Entropia: uma medida multidisciplinar

Marcelo A. Pires

28/07/2014

Sumário

Objetivos

i) Discutir sobre a entropia.

ii) **Mostrar alguns exemplos de que através da entropia o Físico pode encontrar oportunidades para transitar em diversos campos da ciência.**

iii) Apresentar a implementação computacional na linguagem R dos exemplos discutidos[1].

[1]Todos os códigos desenvolvidos para esta palestra podem ser baixados livremente em `https://github.com/PiresMA`.

Origem do conceito de entropia

O conceito de entropia surgiu pela primeira vez no âmbito da termodinâmica, na metade do Século XIX, impulsionado pelo advento das máquinas térmicas.

O que é entropia?

A grandeza entropia foi introduzida por Rudolf Clausius como uma medida da irreversibilidade dos processos físicos.

i) Em um processo reversível: $\Delta S = 0$,

ii) Em um processo irreversível: $\Delta S > 0$.

O que é entropia?

A grandeza entropia foi introduzida por Rudolf Clausius como uma medida da irreversibilidade dos processos físicos.

i) Em um processo reversível: $\Delta S = 0$,

ii) Em um processo irreversível: $\Delta S > 0$.

Entropia Física: visão microscópica

Entropia, H: medida da desordem de um sistema Físico (Boltzmann–Gibbs):

$$H = -\sum_{k=1}^{W} p_k \log p_k$$

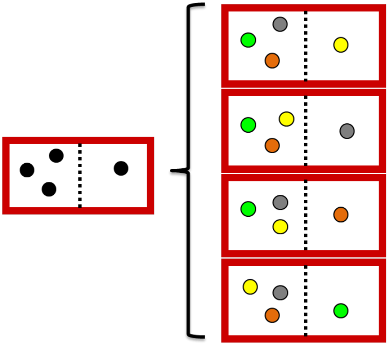
$W =$ número de microestados compatíveis com um dado macroestado (multiplicidade).
$p_k =$ probabilidade do sistema estar no microestado k.

Macroestado vs Microestado

1 Macroestado

4 Microestados

Macroestado
Esquerda: 3 bolas
Direita: 1 bolas



Microestado
Esquerda: V,C,L
Direita: A

Microestado
Esquerda: V,A,L
Direita: C

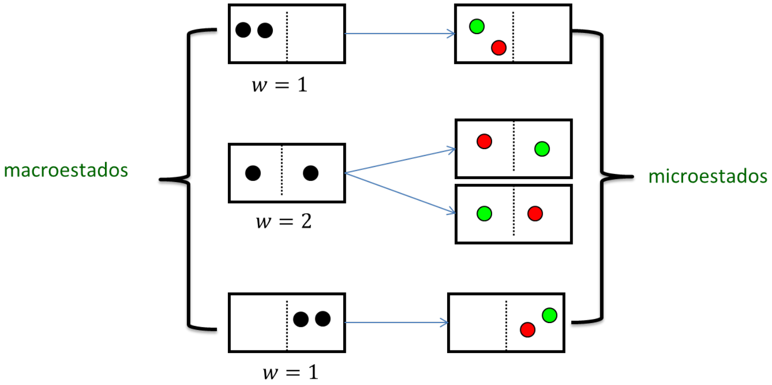
Microestado
Esquerda: V,A,C
Direita: L

Microestado
Esquerda: C,A,L
Direita: V

W=4

V=Verde,
C=Cinza,
A=Amarelo,
L=Laranja

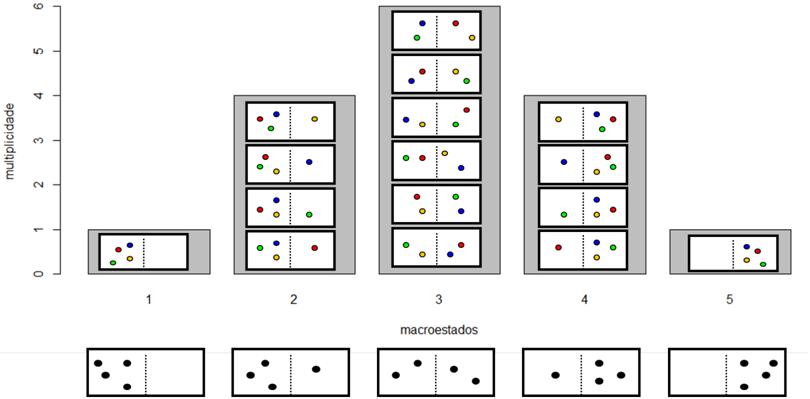
Multiplicidade



Desordem

Na Física Estatística, desordem é tomada como a quantidade de microestados possíveis para um determinado macroestado.

Qual é o macroestado com maior desordem? E o com menor desordem?



Desordem: uma analogia

Casa	Física Estatística
Desordem está relacionada a quantidade de coisas fora de seu local próprio.	Desordem está relacionada a quantidade de microestados em um dado macroestado.
Quanto maior o número de coisas fora de seu local próprio, maior a desordem.	Quanto maio o número de microestados acessíveis, maior a desordem, maior a entropia.
Casa ordenada: existe apenas um único local para guardar cada objeto. "cada coisa em seu lugar“.	Sistema ordenado: o macroestado tem apenas um único microestado.

Figura: Analogia entre desordem da Física Estatística e de uma casa (Borges, 1999).

Exemplo: expansão simples do gás de N partículas

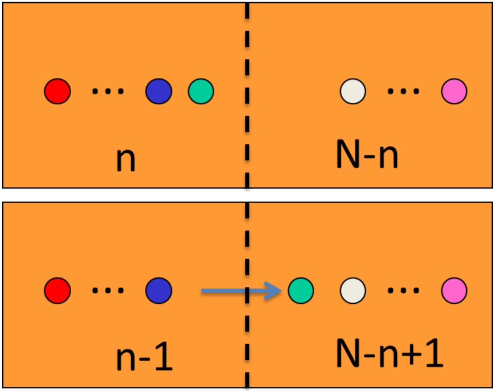


Figura: A cada instante uma partícula passa de uma metade para a outra.

Código na linguagem R do exemplo da entropia Física

```r
#-----------------------------------------------#
############ Entropia de Boltzmann-Gibbs  #########
#-----------------------------------------------#
# preparar grafico
par(mfrow=c(1,1))
Nmax=10; wmax=fac(Nmax)/(fac(Nmax/2)*fac(Nmax/2))
maxY=ceiling(log(wmax,  base = exp(1)))
plot((0:maxY)/maxY,0:maxY , type="n", xlab="ne/N", ylab="H")

W=ne=nd=p=c(NULL); q=1
for(N in seq(2,Nmax,2)){
  # inicializacao para cada iteracao
  ne[1]=N; nd[1]=0
  totEst=2^(N)
  W[1]=factorial(N)/(factorial(ne[1])*factorial(nd[1]))
  p[1]=W[1]/totEst
  # expansao do gas:
  # uma particula passa da metade esquerda para a direira
  for(c in 1:N){
    ne[c+1]=N-c
    nd[c+1]=c
    W[c+1]=fac(N)/(fac(ne[c+1])*fac(nd[c+1]))
    p[c+1]=W[c+1]/totEst
  }
  # calculo da entropia
  H=log(W, base = exp(1))
  #plot
  lines(ne/N, H, type="o", col=q)
  q=q+1
}
legend( "topleft", legend=seq(2,Nmax,2) ,
        col=1:(q-1) , pch=1)
```

4291:1 Entropia de Boltzmann-Gibbs R Script

Expansão simples do gás de N partículas.

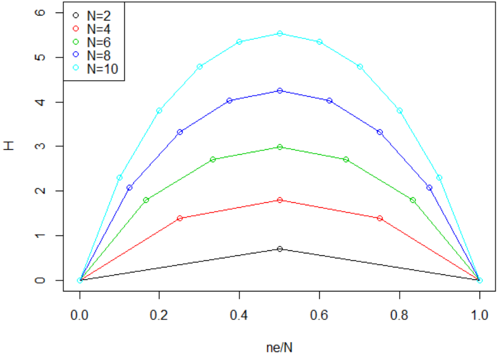


Figura: Entropia do sistema

Entropia: aplicações

A entropia tem sido aplicada com êxito em diversos campos da ciência tais como:

i) Teoria da Informação: medida da incerteza (Wise, 2012).
ii) Estatística: medida da heterogeneidade de um conjunto de dados (Vogel, 2014).
iii) Ecologia: medida da diversidade de espécies (Ricotta, 2006).
iv) Nanociência: medida da uniformidade espacial da distribuição de nanoparticulas sobre uma superfície (Kam, 2012).
v) Sociologia: medida da uniformidade das amizades (Eagle, 2010).

Entropia: aplicações

A entropia tem sido aplicada com êxito em diversos campos da ciência tais como:

i) Teoria da Informação: medida da incerteza (Wise, 2012).
ii) Estatística: medida da heterogeneidade de um conjunto de dados (Vogel, 2014).
iii) Ecologia: medida da diversidade de espécies (Ricotta, 2006).
iv) Nanociência: medida da uniformidade espacial da distribuição de nanoparticulas sobre uma superfície (Kam, 2012).
v) Sociologia: medida da uniformidade das amizades (Eagle, 2010).

Entropia na Teoria da Informação

Entropia, H: medida do gau de incerteza que existe antes que uma escolha seja feita (Shannonn):

$$H = -\sum_{k=1}^{W} p_k \log p_k$$

$W =$ número de possibilidades.
$p_k =$ probabilidade de ocorrência do evento k.

Exemplo: jogo de moeda

Em um jogo com uma moeda, seja:

i) p=probabilidade de sair cara,

ii) q=probabilidade de sair coroa.

Exemplo: jogo de moeda

Em um jogo com uma moeda, seja:

i) p=probabilidade de sair cara,

ii) q=probabilidade de sair coroa.

Agora considere as seguintes situações:

i) Uma moeda com duas caras (p=1, q=0),

ii) Uma moeda viciada em cara (p>q),

iii) Uma moeda honesta (p=q=0.5).

Exemplo: jogo de moeda

Em um jogo com uma moeda, seja:

i) p=probabilidade de sair cara,
ii) q=probabilidade de sair coroa.

Agora considere as seguintes situações:

i) Uma moeda com duas caras (p=1, q=0),
ii) Uma moeda viciada em cara (p>q),
iii) Uma moeda honesta (p=q=0.5).

Em qual dessas situações existe maior incerteza em relação ao resultado? E a menor incerteza?

Exemplo: jogo de moeda

Em um jogo com uma moeda, seja:

i) p=probabilidade de sair cara,

ii) q=probabilidade de sair coroa.

Agora considere as seguintes situações:

i) Uma moeda com duas caras (p=1, q=0),

ii) Uma moeda viciada em cara (p>q),

iii) Uma moeda honesta (p=q=0.5).

Em qual dessas situações existe maior incerteza em relação ao resultado? E a menor incerteza?

Exemplo: jogo de moeda

Na situação (i), moeda com duas caras, a incerteza é mínima (nula), pois antes de observar o resultado já podemos predizê-lo.

Exemplo: jogo de moeda

Na situação (i), moeda com duas caras, a incerteza é mínima (nula), pois antes de observar o resultado já podemos predizê-lo.

Na situação (iii), moeda honesta, a incerteza é máxima, pois não há nenhum privilégio para cara ou coroa.

Exemplo: jogo de moeda

Na situação (i), moeda com duas caras, a incerteza é mínima (nula), pois antes de observar o resultado já podemos predizê-lo.
Na situação (iii), moeda honesta, a incerteza é máxima, pois não há nenhum privilégio para cara ou coroa.

Código na linguagem R do exemplo do jogo de moedas

```r

#-------------------------------------------------#
############ Entropia e Informação     ############
#-------------------------------------------------#
# jogo de moeda
# declarações e inicializações
N=100
p=H=c(NULL)
H[1]=0;  H[N]=0
p[1]=0;  p[N]=1
#iteração
for( k in 2:(N-1)){
  #probabilidade de cara
  p[k]=k/N
  #probabilidade de coroa
  q=1-p[k]
  #entropia
  H[k]=-p[k]*log(p[k],base=2)-q*log(q,base=2)
}
#gráfico
plot(p,H, col="red")

```

Entropia Informacional

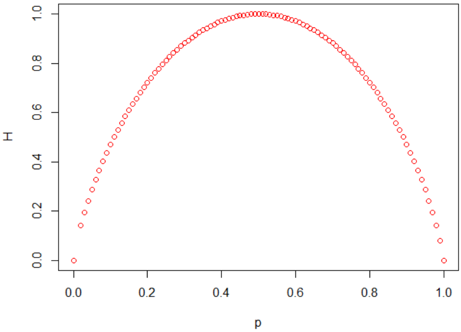


Figura: Entropia vs probabilidade para o jogo de distintas moedas.

Entropia em Estatística

Entropia, H: medida do grau de heterogeneidade de um conjunto de dados:

$$H = -\sum_{k=1}^{W} p_k \log p_k$$

W = número de ocorrências dos dados ou intervalo de classe.
p_k = probabilidade de ocorrência do k-ésimo valor ou k-ésimo intervalo de classe.

Qual distribuição tem maior entropia?

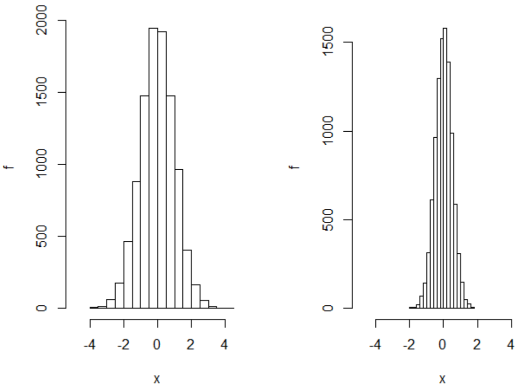
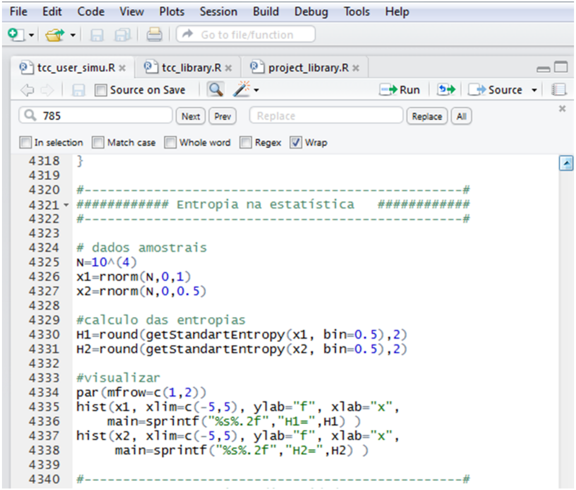


Figura: Distribuições de probabilidade gaussiana.

Código na linguagem R do exemplo da entropia na Estatística



Entropia em Estatística

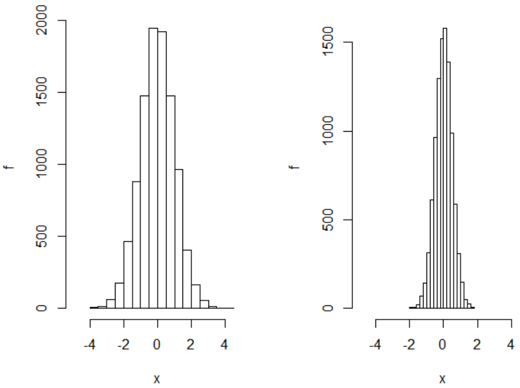


Figura: $H(esquerda) = 0.74$, $H(direita) = 0.67$

Entropia em Ecologia

Entropia, H: medida da diversidade de espécies:

$$H = -\sum_{k=1}^{W} p_k \log p_k$$

$W =$ número de espécies. Chamado também de riqueza.
$p_k =$ abundância relativa da k-ésima espécie.

Qual sistema tem maior diversidade?

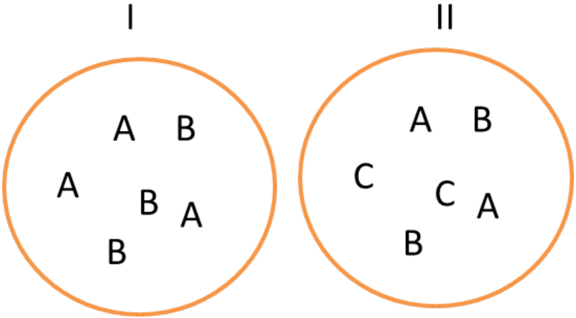


Figura: Dois sistemas com 6 indivíduos em cada.

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Ecologia

```r
#--------------------------------------------------#
############ Entropia e diversidade   ############
#--------------------------------------------------#

# Geração dos sistemas I e II
sis_I=c(3,3)
sis_II=c(2,2,2)

p=sis_I/sum(sis_I)
H1=-sum(p*log(p))
p=sis_II/sum(sis_II)
H2=-sum(p*log(p))

par(mfrow=c(1,2))
barplot(sis_I,ylim=c(0,3), names.arg=c("A","B"),
        xlab="Sistema I", ylab="número de indivíduos",
        main=sprintf("%s%.2f","H1=",H1) )
barplot(sis_II,ylim=c(0,3),names.arg=c("A","B","C"),
        xlab="Sistema II", ylab="número de indivíduos",
        main=sprintf("%s%.2f","H2=",H2) )
```

Entropia em Ecologia

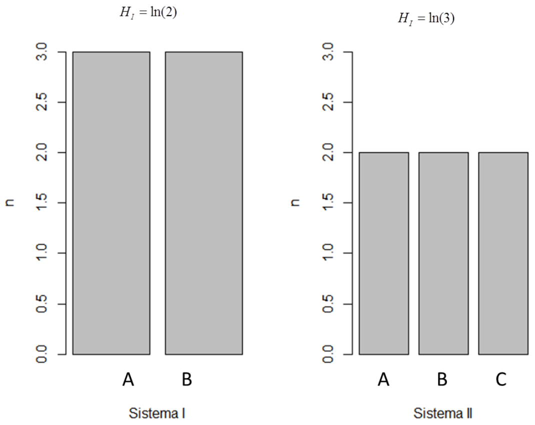


Figura: Diagrama de frequências dos sistemas I e II.

Entropia em Nanociência

Entropia, H: medida do grau de uniformidade espacial da distribuição de nanoparticulas sobre uma superfície:

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{ij} \log p_{ij}$$

$N =$ número de pontos em um perfil da malha superficial.
$p_{ij} =$ fração relativa de partículas no ponto (i,j) da malha superficial.

Entropia em Nanociência

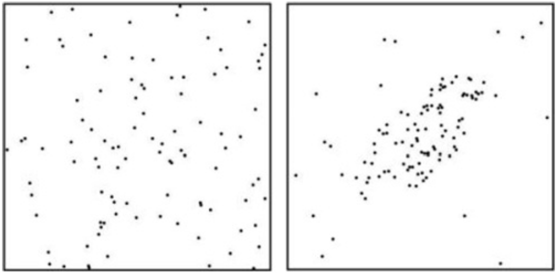


Figura: Sobre qual superfície a distribuição de nanopartículas é mais uniforme?.

Fonte: Kam KM , Et. Al. (2012) 'On assessing spatial uniformity of particle distributions in quality control of manufacturing processes', *J Manuf Syst*.

Entropia: exemplo

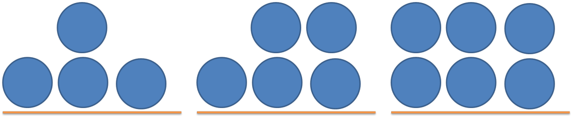


Figura: Qual perfil tem distribuição de nanopartículas mais uniforme?

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Nanociência

```r
#-----------------------------------------------#
############ Entropia em Nanociencia   ############
#-----------------------------------------------#

# perfil 1
perfil1=c(1,2,1); x=perfil1
namesBar=1:length(x);
barplot(x, names.arg=namesBar)
# calculo de probabilidades
p=x/sum(x)
#calculo da entropia normalizada
H1=-sum(p*log(p))/log(length(p))

# perfil 2
perfil2=c(1,2,2); x=perfil2
barplot(x, names.arg=namesBar)
# calculo de probabilidades
p=x/sum(x)
#calculo da entropia normalizada
H2=-sum(p*log(p))/log(length(p))

# perfil 3
perfil3=c(2,2,2); x=perfil3
barplot(x, names.arg=namesBar)
# calculo de probabilidades
p=x/sum(x)
#calculo da entropia normalizada
H3=-sum(p*log(p))/log(length(p))

```

4423:1 Entropia em Nanociencia R Script

Entropia: exemplo

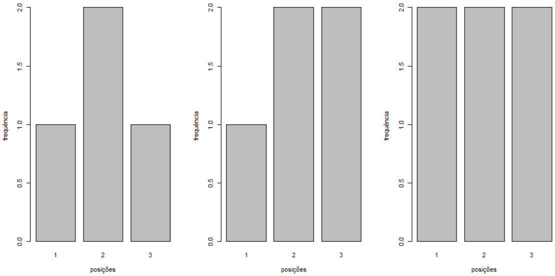


Figura: Qual perfil tem distribuição de nanopartículas mais uniforme?

Exemplo de cálculo de entropias da distribuição de nanopartículas.

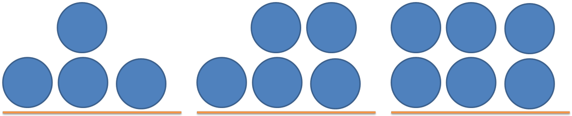


Figura: (esquerda) $H = 0.946$, (centro) $H = 0.960$, (direita) $H = 1.00$

Entropia em Sociologia

Entropia, H_i: medida da uniformidade das amizades da i-ésima pessoa.

$$H_i = -\sum_{k=1}^{W_i} p_{ik} \log p_{ik}$$

$W_i =$ número de amizades da i-ésima pessoa.
$p_{ik} =$ peso relativo da amizade entre as pessoas i e k.

Entropia em Sociologia

Um elevado valor de entropia implica que um indivíduo compartilha seu tempo com uma alta uniformidade entre os seus laços sociais.

Qual indivíduo tem maior entropia social?

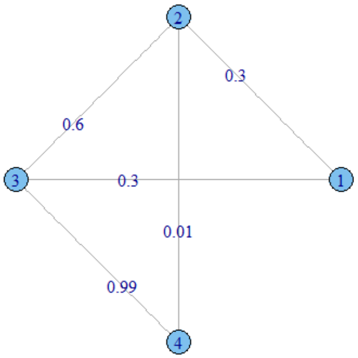


Figura: Rede com 4 pessoas. Os números nas arestas referem-se ao peso da amizade entre as pessoas.

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Sociologia

```r
#-------------------------------------------------#
############ Entropia em Redes Sociais ############
#-------------------------------------------------#
#Inicialização
num_cell<-4
mat_adj<-matrix(0 ,nrow=num_cell, ncol=num_cell)

# Criação da rede
mat_adj[1,2]<-1
mat_adj[1,3]<-1
mat_adj[2,3]<-1
mat_adj[2,4]<-1
mat_adj[3,4]<-1
g <- graph.adjacency( mat_adj, mode=c("undirected") )
E(g)$weight=c(0.3,0.3,0.6,0.01,0.99)

# Cálculo da entropia
round(graph.diversity(g), 2)

# Visualizar
par(mfrow=c(1,1))
plot(g, layout=layout.circle,
     edge.label=E(g)$weight)
```

Qual indivíduo tem maior entropia social?

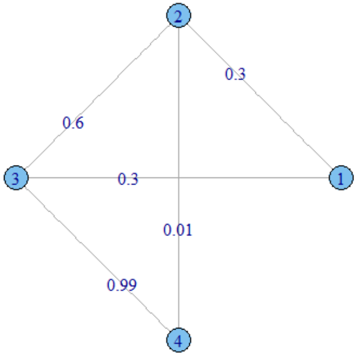


Figura: $H_1 = 1.00$, $H_2 = 0.63$, $H_3 = 0.91$ e $H_4 = 0.08$.

Considerações finais

Considerações finais

A entropia é uma das grandezas fundamentais da Física e que interessantemente gera oportunidades para o Físico transitar em outros campos da ciência. Nesse seminário apresentei uma coleção de exemplos de aplicações da entropia em outros ramos da ciência.

Referências

- Pierce, J. R.An Introduction to Information Theory: Symbols, Signals and Noise, 1980.
- Shannon, C. E. A Mathematical Theory of Communication, *Bell Syst. Tech. J.*, 1948.
- Borges, E. Irreversibilidade, Desordem e Incerteza: Três Visões da Generalização do Conceito de Entropia. *RBEF*, vol. 21, no. 4, 1999.
- Nathan Eagle, et al., Network Diversity and Economic Development, *Science* 328, 1029, 2010.
- Kam KM , Et. Al. 'On assessing spatial uniformity of particle distributions in quality control of manufacturing processes', *J Manuf Syst*, 2012.

Referências

- R Core Team (2012) ' R: A language and environment for statistical computing', *R Foundation for Statistical Computing*, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0.
- Vogel R. , et al. Diagnosing Leukemia Through Entropy, Physics, vol 7, 2014.
- A. Caticha, A. Golan / Physica A, 408, 2014.
- Wise S., Computers and Geosciences, 48, 2012.
- Carlo Ricotta, et al. Towards a unifying approach to diversity measures: Bridging the gap between the Shannon entropy and Rao's quadratic index, Theoretical Population Biology, 70, 3, 2006.

Obrigado pela atenção.