

A ENTROPIA E O TRIÂNGULO DE PASCAL

André de Carvalho Caruzo¹, Karina Ferreira Neves², Ricardo Roberto Plaza Teixeira³

Resumo: O principal objetivo deste trabalho é apresentar um método diferente de cálculo em problemas envolvendo probabilidades e a sua aplicação para a contagem de microestados de sistemas físicos ideais. Para a completa compreensão desta idéia é necessário entender o conceito de equiprobabilidade por meio da construção de um algoritmo semelhante ao algoritmo do triângulo de Pascal e utilizá-lo na descrição de sistemas físicos para obter informações sobre a entropia. Desta forma, foram elaborados problemas de física estatística inspirados em exercícios envolvendo a contagem de auto-estados acessíveis de sistemas com poucas partículas, possibilitando um melhor entendimento de diferentes conceitos físicos.

Palavras-chave: entropia. probabilidade.

Abstract: The main objective of this work is to present a method of calculation in questions of probabilities and its application for the counting of microstates of ideal physical systems. For the complete understanding of this idea it is necessary to understand the concept of equiprobability by means of the construction of a similar algorithm to the Pascal triangle and using it in the description of physical systems to get information about the entropy. In this way, problems of physical statistics inspired in exercises had been elaborated involving the counting of accessible self-states of systems with few particles, making possible one better understanding of different physical concepts.

Key words: entropy. probability.

1. Introdução

É impossível fugir do objetivo de medir algo para saber o que está acontecendo e o que pode vir a acontecer, seja em física clássica, quântica ou relativística. Por exemplo: existem nessas teorias algo em comum, coisas imutáveis, verdadeiras bússolas para orientar e nos deixar em “segurança” em relação à natureza, como a existência de um éter, de uma incerteza mínima calculada ou de uma velocidade finita e constante em todos os referenciais inerciais.

Mas mesmo assim, as coisas podem ficar complicadas. Vejamos a descrição de um sistema físico composto por muitas moléculas: os gases. Com número gigantesco de partículas, imagine a dificuldade de escrever todas as – trilhões de trilhões (no caso de cerca de um mol) – de equações para cada partícula do sistema? Pelo menos, até o presente momento, isto é pouco prático. Além disso, devemos nos perguntar: quais informações podemos obter a partir dos dados coletados? Seria realmente necessário um hercúleo trabalho com uma imensa quantidade de equações para descrevermos o sistema para as nossas necessidades? Apesar de combatido por muitos de seus pares, Ludwig Boltzmann lançou algumas das bases para a compreensão de fenômenos macroscópicos da natureza, inserindo o conceito probabilístico como arma intelectual para o entendimento dessa área, possibilitando a construção de modelos probabilísticos e estatísticos que nos levou a áreas antes nunca navegadas e nos fez enxergar uma natureza caprichosa e volátil. O principal objetivo deste trabalho é descrever sistemas físicos e retirar informações sobre a entropia, usando para isso um algoritmo similar ao algoritmo do Triângulo de Pascal que pode ser também chamado de algoritmo do “sólido probabilístico”. Serão apresentados problemas de física estatística,

¹ Curso de licenciatura em física do CEFET-SP.

² Curso de licenciatura em física do CEFET-SP. E-mail: medulalis@ig.com.br.

³ Doutor em física pela USP e professor do CEFET-SP (Rua Pedro Vicente, 625 – São Paulo – SP – CEP: 01109-010) e da PUC-SP (Rua Monte Alegre, 984 – São Paulo – SP – CEP: 05014-001). E-mail: rrpoteixeira@bol.com.br.

envolvendo contagens de micro-estados acessíveis de sistemas com poucas partículas que são úteis para a compreensão do conceito de entropia.

2. Jogo de dados

O estudo da probabilidade foi denominado por Pascal como “geometria do acaso” (Coutinho, 1996); foi Pascal quem no século XVII elaborou a definição clássica da probabilidade de um evento A ocorrer como sendo igual a razão entre o número total de casos favoráveis e o número total de casos possíveis, mas foi Jacques Bernoulli quem propôs uma visão frequentista para estimar a probabilidade de um evento pela sua frequência observada quando a experiência é repetida um número muito grande de vezes, o que pode ser uma aproximação adequada quando trabalhamos com a termodinâmica. Um sólido conhecimento a respeito de probabilidades é fundamental nesta e em muitas outras áreas do conhecimento. A esse respeito, o Marquês de Condorcet destacou a importância do estudo das técnicas probabilísticas: “Ver-se-á quanto, se esta ciência for mais divulgada, mais cultivada, ela contribuirá para a felicidade e para o aperfeiçoamento da raça humana”.

No lançamento de um dado honesto (não-viciado) as seis faces são equiprováveis. Logo $P(\text{face}=1)=P(2)=P(3)=P(4)=P(5)=P(6)=1/6$.

Mas, se existirem mais que um dado, o que acontecerá com os eventos e com as probabilidades dos diferentes resultados possíveis? Estes diferentes resultados serão equiprováveis como no caso de um dado só? Como as pessoas se comportam ao se depararem com um problema desta natureza? Por exemplo: se em uma sala de aula, um professor lança um problema envolvendo dois dados, qual é a intuição majoritária inicial por parte dos alunos?

Com dois dados, o valor da soma das duas faces que caíram para cima variará de um mínimo de 2 (=1+1) até um máximo de 12 (=6+6): existirão 11 macroestados possíveis: 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12. Entretanto eles não serão equiprováveis. Para perceber isto em primeiro lugar é necessário perceber por meio de um diagrama em árvore que se no primeiro dado haverá 6 possibilidades, no segundo dado, para cada uma das 6 possibilidades anteriores haverá outras 6 possibilidades, e, portanto, existirão um total de 36 possibilidades de microestados que são apresentados na tabela abaixo:

	2° dado					
1° dado	1	2	3	4	5	6
1	2	3	4	5	6	7
2	3	4	5	6	7	8
3	4	5	6	7	8	9
4	5	6	7	8	9	10
5	6	7	8	9	10	11
6	7	8	9	10	11	12

Tabela 1. Diferentes possibilidades para o valor obtido para a soma jogando-se dois dados.

É possível perceber, portanto que há somente uma maneira de a soma dar 2 que é o par: (1;1). Mas há 6 maneiras de a soma dar 7 que são os pares: (6;1); (5;2); (4;3); (3;4); (2;5); (1;6). Logo as probabilidades para cada um dos valores da soma serão: $P(\text{soma}=2)=1/36$; $P(3)=2/36$; $P(4)=3/36$; $P(5)=4/36$; $P(6)=5/36$; $P(7)=6/36$; $P(8)=5/36$; $P(9)=4/36$; $P(10)=3/36$; $P(11)=2/36$; $P(12)=1/36$.

Em algumas experiências didáticas realizadas em salas de aulas de alguns cursos universitários, submetemos os alunos ao problema envolvendo dois dados, para o qual eles deveriam “apostar” no resultado que julgassem com mais chance no caso de um só dado e no

caso de dois dados. Esta pesquisa foi feita com um total de 190 estudantes universitários de diversos cursos superiores (administração, biologia e pedagogia).

A primeira pergunta feita foi: “No caso em que um dado apenas é jogado, se você tiver que apostar em um valor da face que sairá para cima, em que valor você apostaria de 1 a 6?” A distribuição das respostas é apresentada no gráfico 1.

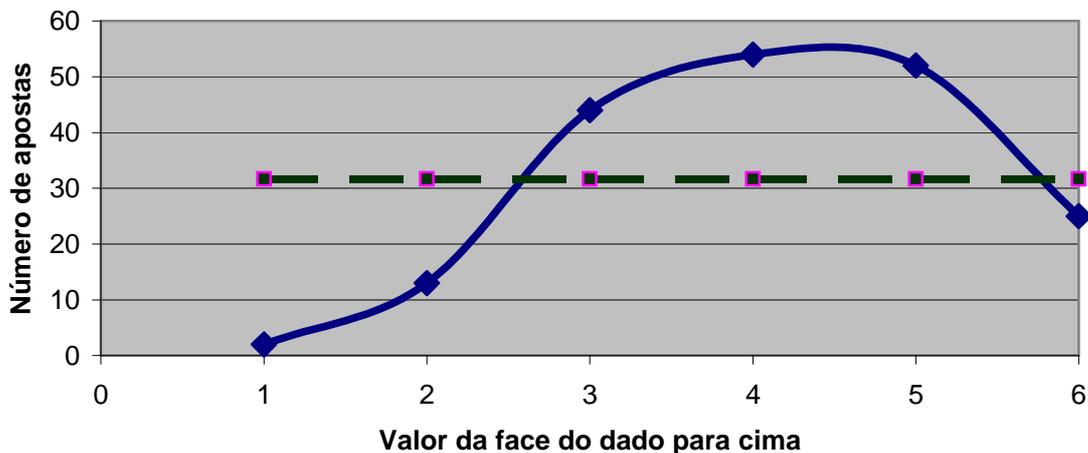


Gráfico 1. Número de "apostas" para cada valor possível de um dado (de 1 a 6); total = 190 pesquisados; linha contínua: valores observados; linha tracejada: valores teóricos

A segunda pergunta feita foi: “No caso em que dois dados são jogados, se você tiver que apostar em um valor para a soma dos valores das faces que sairão para cima, em que valor você apostaria de 2 a 12?” A distribuição das respostas é apresentada no gráfico 2.

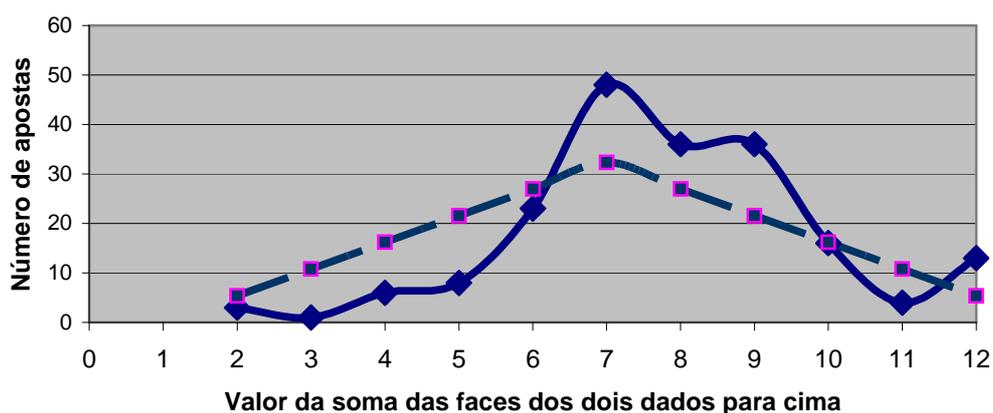


Gráfico 2. Número de "apostas" para cada valor possível para a soma dos dados (de 2 a 12); total = 190 pesquisados; ; linha contínua: valores observados; linha tracejada: valores previstos teoricamente

O valor médio esperado no caso do lançamento de 1 dado é 3,5 (a média entre 1, 2, 3, 4, 5 e 6) e o valor médio de todas as apostas no lançamento de um dado foi de cerca de 4,14.

Já no lançamento de dois dados, o valor médio esperado para a soma é 7 (que além de ser o valor modal da distribuição de probabilidades, também é a média entre os extremos 2 e 12, visto que esta distribuição é simétrica) e o valor médio de todas as apostas foi de cerca de 7,83. É possível perceber, portanto, que as pessoas sistematicamente preferem “apostar” em valores mais altos!

A dificuldade na interpretação deste problema por parte de muitos alunos reside no fato de que o número de eventos possíveis é igual ao número de resultados possíveis para o lançamento de um dado, mas o mesmo não ocorre para dois dados: neste caso há 11 resultados possíveis (macro-estados), mas 36 eventos possíveis (micro-estados). A tendência de muitas pessoas é misturar equivocadamente os conceitos de evento e resultado, sem considerarem que o evento é qualquer configuração possível dos lançamentos e o resultado advém da soma das faces voltadas para cima. Há alguns ainda que intuem equivocadamente que se para um dado os resultados são equiprováveis, o mesmo se daria para dois dados. E há, finalmente, aqueles outros que não compreendem a importância da ordem dos resultados neste problema, ou seja, que o evento (1;6) – 1 no primeiro dado e 6 no segundo dado – é diferente do evento (6;1) – 6 no primeiro dado e 1 no segundo dado – e, portanto, devem ambos ser contados no momento de calcular as probabilidades de se obter a soma 7. Uma estratégia didática para se perceber isto é pintar cada dado de uma cor diferente! De qualquer forma este exemplo dos dois dados permite compreender que a questão básica no cálculo de probabilidades envolve a contagem dos eventos possíveis e que portanto, técnicas de contagem que envolvam fórmulas podem ser úteis no caso de uma imensa quantidade de eventos para os quais a contagem direta evento a evento pode ser impraticável.

Sintetizando, ao jogar dois ou mais dados, tudo o que se observa é o conjunto final dos números para a soma (resultados) sendo que a seqüência específica que produziu esta soma fica “oculta” (eventos). Se somente o resultado interessa, parece não ter importância a forma como ele foi obtido, mas “ao se computarem as probabilidades, entretanto, é essencial conhecer o número de modos (eventos) equiprováveis graças aos quais um resultado pode ocorrer” (Bennett, 2003).

3. O Triângulo de Pascal

O triângulo aritmético, mais conhecido como triângulo de Pascal ou de Tartaglia – a propósito, este triângulo já era conhecido pelos chineses dois mil anos antes de Pascal – revela-nos uma propriedade que se esclarecerá melhor na sua montagem. Observe-o na tabela abaixo:

1					
1	1				
1	2	1			
1	3	3	1		
1	4	6	4	1	
1	5	10	10	5	1

Tabela 2. Triângulo de Pascal

Sendo **k** a linha (começando da linha zero) e **m** a coluna (começando da coluna zero), cada elemento é o resultado da combinação de **k** elementos dispostos de **m** em **m** que é dada pela fórmula de análise combinatória:

$$C_{k,m} = k! / m!(k-m)! \quad (1).$$

O elemento da primeira linha é o resultado de $C_{0,0} = 0! / 0!(0-0)! = 1$, os elementos da segunda linha são os resultados de $C_{1,0}$ e $C_{1,1}$, os elementos da terceira linha são $C_{2,0}$, $C_{2,1}$, $C_{2,2}$, os elementos da quarta linha são $C_{3,0}$, $C_{3,1}$, $C_{3,2}$, $C_{3,3}$. Além da fórmula das combinações para calcular os números que pertencem ao triângulo, há também a relação de Stiffel, que afirma que a soma de dois termos subseqüentes de uma linha é igual ao termo da linha inferior abaixo do segundo destes dois termos, por exemplo: $C_{2,0} + C_{2,1} = C_{3,1}$, ou se preferirmos $1 + 2 = 3$. Portanto, o triângulo analisado usando a notação de combinação é mostrado na tabela abaixo:

$C_{0,0}$					
$C_{1,0}$	$C_{1,1}$				
$C_{2,0}$	$C_{2,1}$	$C_{2,2}$			
$C_{3,0}$	$C_{3,1}$	$C_{3,2}$	$C_{3,3}$		
$C_{4,0}$	$C_{4,1}$	$C_{4,2}$	$C_{4,3}$	$C_{4,4}$	
$C_{5,0}$	$C_{5,1}$	$C_{5,2}$	$C_{5,3}$	$C_{5,4}$	$C_{5,5}$

Tabela 3. Triângulo de Pascal usando a notação da análise combinatória.

Logo, a forma mais geral para a relação de Stiffel é: $C_{k,m} + C_{k,m+1} = C_{k+1,m+1}$.

Na estatística, o triângulo aritmético é usado em problemas como no lançamento de moedas, nos seguintes casos: a) Eventos equiprováveis, no lançamento de uma moeda (neste caso, só há dois eventos: cara ou coroa, correspondendo aos números 1 e 1 da segunda linha do triângulo); b) Eventos não-equiprováveis, no lançamento de k moedas ($k \geq 2$); no caso de duas moedas, por exemplo, podemos obter nenhuma cara no total (em 1 evento possível: quando sai coroa-coroa) ou podemos obter 1 cara no total (em 2 eventos possíveis: quando sai cara-coroa ou quando sai coroa-cara) ou podemos obter duas caras no total (em 1 evento possível: quando sai cara-cara) que correspondem aos números 1, 2 e 1 da terceira linha do triângulo de Pascal.

Na álgebra, os números do triângulo de Pascal são os coeficientes da expansão do binômio $(x + 1)^k$, com n pertencendo ao conjunto dos números naturais. Isto pois a primeira linha do triângulo é a expansão do binômio $(x + 1)^0 = 1$, a sua segunda linha é composta pelos coeficientes da expansão $(x + 1)^1 = x + 1$, ou seja, 1 e 1, e a terceira é composta pelos coeficientes da expansão de $(x + 1)^2 = x^2 + 2x + 1$, que são 1, 2 e 1.

Uma questão um pouco mais complexa é: "Qual a probabilidade de que ao se jogar três dados, a soma das faces seja maior ou igual a dezesseis?" Na resolução tradicional, utiliza-se o método de contagem direto. Para o cálculo das probabilidades deve-se primeiro ter em mente quantas combinações (eventos) totais são possíveis: $6^3 = 216$. Para soma=16, temos as seguintes combinações: (6,6,4), (6,4,6), (4,6,6), (5,5,6), (5,6,5), (6,5,5); para soma=17, as combinações são: (6,6,5), (5,6,6), (6,5,6); e, finalmente, para soma=18 só há apenas a combinação (6,6,6). Portanto, $P(\text{soma} \geq 16) = 6/216 + 3/216 + 1/216 = 10/216$.

4. Algoritmo do Triângulo de Pascal generalizado

No algoritmo generalizado do triângulo de Pascal, a idéia usada para as moedas (que só têm 2 faces) será aproveitada e generalizada para construir um triângulo específico para os dados (que têm 6 faces). No triângulo de Pascal para as moedas somavam-se dois termos subseqüentes de uma linha para se obter o termo da linha inferior abaixo do último termo somado. Agora, somam-se seis termos subseqüentes de uma linha para obter o termo abaixo do último dos seis termos somados, pois temos seis faces em um dado. Desta forma, a primeira linha deste algoritmo corresponde a zero dados, a segunda linha corresponde a um jogo com um dado (6 resultados equiprováveis para a face que pode variar de 1 a 6), a terceira linha corresponde a um jogo com dois dados (11 resultados possíveis e não-equiprováveis

para a soma que pode variar de 2 a 12) e a quarta linha corresponde a um jogo com três dados (16 resultados possíveis para a soma que pode variar entre 3 e 18). O número de faces dos nossos dados (cúbicos) corresponde à quantidade de algarismos na segunda linha deste algoritmo, assim como, da mesma forma, acontecia com o número de faces das moedas no triângulo de Pascal original. Observe sua construção até a 4ª linha apresentada na tabela abaixo.

1
1 1 1 1 1 1
1 2 3 4 5 6 5 4 3 2 1
1 3 6 10 15 21 25 27 27 25 21 15 10 6 3 1

Tabela 4. Triângulo de Pascal generalizado.

Por exemplo, o **6** central da terceira linha obtém-se somando 1+1+1+1+1+1 da linha superior (segunda linha) e o primeiro **21** da quarta linha obtém-se somando 1+2+3+4+5+6 da linha superior (terceira linha). Então a relação de Stiffel deve ser generalizada pela relação segundo a qual um elemento qualquer do triângulo proposto pode ser obtido pela soma de parte dos elementos da linha acima segundo a equação (2):

$$a_{km} = \sum_{q=1}^6 a_{k-1, m+q-6} \quad (2),$$

ou ainda, de forma genérica, como a equação (3):

$$a_{km} = \sum_{q=1}^f a_{k-1, m+q-f} \quad (3),$$

sendo $f=6$ para um dado cúbico e $f=2$ para uma moeda.

Como para três dados a menor soma possível é 3 e a maior é 18, podemos associar os números presentes na quarta linha do triângulo proposto aos resultados para a soma entre 3 e 18, como aparece na tabela abaixo:

Soma	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Possibilidades	1	3	6	10	15	21	25	27	27	25	21	15	10	6	3	1

Tabela 5. Possibilidades para a soma dos valores de 3 dados

Por exemplo, só há uma (primeiro número da linha) maneira de obtermos soma=3 que é (1,1,1) mas há 3 (segundo número da linha) maneiras de obtermos soma=4 que são: (1,1,2), (1,2,1) e (2,1,1). Portanto, sabendo que para 3 dados há $6^3=216$ eventos possíveis, observando as linhas acima, obteremos as possibilidades de forma direta para a questão “Qual a probabilidade de que ao se jogar três dados, a soma das faces seja maior ou igual a dezesseis?”: para soma 16 temos a probabilidade 6/216; para a soma 17 ela é 3/216; para a soma 18 a probabilidade é 1/216. Portanto a probabilidade da soma ser maior ou igual a 16 é 10/216.

5. A Termodinâmica e a Entropia

A termodinâmica é uma ciência experimental que diz respeito a propriedades macroscópicas – ou de grande escala – da matéria e a compreensão dos estados termodinâmicos de sistemas ocorre por meio de grandezas chamadas de variáveis de estado, dentre as quais está a entropia. A compreensão do conceito de entropia é possível de ser feita por meio de modelos teóricos probabilísticos. Quando observamos nossas concepções sobre o universo, fica claro que a evolução da ciência baseia-se nos rearranjos de muitos dos conceitos físicos sobre a natureza das coisas, complementados freqüentemente pela proposição de novos – e revolucionários – conceitos.

A física clássica e a estatística até o século XIX pareciam opostas por natureza: a primeira, determinística e a segunda, aleatória. Por isto é que até mesmo Poincaré chegou a atacar os trabalhos de Boltzmann chamando-os de incoerentes pelo fato de que, segundo ele, as conclusões estarem em desacordo com as premissas (Prigogine, 2002). Mas a física nem sempre evoluiu apegando-se a coerência às idéias vigentes hegemonicamente. O caminho trilhado pela física estatística foi o salto “observacional” obtido quando assumimos que apesar de não conseguirmos “ver” matematicamente todas as partículas, podemos inferir a respeito do seu comportamento macroscópico mais provável, o que é o suficiente para as necessidades vigentes.

Se observarmos os padrões detectados na natureza, notamos uma tendência para a desorganização: dos polens na água à destruição de um formigueiro, da decomposição dos corpos à transmissão de calor. A natureza age de forma equalizadora, subjugando tudo a sua volta, e levando à uniformidade e à desorganização. A entropia entendida como variável de estado (Keller et al., 1997) que mede o grau de desorganização ou de desordem de um sistema (Serway, 1996) é uma idéia antiga, mas há pouco tempo definida. A Segunda Lei da Termodinâmica, que envolve o conceito de entropia e afirma que em um sistema fechado sofrendo uma evolução espontânea, a entropia total nunca diminui (Macedo, 1976), mantendo-se constante nos processos reversíveis ou aumentando nos processos irreversíveis (Reif, 1983; Ruelle, 1993), é, no final, um ajuste da Primeira Lei da Termodinâmica, que envolve basicamente o conceito de energia e afirma que em um sistema fechado a energia total se conserva, explicando porque um pêndulo deve frear ou porque as máquinas devem parar, apontando o que acontecerá conforme o fluxo do tempo segue a sua marcha “inexorável” e fornecendo desta forma uma “flecha para o tempo” (Prigogine, 1996).

Segundo a definição de Boltzmann, a entropia S em função do número de micro-estados possíveis ω é dada por $S=k \cdot \ln \omega$ (Serway, 1996), sendo k a denominada constante de Boltzmann (Young e Freedman, 2003). Portanto, a entropia, uma medida do grau de desordem (Sarmiento, 1993), é também uma medida da quantidade de micro-estados possíveis em uma escala logarítmica. Assim sendo, para o caso dos dois dados, o macro-estado para a soma=7 é aquele associado ao maior número de micro-estados $\omega=6$ e, portanto, é o mais provável de acontecer ou, alternativamente, aquele com “maior entropia”.

6- Formas de contagem

O número de microestados $\Phi_p(n)$ possíveis para um macro-estado com energia total E_T , pode ser calculado por relações que variam em função do número de partículas (p) e do número de níveis (n) de energia possíveis a serem ocupados pelas partículas, que pode ser também definido como sendo o número de pacotes de energia aceitos. Se há n níveis de energia possíveis, estes níveis terão energia 0, 1, 2, 3, ... , $(n-2)$, $(n-1)$. Portanto se a energia máxima é E_T , neste nosso sistema de unidades temos que $E_T=n-1$, ou seja, $n=E_T+1$ (assumimos que o nosso sistema de unidades é tal que E_T é um número natural). Por exemplo, se $E_T=8$ é porque há $n=9$ níveis para serem ocupados por partículas: 0,1,2,3,4,5,6,7,8.

Para um sistema composto por uma só partícula, o número de microestados será um, pois a única possibilidade é a de que a partícula contenha o pacote que encerra a energia total

do sistema e essa energia não poderá ser perdida. Podemos, neste caso, representar o número de microestados (Φ) com a seguinte relação (que independe de n):

$$\Phi_1(n) = 1 \quad (4).$$

Em um sistema com duas partículas, o número de microestados será o número de pacotes energéticos aceitos, de modo que a energia deve ser arranjada entre as duas partículas de forma a não ultrapassar e nem ser menor que a energia total (E_T) contida no sistema (Lightman, 1995). Então os n níveis energéticos possíveis de serem ocupados pelas duas partículas em ordem crescente são $0, 1, 2, 3, 4, \dots, n-1$ (pois $E_T = n-1$). Se a energia total (macroestado) é $E_T = n-1$ as 2 partículas só poderão se agrupar pelos extremos, ou seja, nos microestados: $(E_T, 0)$; $(E_T - 1, 1)$, $(E_T - 2, 2)$, ... $(0, E_T)$. Como o número de arranjos existentes é n :

$$\Phi_2(n) = n \quad (5).$$

A relação para um sistema com três partículas se fará por meio de uma matriz $\Phi_{p \times n}$ sendo p o número de partículas e n o número de níveis aceitos, com relações de recorrência muito parecidas com as idéias básicas dos triângulos numéricos supracitados; observe:

$$\Phi_{pn} = 1, \text{ se } p=1 \quad (6),$$

e

$$\Phi_{pn} = \sum \Phi_{p-1,k}, \text{ se } p > 1 \text{ (com a soma indo de 1 até } n) \quad (7).$$

Portanto os elementos da matriz $\Phi_{p \times n}$ serão dados pela tabela abaixo:

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	...	1
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	...	n
1	3	6	10	15	21	28	36	45	55	66	78	...	A_{3n}
1	4	10	20	35	56	84	120	165	220	286	364		

Tabela 6. Elementos da matriz $\Phi_{p \times n}$

Para calcular Φ_{3n} , o número de microestados em um sistema com três partículas, ou melhor, para determinar a relação a ser usada em um sistema com três partículas é preciso notar que os elementos da terceira linha são a soma de elementos de uma progressão aritmética, pois a segunda linha, que deve ser somada para obtermos a terceira, é uma progressão aritmética de razão um. Pela fórmula das soma dos termos de uma progressão aritmética teremos:

$$\Phi_3 = (n+1).n/2 \Rightarrow \Phi_3(n) = \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{2} n \quad (8).$$

Observando as relações $\Phi_1(n)$, $\Phi_2(n)$ e $\Phi_3(n)$:

$$\begin{aligned} \Phi_1(n) &= 1, \\ \Phi_2(n) &= n, \\ \Phi_3(n) &= \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{2} n, \end{aligned}$$

pode-se então inferir que para as demais teremos:

$$\begin{aligned} \Phi_4(n) &= \alpha n^3 + \beta n^2 + \gamma n \text{ e} \\ \Phi_5(n) &= \alpha' n^4 + \beta' n^3 + \gamma' n^2 + \delta' n \end{aligned}$$

Portanto, generalizando, Φ passa a ser dependente da variável p também:

$$\Phi(p,n) = a n^{p-1} + b n^{p-2} + c n^{p-3} + \dots + z n \quad (9).$$

Para determinarmos $\Phi(4,n)$ temos que obter os coeficientes α , β e γ , e com um tratamento algébrico elementar obtemos $\alpha=1/6$, $\beta=1/2$ e $\gamma=1/3$ e portanto temos:

$$\Phi_4(n) = 1/6 n^3 + 1/2 n^2 + 1/3 n \quad (10).$$

Temos então duas maneiras de determinar o número de microestados, mas para um número da ordem de dezenas de partículas e dezenas de pacotes energéticos, esses métodos podem se tornar exaustivos. Por exemplo, imagine um sistema com trinta partículas e vinte pacotes energéticos para serem distribuídos entre elas. Teríamos que construir uma matriz $\Phi_{30 \times 20}$ para determinar o elemento $\Phi(30,20)$ ou então determinar os coeficientes da relação:

$$\Phi(30,20) = \alpha (20)^{29} + \beta (20)^{28} + \gamma (20)^{27} + \dots + \delta (20) \quad (11).$$

Mas usando uma planilha eletrônica de cálculo como o Excel é possível facilmente construir a matriz $\Phi_{p \times n}$. Por exemplo: para $p=4$ partículas e $n=12$ pacotes energéticos, primeiramente na célula L1 (a 12ª letra) coloca-se o algarismo 1. Na célula abaixo, L2 deve-se inserir a fórmula: “=SOMA(A1:L1)”. Em seguida, com o cursor em L2 esta fórmula deve ser arrastada 11 colunas para a direita (ou seja, até a coluna W) e 3 linhas para baixo (até a linha 5). A matriz que será obtida entre as células L2 e W5 será uma matriz com 4 linhas (o número de partículas) e com 12 colunas (o número de níveis de energia aceitos) e na planilha terá o aspecto abaixo (como todas as células entre as colunas A e K estarão vazias, apresentamos apenas as colunas a partir da letra L).

	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W
1	1											
2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
3	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
4	1	3	6	10	15	21	28	36	45	55	66	78
5	1	4	10	20	35	56	84	120	165	220	286	364

Tabela 7. Matriz construída a partir de uma planilha eletrônica

Uma relação generalizada para realizar esta contagem pode ser obtida a partir de:

$$\Phi(p,n) = \frac{1}{(p-1)!} \prod_{k=0}^{p-2} (n+k) \quad (12).$$

Esta expressão pode ser escrita de forma mais simples como:

$$\Phi(p,n) = \frac{(n+p-2)!}{(p-1)!(n-1)!} \quad (13).$$

Esta relação mais compacta e geral (Salinas, 2005) servirá para qualquer número de partículas e de pacotes de energia e com isto poderemos simular sistemas maiores e mais complexos. Desta forma $\Phi(p,n)$ é uma função simétrica trocando-se p por n.

7. Aplicação: sistema (A-B) com 7 partículas das quais 4 em A e 3 em B

Seja o sistema (A-B) com um total de 7 partículas com A possuindo 4 partículas e B possuindo 3 partículas e com energia total igual a 11E. As partículas neste caso são todas independentes entre si e exceto pelo fato de que a energia total do sistema é 11E, as partículas são livres para ocuparem quaisquer níveis de energia. Além disso, todas as configurações possíveis, ou seja, todas as divisões possíveis de energia do sistema ocorrem com a mesma probabilidade (Eisberg, 1979). Como a energia total é 11E, há então $n=12$ níveis de energia, ou pacotes de energia, possíveis para as partículas de 0E até 11E. Qual a configuração energética mais provável? Sabemos pela 2ª lei da termodinâmica que o sistema A-B tenderá ao equilíbrio térmico ou seja $T_A=T_B$ (Halliday et al., 2002). Considerando a Temperatura média T como uma medida da razão da energia (E) pelo número de partículas (p), podemos escrever: $T=E/p$. Portanto, espera-se que o sistema A-B tenderá espontaneamente a uma situação para a qual $T_A \sim T_B$.

As configurações energéticas possíveis para A e B, são dadas pela tabela abaixo:

Sistema A com 4 partículas	Sistema B com 3 Partículas
11 E	0 E
10 E	1 E
9 E	2 E
8 E	3 E
7 E	4 E
6 E	5 E
5 E	6 E
4 E	7 E
3 E	8 E
2 E	9 E
1 E	10 E
0 E	11 E

Tabela 8. Configurações energéticas possíveis para A e B

É necessário calcular o número de micro-estados acessíveis de cada configuração energética, usando a equação (13) para cada um dos dois sistemas. É importante também notar que o número de estados acessíveis para o sistema total A-B é igual ao produto do número de estados acessíveis para A e para B, ou seja, $\Phi_{A-B}=\Phi_A \times \Phi_B$.

Logo, por exemplo, no caso em que o sistema A tem energia 11E e o sistema B tem energia 0E, teremos $\Phi_{A-B} = \Phi_A(p=4, n=12) \times \Phi_B(p=3, n=1)$. Como $\Phi_A(4, 12) = (12+4-2)! / [(12-1)!(4-1)!] = 364$ e $\Phi_B(3, 1) = (1+3-2)! / [(1-1)!(3-1)!] = 1$, teremos que neste caso $\Phi_{A-B} = 364$ e portanto há 364 micro-estados possíveis com as 4 partículas do sistema A com energia total 11E e com as 3 partículas do sistema B com energia total de 0E de forma que a energia total do sistema A-B seja 11E.

Isto pode ser obtido também com o uso da matriz numérica Φ_{pn} com p=4 linhas (correspondendo cada linha aos casos com 1, 2, 3 ou 4 partículas) e com 12 colunas (correspondendo aos 12 pacotes de energia possíveis de serem adquiridos por cada partícula, desde 0E até 11E):

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	3	6	10	15	21	28	36	45	55	66	78
1	4	10	20	35	56	84	120	165	220	286	364

Tabela 9. Valores da matriz Φ_{pn} com 4 linhas e 12 colunas

Portanto em nossas contas para o caso do sistema A com 4 partículas usaremos a 4ª linha desta tabela e para o caso do sistema B com 3 partículas usaremos a 3ª linha desta tabela. É possível construir desta maneira a tabela abaixo que resume os resultados para esta aplicação.

E_A	E_B	T_A	T_B	$ T_A - T_B $	Φ_A	Φ_B	$\Phi_A \times \Phi_B$	Probabilidade
11	0	11/4=2,75	0/3=0	2,75	364	1	364	2,94%
10	1	10/4=2,5	1/3=0,33	2,17	286	3	858	6,93%
9	2	9/4=2,25	2/3=0,67	1,58	220	6	1320	10,67%
8	3	8/4=2	3/3=1	1	165	10	1650	13,33%
7	4	7/4=1,75	4/3=1,33	0,42	120	15	1800	14,54%
6	5	6/4=1,5	5/3=1,67	0,17	84	21	1764	14,25%
5	6	5/4=1,25	6/3=2	0,75	56	28	1568	12,67%
4	7	4/4=1	7/3=2,33	1,33	35	36	1260	10,18%
3	8	3/4=0,75	8/3=2,67	1,92	20	45	900	7,27%
2	9	2/4=0,5	9/3=3	2,5	10	55	550	4,44%
1	10	1/4=0,25	10/3=3,33	3,08	4	66	264	2,13%
0	11	0/4=0	11/3=3,67	3,67	1	78	78	0,63%
							Soma=12376	Soma=100 %

Tabela 10. Configurações possíveis e suas probabilidades (sistema A com 4 partículas e sistema B com 3 partículas)

Pode-se observar pela tabela que temos as duas configurações mais prováveis têm $E_A/E_B = 7/4$ e a $E_A/E_B = 6/5$ com probabilidades de ocorrência de respectivamente 14,54% e 14,25%. As probabilidades de ocorrência dessas configurações energéticas, portanto, corroboram a 2ª Lei da Termodinâmica, pois nota-se que as temperaturas em A e em B, são as mais próximas entre si nestas duas configurações em relação a todos os outros casos e então $T_A \sim T_B$ que é a condição aproximada para ocorrer o equilíbrio térmico. O gráfico abaixo apresenta este comportamento evidenciando que nesta situação o módulo para a diferença entre as temperaturas de A e de B é o menor possível para $E_B = 3E$ e para $E_B = 5E$.

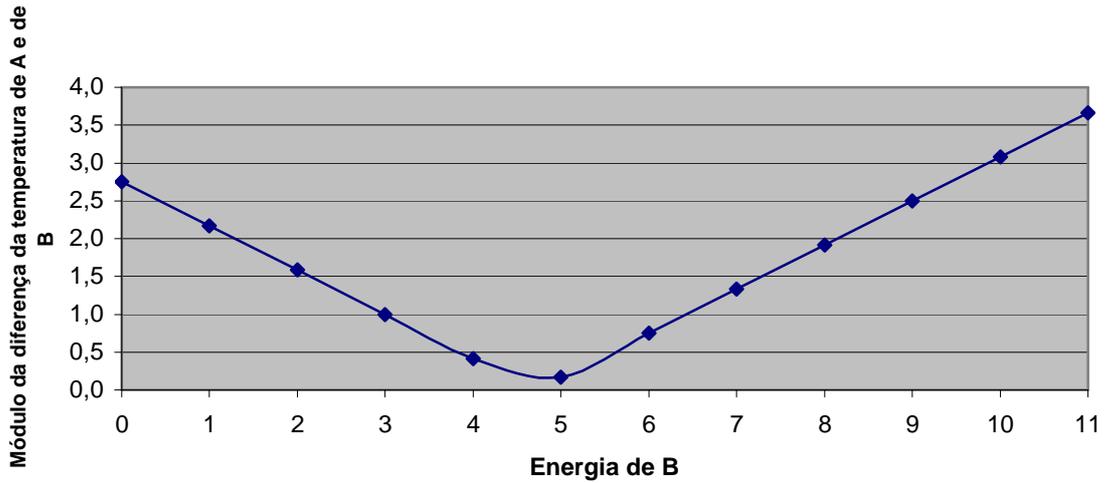


Gráfico 3. Módulo da diferença das temperaturas de A e de B em função da energia de B para a situação na qual A tem 4 partículas e B tem 3 partículas

8. Aplicação: sistema (A-B) com 70 partículas das quais 40 em A e 30 em B

Seja o sistema (A-B) com um total de 70 partículas com A possuindo 40 partículas e B possuindo 30 partículas e também com energia total igual a 11E, idêntica a do exemplo anterior. O processo de cálculo deve ser o mesmo do exemplo anterior visto que a energia total do sistema (A-B) é a mesma (11E).

Poderíamos calcular o número de micro-estados possíveis utilizando a matriz numérica Φ_{pn} , mas precisaríamos construí-la com 12 colunas e 40 linhas visto que necessitaríamos da 30ª linha e da 40ª linha, para obtermos o número de configurações para 30 e 40 partículas respectivamente, de acordo com a tabela abaixo:

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
.											.
.											.
.											.
$\Phi_{30,1}$	$\Phi_{30,2}$	$\Phi_{30,3}$	$\Phi_{30,4}$...							$\Phi_{30,12}$
.											.
.											.
.											.
$\Phi_{40,1}$	$\Phi_{40,2}$	$\Phi_{40,3}$	$\Phi_{40,4}$...							$\Phi_{40,12}$

Tabela 11. Valores da matriz Φ_{pn} com 40 linhas e 12 colunas

Desta maneira a tabela abaixo resume os resultados para esta outra aplicação.

E_A	E_B	T_A	T_B	$\left \frac{T_A - T_B}{T_B} \right $	Φ_A	Φ_B	$\Phi_A \times \Phi_B$	Probabilidade
11	0	11/40=0,275	0/30=0	0,275	$3,74 \cdot 10^{10}$	1	$3,74 \cdot 10^{10}$	0,36%
10	1	10/40=0,250	1/30=0,033	0,217	$8,22 \cdot 10^9$	30	$2,46535 \cdot 10^{11}$	2,35%
9	2	9/40=0,225	2/30=0,067	0,158	$1,68 \cdot 10^9$	465	$7,79855 \cdot 10^{11}$	7,44%
8	3	8/40=0,200	3/30=0,100	0,100	$3,14 \cdot 10^8$	$4,96 \cdot 10^3$	$1,55971 \cdot 10^{12}$	14,89%
7	4	7/40=0,175	4/30=0,133	0,042	$5,35 \cdot 10^7$	$4,09 \cdot 10^4$	$2,19023 \cdot 10^{12}$	20,90%
6	5	6/40=0,150	5/30=0,167	0,017	$8,15 \cdot 10^6$	$2,78 \cdot 10^5$	$2,26641 \cdot 10^{12}$	21,63%
5	6	5/40=0,125	6/30=0,200	0,075	$1,09 \cdot 10^6$	$1,62 \cdot 10^6$	$1,76276 \cdot 10^{12}$	16,82%
4	7	4/40=0,100	7/30=0,233	0,133	$1,23 \cdot 10^5$	$8,35 \cdot 10^6$	$1,03019 \cdot 10^{12}$	9,83%
3	8	3/40=0,075	8/30=0,267	0,192	$1,15 \cdot 10^4$	$3,86 \cdot 10^7$	$4,4322 \cdot 10^{11}$	4,23%
2	9	2/40=0,050	9/30=0,300	0,250	820	$1,63 \cdot 10^8$	$1,3367 \cdot 10^{11}$	1,28%
1	10	1/40=0,025	10/30=0,333	0,308	40	$6,36 \cdot 10^8$	$2,54 \cdot 10^{10}$	0,24%
0	11	0/40=0	11/30=0,367	0,367	1	$2,31 \cdot 10^9$	$2,31 \cdot 10^9$	0,02%
							Soma= $1,05 \cdot 10^{13}$	Soma=100 %

Tabela 12. Configurações possíveis e suas probabilidades (sistema A com 40 partículas e sistema B com 30 partículas)

Neste caso, pelas informações da tabela, as duas configurações mais prováveis têm $E_A/E_B=7/4$ e a $E_A/E_B=6/5$ com probabilidades de ocorrência de respectivamente 20,90% e 21,63%. Estas probabilidades de ocorrência dessas configurações energéticas também corroboram a 2ª Lei da Termodinâmica, pois para estes dois casos as temperaturas em A e em B, são as mais próximas entre si em relação a todas as outras configurações e novamente temos $T_A \sim T_B$, a condição para o equilíbrio térmico. O gráfico abaixo apresenta este comportamento evidenciando que nesta situação o módulo para a diferença entre as temperaturas de A e de B é o menor possível para $E_B=4E$ e para $E_B=5E$.

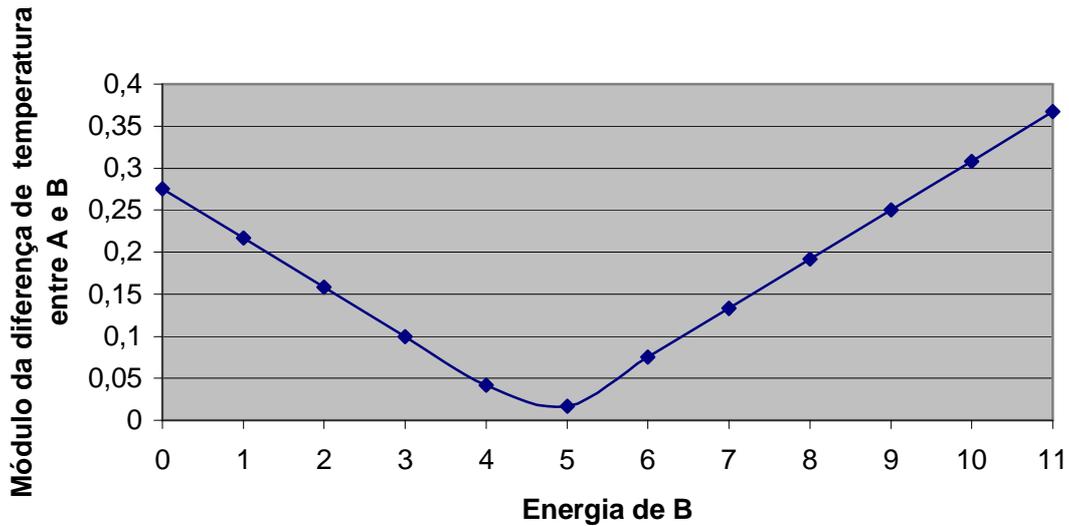


Gráfico 4. Módulo da diferença das temperaturas de A e de B em função da energia de B para a situação na qual A tem 40 partículas e B tem 30 partículas

As duas aplicações descritas anteriormente podem ser resumidas pelo gráfico abaixo que apresenta as probabilidades de configurações do sistema (A-B) em função da energia de B nos dois casos. No caso em que há 4 partículas em A e 3 partículas em B, a probabilidade (entropia) máxima encontra-se próxima de $E_B=4E$ ou de $E_B=5E$. No caso com 50 partículas em A e 25 em B pode-se perceber que a probabilidade (entropia) máxima encontra-se próxima de $E_B=3E$ ou de $E_B=4E$. É possível perceber que os casos extremos – por exemplo, aquele no qual a energia de B é nula e A tem toda a energia do sistema que é $11E$ – são menos prováveis na situação com 70 partículas que naquela com só 7 partículas.

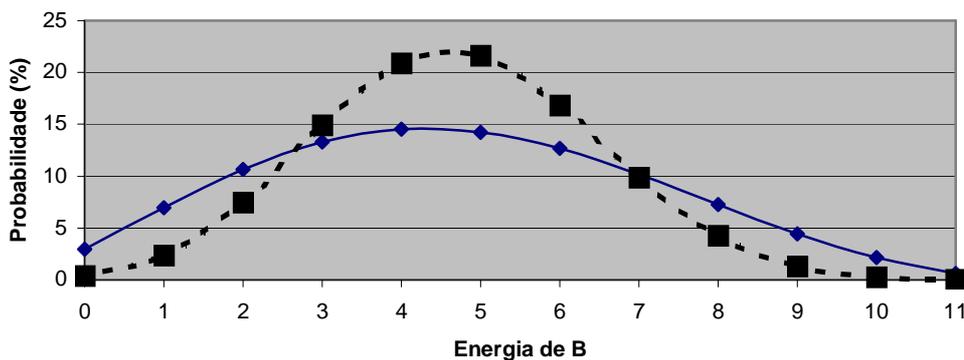


Gráfico 5. Probabilidade de configurações do sistema (A-B) em função da energia de B para as duas situações analisadas: 1-A com 4 partículas e B com 3 partículas (linha contínua); 2- A com 40 partículas e B com 30 partículas (linha tracejada)

9. Conclusões

O presente trabalho procurou enfatizar a importância do desenvolvimento de técnicas de contagem no estudo da entropia. O algoritmo simples do triângulo de Pascal, na verdade já conhecido pelos chineses muitos séculos antes, pode ser generalizado de forma a permitir que o trabalho em contar o número de micro-estados possíveis seja facilitado. Nesta situação, o uso da relação de Stiffel generalizada é fundamental na construção da tabela, ou matriz, com os elementos deste triângulo numérico que pode ser nomeado como sólido probabilístico.

A equação 13 determina o número de microestados acessíveis em um sistema com energia total E_T , e p partículas e n pacotes (níveis) de energia (entre 0 e E_T) para serem distribuídos para estas p partículas. Ela é uma alternativa no processo de contagem no caso de um número muito grande de partículas, dado que o outro caminho possível, que seria usar as relações de Stiffel, é muito mais trabalhoso de ser realizado manualmente, pois para calcular qualquer elemento Φ_{pn} da matriz do “triângulo de Pascal generalizado” é necessário ter de partida a linha que está acima da linha deste elemento, o que por recorrência torna necessário o cálculo de toda a matriz “acima” deste elemento. Em suma, para uma simulação, que poder ser feita com o auxílio de um computador, a utilização da matriz é mais prática que a fórmula.

A entropia é um importante conceito termodinâmico que está associado à desordem e à quantidade de microestados possíveis para um dado macroestado – ela é na verdade definida como sendo proporcional ao logaritmo do número de microestados (Ruelle, 1993). Desta forma, estados com mais microestados associados – ou seja, com uma maior “multiplicidade” de microestados – são mais prováveis que aqueles que tenham uma menor multiplicidade. Mas para uma compreensão sólida do conceito de entropia é útil usar analogias e aquela descrita neste trabalho a respeito da situação do jogo com dois dados pode propiciar interessantes discussões e reflexões sobre o caráter do conceito de entropia.

Referências

- BENNETT, Deborah. *Aleatoriedade*. São Paulo: Martins Fontes, 2003.
- COUTINHO, Cileda Q. S. *Introdução ao conceito de probabilidade: uma visão frequentista*. São Paulo: Educ, 1996.
- EISBERG, Robert. *Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas*. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
- HALLIDAY, D. et al. *Fundamentos de física-2*. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
- KELLER, F. J. et al. *Física – Volume 1*. São Paulo: Makron Books, 1997.
- LIGHTMAN, Alan. *Grandes ideias de la física*. Madrid: McGraw-Hill, 1995.
- MACEDO, H. *Dicionário de física*. Rio de Janeiro: Editora Nova Fronteira, 1976.
- PRIGOGINE, Ilya. *O fim das certezas – Tempo, caos e as leis da natureza*. São Paulo: Editora da Unesp, 1996.
- PRIGOGINE, Ilya. *As leis do caos*. São Paulo: Editora da Unesp, 2002.
- REIF, F. *Statistical and thermal physics*. Tokyo: McGraw-Hill, 1983.
- RUELLE, D. *Acaso e caos*. São Paulo: Editora da Unesp, 1993.
- SALINAS, S. R. A. *Introdução à física estatística*. São Paulo: Edusp, 2005.
- SARMIENTO, A. *Los disfraces del fantasma que nos horada – El concepto de tiempo en las ciencias y la tecnología*. México: Fondo de Cultura Económica, 1993.
- SERWAY, R. *Física 2*. Rio de Janeiro: LTC, 1996.
- YOUNG, H. e Freedman, R. *Física II*. São Paulo: Addison Wesley, 2003.