p_i}_{=1})] \quad =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} p_i \ln p_i + \sum_{j=1}^{m} p_j \ln p_j = S_A + S_B$$

• Ou seja, podemos definir ***Entropia*** como sendo uma medida da ordem/desordem das ***partes de um sistema*** (*sub-sistemas*), que apresentam valores de probabilidades ***p_i***, como:

$$S_i = -k\sum_i p_i \cdot \ln p_i$$

(***definição de Entropia de Gibbs***)

• Sendo que a constante ***k*** (de ***Boltzmann***; ***$k = 1{,}38 \cdot 10^{-23}$ J/K***) foi introduzida para deixar o resultado mais geral; e o sinal (-), para manter a Entropia uma grandeza positiva (uma vez que ***p_i*** é sempre menor que a unidade).

• Na particular situação em que a distribuição de probabilidade envolve um número ***Ω*** de estados que possuem a mesma probabilidade de ocorrência (*energia*), ou seja, ***$p_i = 1/\Omega$***, então:

$$S = -k\sum_{i=1}^{\Omega}\frac{1}{\Omega}\cdot\ln\frac{1}{\Omega} = -k\,\Omega\,(\frac{1}{\Omega}\ln\frac{1}{\Omega}) = -k\ \ln\frac{1}{\Omega}$$

• Finalmente: $\boxed{S = k\ln\Omega}$ ***(definição de Entropia de Boltzmann)***

(aplicável apenas quando os estados possuem mesma probabilidade)

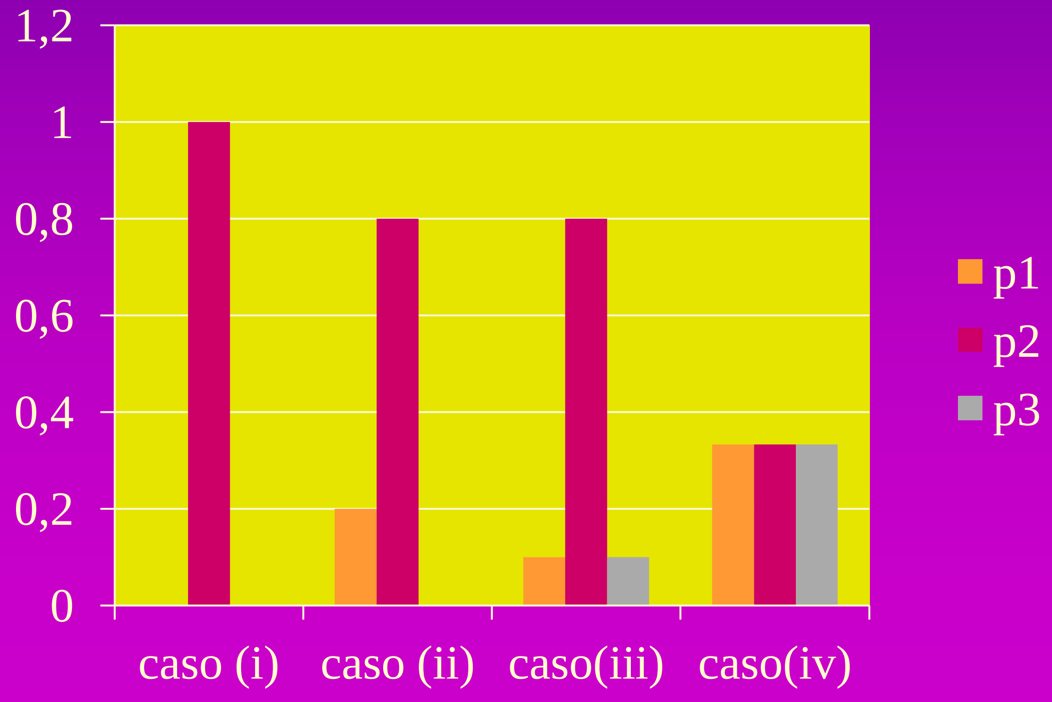
• Ex. Supor sistema que envolve 3 possibilidades (estados) de ser encontrado (por ex., bola jogada em uma caixa com 3 furos de tamanhos diferentes), com as seguintes probabilidades:

(i) p_1 = 0,0; p_2 = 1,0; p_3 = 0,0 ; ***(ii)*** p_1 = 0,2; p_2 = 0,8; p_3 = 0,0 ***(iii)*** p_1 = 0,1; p_2 = 0,8; p_3 = 0,1 e ***(iv)*** $p_1 = p_2 = p_3$ = 1/3. ***a)*** Em qual situação teríamos uma maior 'desordem' do sistema?

b) Calcule a entropia do sistema em cada caso.

a) Se após uma 'jogada' (uma medida) '*chutássemos*' que a bola passou pelo ***buraco 2***, nossa chance de acerto seria de ***100%*** em (***i***) ***80%*** de certeza em (***ii***) ou (***iii***) e ***33,3%*** em (***iv***).

• Ou seja, a situação de '*menor certeza*' ("maior desordem") seria na ***situação (iv)***, que envolve um ***maior número de possibilidades*** (curva de distribuição ***mais larga***).



b) Cálculo de Entropia:

• caso ***(i)***: note que ***a fórmula de Gibbs*** deve ser utilizada, já que as probabilidades dos vários estados são diferentes:

$$S_i = -k\sum_i p_i \cdot \ln p_i = -k(\underbrace{0\ln 0}_{0} + \underbrace{1\ln 1}_{0} + \underbrace{0\ln 0}_{0}) = 0$$

• caso ***(ii)***: $S_{ii} = -k(\underbrace{0{,}2\ln 0{,}2}_{-0{,}322} + \underbrace{0{,}8\ln 0{,}8}_{-0{,}179} + \underbrace{0\ln 0}_{0}) = 0{,}501\,k$

• caso ***(iii)***: $S_{iii} = -k(\underbrace{0{,}1\ln 0{,}1}_{-0{,}230} + \underbrace{0{,}8\ln 0{,}8}_{-0{,}179} + \underbrace{0{,}1\ln 0{,}1}_{-0{,}230}) = 0{,}639\,k$

• caso ***(iv)***:

$$S = -k\sum_i p_i \cdot \ln p_i = -k(\underbrace{1/3\ln 1/3}_{-0,366} + \underbrace{1/3\ln 1/3}_{-0,366} + \underbrace{1/3\ln 1/3}_{-0,366}) = 1,099\,k$$

Observe que ***neste caso***, poderíamos ter optado por utilizar a ***fórmula de Boltzmann***, sendo que $\boldsymbol{\Omega = 3}$, já que o sistema possui três estados possíveis, igualmente prováveis:

$$\boxed{S = k\ln\Omega} = k(\ln 3) = 1,099\,k$$