

Entropia: uma medida multidisciplinar

Marcelo A. Pires

28 de julho de 2014

Sumário

- 1 Objetivos
- 2 Entropia Física
 - Origem do conceito de entropia
 - O que é entropia?
 - Visão microscópica
 - Desordem
- 3 Multidisciplinaridade
 - Entropia na Teoria da Informação
 - Entropia em Estatística
 - Entropia em Ecologia
 - Entropia em Nanociência
 - Entropia em Sociologia
- 4 Considerações finais

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 discutidos¹.

¹Todos os códigos desenvolvidos para esta palestra podem ser baixados livremente em <http://recebererepassar.webnode.com/>.

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

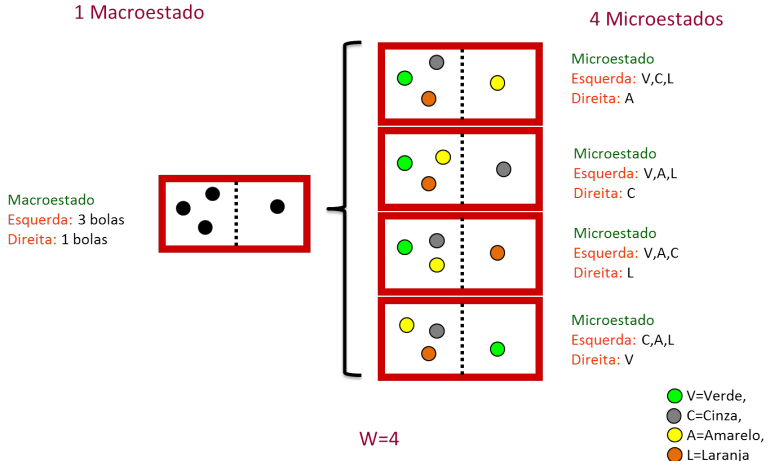
Entropia, H : medida da desordem de um sistema Físico
(Boltzmann–Gibbs):

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

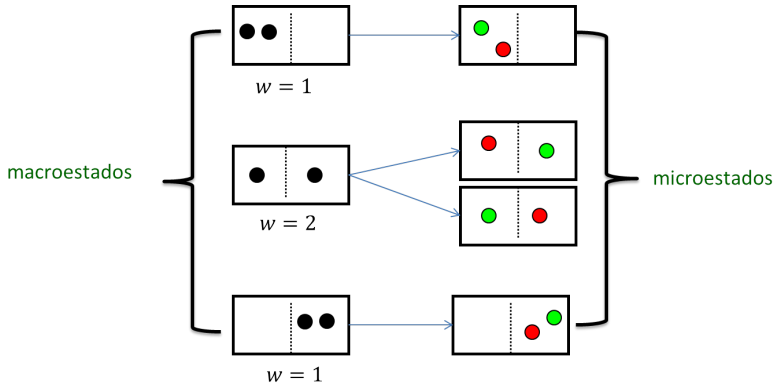
W = número de microestados compatíveis com um dado macroestado (multiplicidade).

p_k = probabilidade do sistema estar no microestado k .

Macroestado vs Microestado



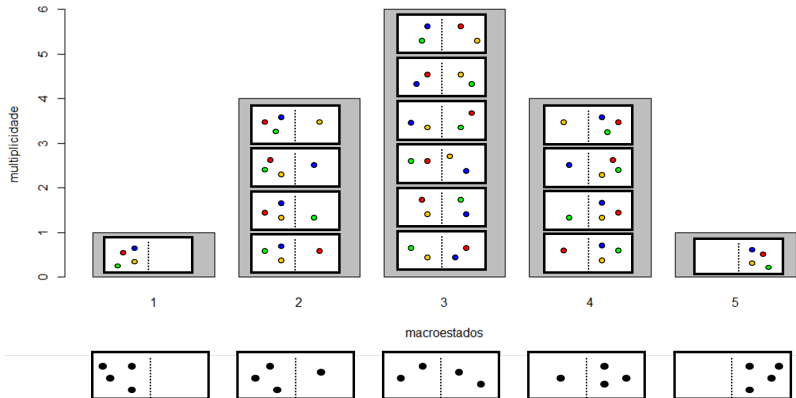
Multiplicidade



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 maior 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

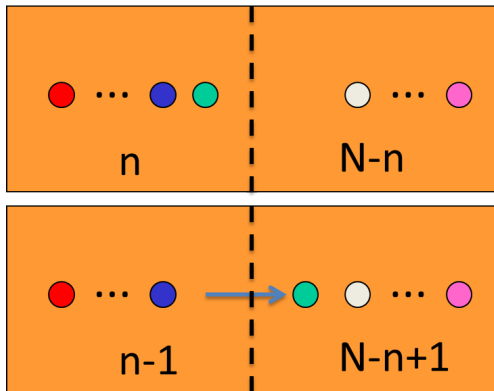


Figura: A cada instante uma partícula passa de uma metade para a outra.

Código na linguagem R do exemplo da entropia Física

```
4290 #-----#
4291 ###### Entropia de Boltzmann-Gibbs #####
4292 #-----#
4293 # preparar grafico
4294 par(mfrow=c(1,1))
4295 Nmax=10; wmax=fac(Nmax)/(fac(Nmax/2)*fac(Nmax/2))
4296 maxY=ceiling(log(wmax, base = exp(1)))
4297 plot((0:maxY)/maxY,0:maxY , type="n", xlab="ne/N", ylab="H")
4298
4299 w=ne=nd=p=c(NULL); q=1
4300 for(N in seq(2,Nmax,2)){
4301   # inicializacao para cada iteracao
4302   ne[1]=N; nd[1]=0
4303   totEst=2^(N)
4304   w[1]=factorial(N)/(factorial(ne[1])*factorial(nd[1]))
4305   p[1]=w[1]/totEst
4306   # expansao do gas:
4307   # uma partícula passa da metade esquerda para a direita
4308   for(c in 1:N){
4309     ne[c+1]=N-c
4310     nd[c+1]=c
4311     w[c+1]=fac(N)/(fac(ne[c+1])*fac(nd[c+1]))
4312     p[c+1]=w[c+1]/totEst
4313   }
4314   # calculo da entropia
4315   H=log(w, base = exp(1))
4316   #plot
4317   lines(ne/N, H, type="o", col=q)
4318   q=q+1
4319 }
4320 legend( "topleft", legend=seq(2,Nmax,2) ,
4321        col=1:(q-1) , pch=1)
4322
4323
```

Expansão simples do gás de N partículas.

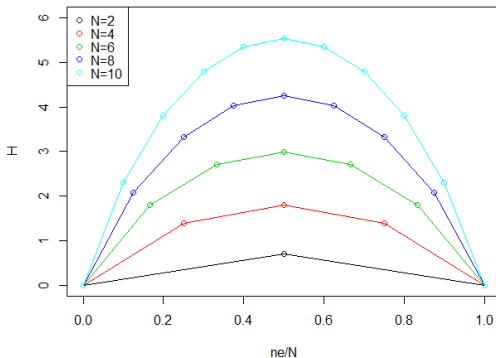


Figura: Entropia do sistema

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 nanopartículas 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 nanopartículas sobre uma superfície (Kam, 2012).
- v) Sociologia: medida da uniformidade das amizades (Eagle, 2010).

Entropia na Teoria da Informação

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

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

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

```
4365  
4366 #-----#  
4367 ##### Entropia e Informação #####  
4368 #-----#  
4369 # jogo de moeda  
4370 # declarações e inicializações  
4371 N=100  
4372 p=H=c(NULL)  
4373 H[1]=0; H[N]=0  
4374 p[1]=0; p[N]=1  
4375 #iteração  
4376 for( k in 2:(N-1)){  
4377   #probabilidade de cara  
4378   p[k]=k/N  
4379   #probabilidade de coroa  
4380   q=1-p[k]  
4381   #entropia  
4382   H[k]=-p[k]*log(p[k],base=2)-q*log(q,base=2)  
4383 }  
4384 #gráfico  
4385 plot(p,H, col="red")  
4386 |
```

Entropia Informacional

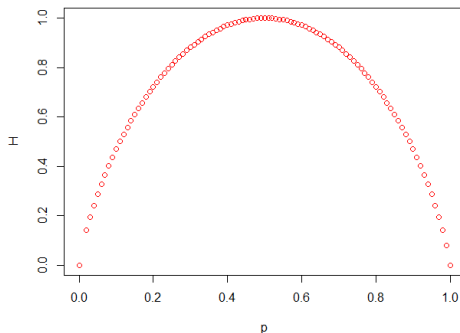


Figura: Entropia vs probabilidade para o jogo de distintas moedas.

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?

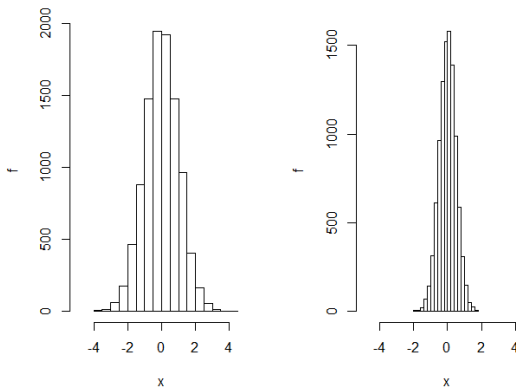
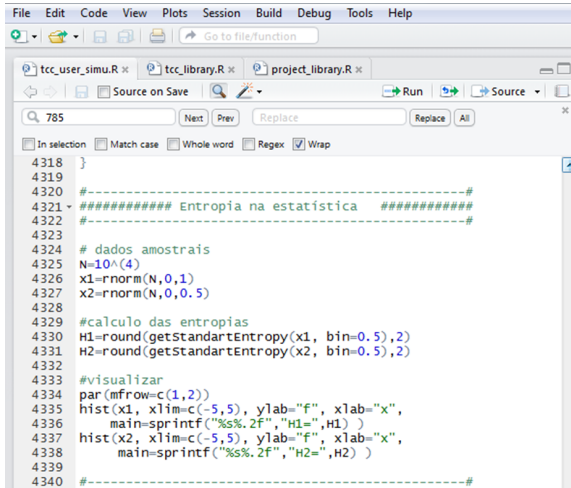


Figura: Distribuições de probabilidade gaussiana.

Código na linguagem R do exemplo da entropia na Estatística



```
File Edit Code View Plots Session Build Debug Tools Help
tcc_user_simu.R tcc_library.R project_library.R
Source on Save Run Source
785 Next Prev Replace Replace All
In selection Match case Whole word Regex Wrap
4318 }
4319
4320 #-----#
4321 ##### Entropia na estatística #####
4322 #-----#
4323
4324 # dados amostrais
4325 N=10^(4)
4326 x1=rnorm(N,0,1)
4327 x2=rnorm(N,0,0.5)
4328
4329 #calculo das entropias
4330 H1=round(getStandartEntropy(x1, bin=0.5),2)
4331 H2=round(getStandartEntropy(x2, bin=0.5),2)
4332
4333 #visualizar
4334 par(mfrow=c(1,2))
4335 hist(x1, xlim=c(-5,5), ylab="f", xlab="x",
4336      main=sprintf("%s%.2f", "H1=", H1) )
4337 hist(x2, xlim=c(-5,5), ylab="f", xlab="x",
4338      main=sprintf("%s%.2f", "H2=", H2) )
4339
4340 #-----#
```

Entropia em Estatística

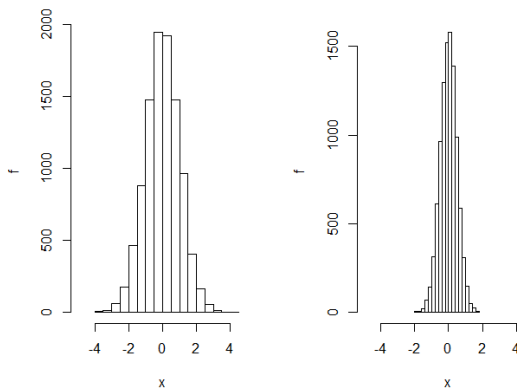


Figura: $H(\text{esquerda}) = 0.74$, $H(\text{direita}) = 0.67$

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?

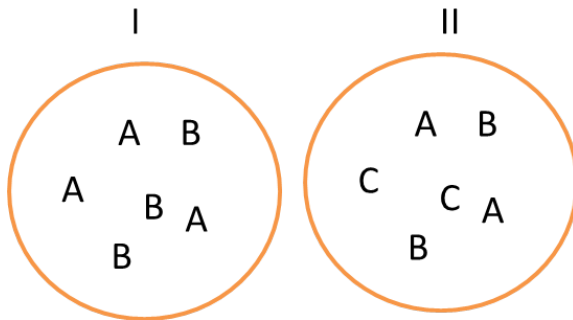


Figura: Dois sistemas com 6 indivíduos em cada.

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Ecologia

```
4346 #-----#
4347 ##### Entropia e diversidade #####
4348 #-----#
4349
4350 # Geração dos sistemas I e II
4351 sis_I=c(3,3)
4352 sis_II=c(2,2,2)
4353
4354 p=sis_I/sum(sis_I)
4355 H1=-sum(p*log(p))
4356 p=sis_II/sum(sis_II)
4357 H2=-sum(p*log(p))
4358
4359 par(mfrow=c(1,2))
4360 barplot(sis_I,ylim=c(0,3), names.arg=c("A","B"),
4361        xlab="Sistema I", ylab="número de indivíduos",
4362        main=sprintf("%s%.2f", "H1=", H1) )
4363 barplot(sis_II,ylim=c(0,3), names.arg=c("A","B","C"),
4364        xlab="Sistema II", ylab="número de indivíduos",
4365        main=sprintf("%s%.2f", "H2=", H2) )
4366 |
4367
4368
```

Entropia em Ecologia

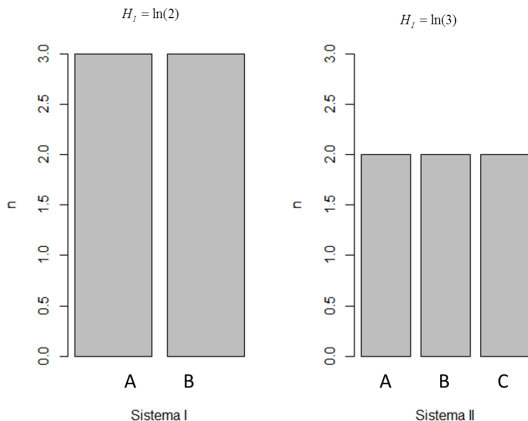


Figura: Diagrama de frequências dos sistemas I e II.

Entropia em Nanociência

Entropia, H : medida do grau de uniformidade espacial da distribuição de nanopartículas 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

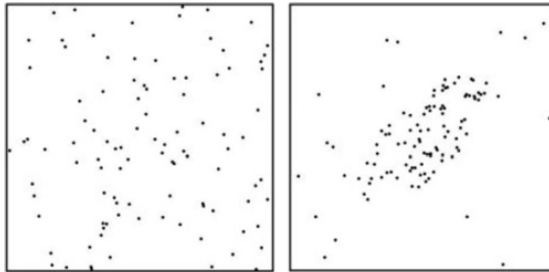


Figura: Sobre qual superfície a distribuição de nanopartículas é mais uniforme?

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

Entropia: exemplo

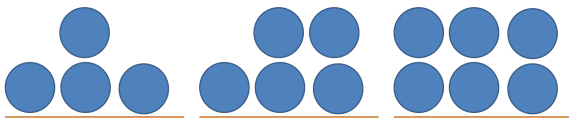


Figura: Qual perfil tem distribuição de nanopartículas mais uniforme?

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Nanociência

```
4390 #-----#
4391 ##### Entropia em Nanociencia #####
4392 #-----#
4393
4394 # perfil 1
4395 perfil1=c(1,2,1); x=perfil1
4396 namesBar=1:length(x);
4397 barplot(x, names.arg=namesBar)
4398 # calculo de probabilidades
4399 p=x/sum(x)
4400 #calculo da entropia normalizada
4401 H1=-sum(p*log(p))/log(length(p))
4402
4403 # perfil 2
4404 perfil2=c(1,2,2); x=perfil2
4405 barplot(x, names.arg=namesBar)
4406 # calculo de probabilidades
4407 p=x/sum(x)
4408 #calculo da entropia normalizada
4409 H2=-sum(p*log(p))/log(length(p))
4410
4411 # perfil 3
4412 perfil3=c(2,2,2); x=perfil3
4413 barplot(x, names.arg=namesBar)
4414 # calculo de probabilidades
4415 p=x/sum(x)
4416 #calculo da entropia normalizada
4417 H3=-sum(p*log(p))/log(length(p))
4418
4419
4420
4421:1 Entropia em Nanociencia ↕
```

R Script ↕

Entropia: exemplo

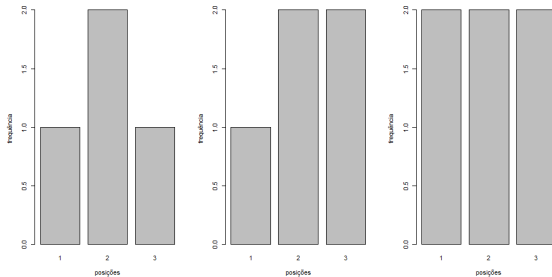


Figura: Qual perfil tem distribuição de nanopartículas mais uniforme?

Exemplo de cálculo de entropias da distribuição de nanopartículas.

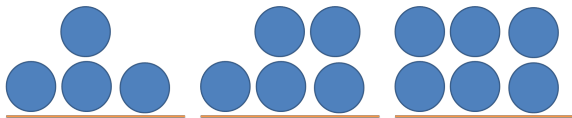


Figura: (esquerda) $H = 0.946$, (centro) $H = 0.960$, (direita) $H = 1.00$

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 compartilhe seu tempo com uma alta uniformidade entre os seus laços sociais.

Qual indivíduo tem maior entropia social?

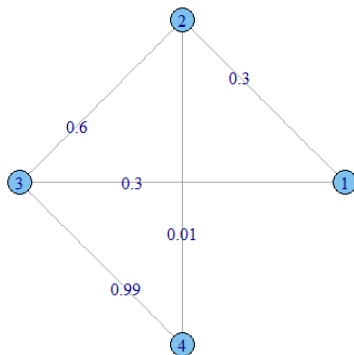


Figura: Rede com 4 pessoas. Os números nas arestas referem-se ao peso da amizade entre as pessoas.

Código na linguagem R do exemplo da entropia em Sociologia

```
4390 #-----#
4391 ##### Entropia em Redes Sociais #####
4392 #-----#
4393 #Inicialização
4394 num_cell<-4
4395 mat_adj<-matrix(0 ,nrow=num_cell, ncol=num_cell)
4396
4397 # Criação da rede
4398 mat_adj[1,2]<-1
4399 mat_adj[1,3]<-1
4400 mat_adj[2,3]<-1
4401 mat_adj[2,4]<-1
4402 mat_adj[3,4]<-1
4403 g <- graph.adjacency( mat_adj, mode=c("undirected") )
4404 E(g)$weight=c(0.3,0.3,0.6,0.01,0.99)
4405
4406 # Cálculo da entropia
4407 round(graph.diversity(g), 2)
4408
4409 # visualizar
4410 par(mfrow=c(1,1))
4411 plot(g, layout=layout.circle,
4412      edge.label=E(g)$weight)
4413
4414
```

Qual indivíduo tem maior entropia social?

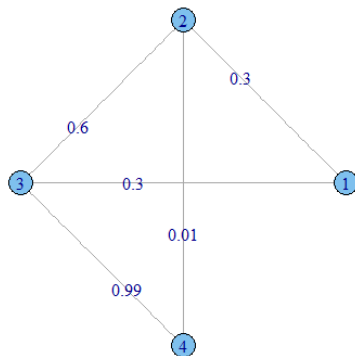


Figura: $H_1 = 1.00$, $H_2 = 0.63$, $H_3 = 0.91$ e $H_4 = 0.08$.

Considerações finais

Considerações finais

É preciso necessariamente o Físico aprender novas ferramentas para poder transitar em outras áreas da ciência?






Não. A entropia é um exemplo que mostra que utilizando as suas próprias ferramentas, o Físico pode transitar em diversos campos da ciência. Todavia, também é salutar que o Físico aprenda alguns métodos das ciências que possuem relativa afinidade com a Física.

Considerações finais






É preciso necessariamente o Físico aprender novas ferramentas para poder transitar em outras áreas da ciência?

Não. A entropia é um exemplo que mostra que utilizando as suas próprias ferramentas, o Físico pode transitar em diversos campos da ciência. Todavia, também é salutar que o Físico aprenda alguns métodos das ciências que possuem relativa afinidade com a Física.

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.