

**Revista Eletrônica
Paulista de Matemática**

ISSN 2316-9664
Volume 17, fev. 2020
Edição Ermac

Joseane Gregório Gomes

UNESP - Universidade Estadual
Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
joseane.gregomes@gmail.com

Giovanna Sboldrim Pascolat

UNESP - Universidade Estadual
Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
gigipasc@hotmail.com

Fabiano Borges da Silva

Faculdade de Ciências
UNESP - Universidade Estadual
Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
fabiano.borges@unesp.br

Uma interpretação para o problema da irreversibilidade dos gases via cadeia de Markov

An interpretation of the problem of gas irreversibility via
Markov chain

Resumo

Neste trabalho analisamos a dinâmica estocástica da cadeia de Markov que descreve o modelo de urna de Ehrenfest, no que diz respeito ao tempo médio de recorrência por meio de uma medida invariante. Além disso, apresentamos uma abordagem didática para este modelo e um relato de aplicação no Ensino Médio.

Palavras-chave: Cadeia Markov. Modelo de Ehrenfest. Tempo médio de recorrência. Teorema de Perron-Frobenius.

Abstract

In this paper we analyze the stochastic dynamics of the Markov chain that describes the Ehrenfest urn model with respect to the mean recurrence time by an invariant measure. In addition, we present a didactic approach to this model and an application report in high school.

Keywords: Markov chain. Ehrenfest’s model. Average recurrence time. Perron-Frobenius Theorem.

1 Introdução

Neste trabalho analisamos a dinâmica estocástica de uma cadeia de Markov que modela o problema da irreversibilidade dos gases, proposto inicialmente em 1907 e chamado de modelo da urna de Ehrenfest (ver Ehrenfest (1907)). Antes disso, existem relatos do uso da cadeia de Markov na explicação dos padrões de chuva em Bruxelas por Quelet em 1852, no uso do cálculo de probabilidade de extinção de um sobrenome de família por Bienaymé em 1845 e para descrever o movimento browniano de partículas suspensas num fluido por Einstein em 1905 (ver Allen (2010) para mais detalhes). No atual momento os processos de Markov são usados para modelar diferentes fenômenos de diversas áreas, incluindo biologia, física, química, finanças, economia e engenharia. O problema que abordaremos aqui é um deles e permite um primeiro contato com alguns conceitos na área de sistemas dinâmicos estocásticos. Para o leitor interessado em mais exemplos de processos estocásticos e suas aplicações sugerimos Allen (2010), Friedli (2011) e Ruffino (2009).

As simplificações assumidas em nosso modelo são praticamente as mesmas propostas nos trabalhos de Friedli (2011) e Maccluer (2009). A análise concentra-se na classificação dos estados da cadeia com relação a recorrência, periodicidade, ergodicidade e tempo médio de retorno para o estado inicial, o que dará uma justificativa para o termo “irreversibilidade dos gases”. Além disso, neste trabalho propomos uma versão equivalente deste modelo (que denominamos de sorteio de bolinhas), porém num contexto que torna o estudo da cadeia de Markov mais acessível para alunos do Ensino Médio.

O modelo proposto neste artigo consiste basicamente em considerar que temos N partículas de um determinado gás, inicialmente num compartimento A , e que em tempos discretos, $n = 1, 2, \dots$, uma partícula desloca-se com uma determinada probabilidade de transição para um compartimento B . E uma vez que temos partículas em B , estas também possuem probabilidade de deslocar-se para o compartimento A .

Esta quantidade de partículas em B , modelamos por um processo estocástico discreto $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que tem a propriedade de Markov, isto é, fazendo algumas simplificações (apresentadas na Seção 2) temos que a probabilidade condicional satisfaz a igualdade

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = \mathbb{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n), \quad (1)$$

para todo $n \geq 1$ e para toda sequência x_0, x_1, \dots, x_{n+1} de elementos do espaço de estados $E = \{0, 1, \dots, N\}$ (quantidade de partículas que podemos ter em B). Esta condição (1) significa que o futuro do processo, uma vez conhecido o estado presente, é independente do passado. Quando isso ocorre, o processo estocástico é chamado de cadeia de Markov (ou processo de Markov). As simplificações que assumimos neste modelo e a matriz de transição associada são apresentadas na Seção 2.

Na Seção 3 fazemos uma análise da dinâmica estocástica desta cadeia finita que modela a transição das partículas entre os dois compartimentos, principalmente no que diz respeito a recorrência e periodicidade dos estados. Além disso, encontramos uma medida invariante para a cadeia (Teorema 11), o que nos permite calcular o tempo médio de recorrência para cada estado. Em particular, mostramos que o tempo médio de recorrência m_0 para o estado 0, ou seja, tempo médio de retorno de todas as partículas em A (estado inicial do processo), é dado por $m_0 = 2^N$.

Na Seção 4 propomos, por meio de uma pequena modificação no modelo de Ehrenfest, uma abordagem didática para estudantes do Ensino Médio que consiste numa aplicação de uma versão do Teorema de Perron-Frobenius para matrizes de transição regulares (Teorema 13). Esta versão permite estudar a evolução das distribuições de probabilidades da cadeia apenas por meio de sua

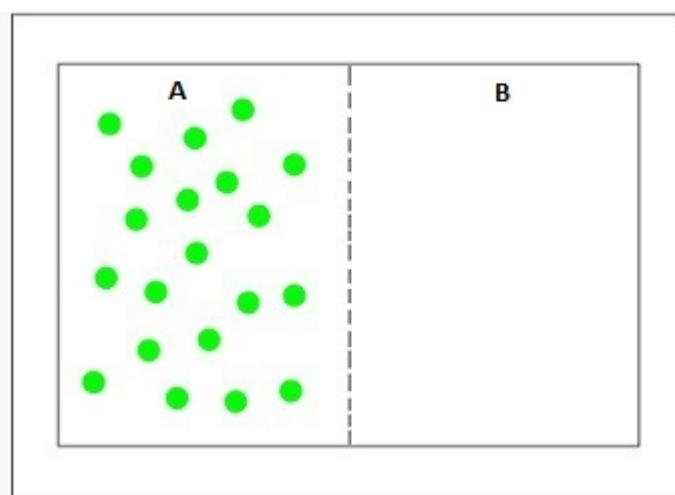
matriz de transição. E para encontrar a única distribuição (medida) invariante, basta resolver um sistema de equações lineares, o que torna o assunto interessante e adaptado para estudantes que tem conhecimento básico sobre matrizes e probabilidade.

Por fim, na Seção 5 apresentamos uma abordagem didática que chamamos de sorteio de bolinhas, análogo ao modelo das partículas de um gás. Tal abordagem foi aplicada numa escola estadual do interior do estado de São Paulo, cujo relato é descrito neste artigo, para que possa ser utilizado como material de apoio no ensino de matrizes, sistemas de equações lineares e probabilidade. Este relato de aplicação no Ensino Médio estende o trabalho de Silva e Gomes (2019), apresentado no Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional. Enquanto que a análise da dinâmica da cadeia associada a matriz perturbada Q_ϵ (ver matriz (5)), no que diz respeito a ergodicidade, complementa o trabalho de Silva e Pascolat (2019).

2 Um modelo probabilístico para o problema da irreversibilidade dos gases

Suponha que temos N partículas de um determinado gás num ambiente fechado, que dividiremos pela metade por meio de uma linha imaginária, e que no momento inicial do experimento, todas as partículas estão concentradas de um lado, que chamaremos de A , já a outra metade do ambiente, que chamaremos de B , encontra-se vazia (ver Figura 1). Também poderíamos pensar que A e B são dois compartimentos que possuem uma ligação entre eles, e que as partículas mudam de um para o outro. Portanto, em nosso contexto, A e B representam as urnas do experimento realizado por Ehrenfest.

Figura 1: Momento inicial do experimento, onde todas as partículas do gás iniciam no compartimento A , enquanto que o compartimento B está vazio.



Fonte: Elaborado pelos autores.

Assumiremos que em cada instante de tempo $n \geq 0$ (inteiro) uma única partícula troca de lado, isto é, se a partícula estiver em A vai para B e vice-versa. Após um longo tempo de evolução deste sistema, é de se esperar uma distribuição uniforme das partículas de gás entre A e B , ou

ainda, num contexto realístico, seria de se esperar pelas leis da mecânica e da termodinâmica, que as partículas de gás num determinado ambiente fechado espalhem-se e alcancem um estado de equilíbrio macroscópico. Neste ponto surgem algumas perguntas interessantes. É possível que após algum tempo teremos todas as partículas novamente do lado A ? Qual a probabilidade disto ocorrer? Quanto tempo levaria?

A grosso modo, apenas para familiarizar o leitor, é importante destacar que esta última pergunta foi um dos principais dilemas dos físicos do século XX, pois a Segunda Lei da Termodinâmica diz que quando um gás atinge o seu estado de equilíbrio ele não pode mais voltar ao seu estado inicial, e por outro lado as leis da Mecânica Clássica garante que se trata de um sistema reversível com respeito ao tempo, isto é, se todas as velocidades das partículas do gás são invertidas, então o gás deve voltar ao seu estado inicial. As questões levantadas são clássicas e principalmente abordadas na área da Mecânica Estatística, que busca estudar via algumas teoria de probabilidades o comportamento de sistemas macroscópicos compostos por um número elevado de partículas (ver, por exemplo, Reichl (1999, p. 22)).

Neste trabalho, responderemos as perguntas acima, mas para um modelo interpretado como uma cadeia de Markov. Para isto, consideraremos as seguintes simplificações:

- (i) as N partículas são indistinguíveis. Além disso, $N \geq 1$ é fixo e em cada instante tempo apenas uma partícula muda de lado (de A para B ou vice-versa), e assumiremos também, que todas partículas de A possuem a mesma probabilidade de deslocar-se para B , independentemente se está ou não mais próxima da linha imaginária que divide o compartimento (idem para o deslocamento de B para a A);
- (ii) estamos interessados no número de partículas em A e B , suas velocidades serão desprezadas;
- (iii) consideraremos apenas os instantes de tempo discretos, o qual os indicaremos pela letra n . Logo, $n = 0, 1, 2, \dots$ indica o tempo em que a partícula muda de lado/compartimento.

A evolução das partículas com o tempo será definida pela variável aleatória

$$X_n := \text{número de partículas no compartimento } B \text{ no instante } n .$$

Temos então que o espaço de estados é dado por

$$E = \{0, 1, 2, 3, \dots, N\} \subseteq \mathbb{R},$$

e $X_0 = 0$, ou seja, todas as partículas iniciam o experimento em A .

Podemos interpretar a dinâmica do processo estocástico X_n como uma partícula virtual que salta em tempos discretos nos estados $\{0, 1, 2, 3, \dots, N\}$. Quando a partícula virtual está no estado k no tempo n ($X_n = k$), temos que no tempo $n + 1$ ela estará em $k + 1$ ou em $k - 1$. Logo, $\mathbb{P}(X_{n+1} = k + 1 | X_n = k)$ e $\mathbb{P}(X_{n+1} = k - 1 | X_n = k)$ são nossas probabilidades de transição.

No primeiro instante de tempo assumiremos que uma das N partículas de A passará para B e, portanto, teremos $X_1 = 1$ com probabilidade 1. Ou seja,

$$\mathbb{P}(X_1 = 1 | X_0 = 0) = 1.$$

Como assumimos anteriormente que as partículas são indistinguíveis, segue que elas possuem as mesmas possibilidades quanto a mudança de compartimentos (A e B). Assim, é bastante razoável

considerar que a partícula que mudará para o compartimento ao lado pode ser escolhida aleatoriamente entre as N partículas contidas no sistema. A probabilidade de se escolher uma partícula em A (para mudar de compartimento), dado que temos k partículas em B é de $\frac{N-k}{N}$, logo

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = k + 1 \mid X_n = k) = \frac{N - k}{N}.$$

E a probabilidade de se escolher uma partícula em B (para mudar de compartimento), dado que temos k partículas em B , é de $\frac{k}{N}$, ou seja,

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = k - 1 \mid X_n = k) = \frac{k}{N}.$$

Além disso, assumiremos que quando todas as partículas estiverem no compartimento B , no próximo instante de tempo uma das partículas obrigatoriamente retornará para A , ou seja,

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = N - 1 \mid X_n = N) = 1.$$

Veja uma representação deste no modelo na Figura 2.

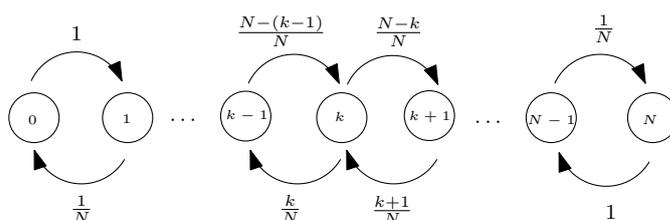


Figura 2: Representação do modelo para os estados $\{0, 1, \dots, N\}$ com as probabilidades de transição representadas nas setas.

Com estas probabilidades de transição, é intuitivo esperar que o compartimento que se encontra com o maior número de partículas tende a enviar as suas partículas para outro compartimento, ou seja, o sistema busca entrar em equilíbrio, igualando as quantidades em ambos compartimentos. Isto significa, pensando na partícula virtual que salta, que ela permanecerá por mais tempo saltando nos estados intermediários. Além disso, vale notar que trata-se de um processo de Markov, pois sabendo em qual estado a partícula virtual se encontra, sabemos a probabilidade dela saltar para os demais estados, sem precisar saber quais foram seus saltos em tempos anteriores.

A matriz de transição $Q = (q_{ij})$ para este modelo, é a matriz $(N + 1) \times (N + 1)$, dada por

$$q_{ij} := \mathbb{P}(X_{n+1} = i \mid X_n = j),$$

ou seja,

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{N} & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{2}{N} & 0 & \dots & 0 & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \frac{N-1}{N} & 0 & \frac{3}{N} & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{N-2}{N} & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{N-3}{N} & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{k}{N} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{N-k}{N} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \frac{N-3}{N} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \frac{N-2}{N} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \frac{3}{N} & 0 & \frac{N-1}{N} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \frac{2}{N} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{1}{N} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

3 Análise da cadeia quanto a recorrência e periodicidade

Nesta secção faremos inicialmente uma breve revisão sobre a dinâmica estocástica de uma cadeia de Markov no que diz respeito a periodicidade, recorrência e ergodicidade.

Dizemos que o estado i comunica-se com o estado j com probabilidade positiva se é possível “alcançar” o estado j tendo começado em i , ou seja,

$$\mathbb{P}(\xi_n = j, \text{ para algum } n \geq 0 | \xi_0 = i) > 0.$$

Se isso acontece escrevemos $i \rightarrow j$ (“ i alcança j ”). E se $i \rightarrow j$ e $j \rightarrow i$, então escrevemos $i \leftrightarrow j$.

Definição 1 Uma cadeia é dita irredutível quando todos os estados comunicam-se e, neste caso, existe uma única classe de comunicação. Caso isso não aconteça, a cadeia é chamada de redutível.

Uma condição suficiente para que a cadeia seja irredutível é que exista um k tal que $p_{ij}^{(k)}$ seja positivo para todos os estados i, j da cadeia. Para uma cadeia com um número finito de estados, esta condição é equivalente a matriz de transição ser regular (Definição 12 que apresentamos na próxima seção). Note por exemplo que a cadeia dada pela matriz de transição

$$T = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

é irredutível, pois todos os estados comunicam-se entre si. Porém, como $T^2 = I$, $T^3 = T$, $T^4 = I$ e assim por diante, segue que não existe um (mesmo) k tal que $p_{ij}^{(k)} > 0$ para todos os estados i, j da cadeia.

Definição 2 O estado $i \in E$ é dito recorrente se

$$\mathbb{P}(\xi_n = i, \text{ para algum } n \geq 1 | \xi_0 = i) = 1.$$

Quando não é recorrente o estado i passa a ser chamado de transiente.

O resultado a seguir dá uma caracterização para os estados recorrentes e sua prova pode ser encontrado em Allen (2010, p. 63) e Brzezniak e Zastawniak (1999, p. 104).

Teorema 3 Um estado $j \in E$ é recorrente se e somente se

$$\mathbb{P}(\xi_n = j \text{ infinitas vezes } n | \xi_0 = j) = 1.$$

O estado i é transiente se e somente se

$$\mathbb{P}(\xi_n = j \text{ infinitas vezes } n | \xi_0 = j) = 0.$$

Além disso, em termos das probabilidades de transição, temos que um estado i é recorrente se e somente se $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} = \infty$ (a série é divergente). E, portanto, é transiente se e somente se $\sum_{n=0}^{\infty} P_{ii}^{(n)} < \infty$ (a série é convergente).

O termo “infinitas vezes n ”, que aparece nas expressões acima, significa “ocorrência de um número infinito dos eventos $A_n = [\xi_n = j]$ ”.

Vale observar que para uma cadeia com um número finito de estados, tem que existir pelo menos um estado recorrente. Pois se todos os estados fossem transientes, então a probabilidade de começar em i e visitar i , aconteceria somente um número finito de vezes. O que não pode acontecer, pois a partícula virtual não para de saltar ao longo do tempo.

Para um estado recorrente i seu tempo médio de recorrência é definido por

$$m_i = \sum_{n=0}^{\infty} n f_{ii}^{(n)}, \quad (3)$$

onde

$$f_{ii}^{(n)} = \mathbb{P}(\xi_n = i, \xi_k \neq i \text{ para } k = 1, \dots, n-1 | \xi_0 = 1),$$

é a probabilidade de primeiro retorno para o estado i no tempo n .

Definição 4 Se um estado recorrente i é tal que $m_i < \infty$ (tempo médio de retorno é finito), então ele é chamado de positivo recorrente. Se $m_i = \infty$ então o estado recorrente é chamado de recorrente nulo.

A seguir segue uma proposição que pode ser encontrada em Brzezniak e Zastawniak (1999, p. 106) e que será útil no decorrer deste trabalho.

Proposição 5 Se $i \leftrightarrow j$, então:

- i é transiente se e somente se j é transiente;
- i é recorrente se e somente se j é recorrente;
- i é positivo recorrente se e somente se j é positivo recorrente.

Exemplo 1 Considere a cadeia de Markov do modelo das partículas (seção anterior) com $N = 2$, representada pela Figura 3.

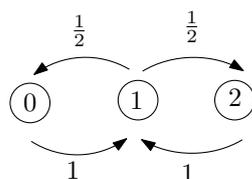


Figura 3: Representação da cadeia para $N = 2$.

Notemos primeiramente que $p_{11}^{(n)} = 0,5 + 0,5 = 1$ para todo $n = 2k$, com $k \in \mathbb{N}$. Portanto, $\sum_{n=0}^{\infty} p_{11}^{(n)} = \infty$ e assim o estado $i = 1$ é recorrente.

Vamos agora calcular o tempo médio de recorrência para o estado $i = 1$.

Note que $f_{11}^{(n)} = 0$ para $n \geq 4$. Uma maneira fácil de verificar isto é observando a figura que representa a cadeia. É impossível sair do estado $i = 1$ e, seguindo as direções das setas, retornar para este mesmo estado pela primeira vez em exatamente $n = 4$ saltos.

Seguindo este raciocínio e levando em conta a probabilidade de transição indicada em cada seta, é fácil ver que o tempo médio de retorno para o estado 1 é

$$m_1 = 0 \times f_{11}^{(0)} + 1 \times f_{11}^{(1)} + 2 \times f_{11}^{(2)} + 3 \times f_{11}^{(3)} + \dots = 0 \times 0 + 1 \times 0 + 2 \times \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) + 3 \times 0 = 2.$$

Logo, o estado 1 é positivo recorrente e como $0 \leftrightarrow 1 \leftrightarrow 2$ segue, pela Proposição 5, que os demais estados são positivos recorrentes.

Definição 6 O período de um estado $i \in E$, denotado por $d(i)$, é dado pelo máximo divisor comum de todos os inteiros $n \geq 1$ tais que $p_{ii}^{(n)} > 0$. Quando um estado i apresenta $d(i) > 1$, ele é classificado como um estado periódico com período $d(i)$. Caso $d(i) = 1$, o estado i é dito aperiódico. Se $p_{ii}^{(n)} = 0$ para todo $n \geq 1$, definimos $d(i) = 0$.

Assim como a recorrência é preservada para uma determinada classe de comunicação, o mesmo vale para a periodicidade.

Proposição 7 Suponha que $i \leftrightarrow j$. Então i é periódico se e somente se j é periódico. Neste caso temos $d(i) = d(j)$.

A prova deste resultado também pode ser vista, por exemplo, em Brzezniak e Zastawniak (1999, p.106).

Exemplo 2 A representação que corresponde a cadeia de Markov com três estados $\{1, 2, 3\}$ está na Figura 4. Sua matriz de transição é dada por

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

É fácil ver que existem três classes de comunicação $\{1\}$, $\{2\}$ e $\{3\}$.

Para os estados $i = 2, 3$ temos $d(i) = 0$, pois $p_{ii}^{(n)} = 0$ para $n \geq 1$. Enquanto que $d(1) = 1$, ou seja, o estado 1 é aperiódico, pois $p_{11}^{(n)} = 1$ para $n \geq 1$.

Além disso, como $p_{11}^{(n)} = 1$ para $n \geq 1$ segue pelo Teorema 3 que o estado 1 é recorrente. Enquanto que os estados $i = 2, 3$ são transientes, pois $p_{ii}^{(n)} = 0$ para $n \geq 1$.

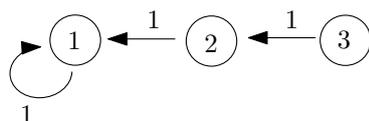


Figura 4: Representação da cadeia de Markov com três estados.

Exemplo 3 Considere novamente o nosso modelo de cadeia com três estados ($N = 2$), como no Exemplo 1. Pode-se calcular o período do estado $i = 1$ da seguinte forma. Primeiramente note que:

$$P_{11}^{(1)} = 0; \quad P_{11}^{(2)} = \frac{1}{2}; \quad P_{11}^{(3)} = 0; \quad P_{11}^{(4)} = \frac{1}{2}; \quad P_{11}^{(5)} = 0; \quad P_{11}^{(6)} > 0.$$

Fazendo isso sucessivamente para $n \geq 7$, nota-se que $P_{11}^{(2K)} > 0$ e $P_{11}^{(2K+1)} = 0$. Como o máximo divisor comum de $2, 4, 8, \dots$ é 2 , conclui-se que o período do estado i é 2 , ou seja $d(1) = 2$. E uma vez que temos

$$0 \leftrightarrow 1 \leftrightarrow 2,$$

segue pela Proposição 7 que

$$d(0) = d(1) = d(2) = 2.$$

Definição 8 Um estado j é dito ergódico se é aperiódico e positivo recorrente. Quando todos os estados são ergódicos, dizemos que a cadeia é ergódica.

Um exemplo de cadeia ergódica é a cadeia representada pela matriz de transição Q_ϵ , que discutiremos na próxima seção. A cadeia do Exemplo 3 não é ergódica, pois seus estados tem período 2 .

Apresentaremos um resultado que permite verificar se um estado é positivo recorrente numa cadeia com um número finito de estados. Antes disso, precisamos da seguinte definição.

Definição 9 Uma distribuição de probabilidade $w = (w_0, w_1, \dots, w_n)$ é dita medida invariante (ou medida estacionária) se

$$Tw = w,$$

onde T representa uma matriz de transição de uma determinada cadeia de Markov.

O resultado a seguir, que pode ser encontrado em Brzezniak e Zastawniak (1999, p. 112), será bastante útil para determinarmos se o estado recorrente é positivo recorrente, e se for o caso, seu tempo médio de retorno.

Teorema 10 Suponha que temos uma cadeia irredutível de estados recorrentes. Então existe uma medida invariante $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n, \dots)$ se e somente se cada estado é positivo recorrente. Além disso, neste caso, a medida invariante é única e

$$\mu_i = \frac{1}{m_i}, \tag{4}$$

onde m_i é o tempo médio de recorrência do estado i .

Como nosso modelo para a irreversibilidade dos gases é uma cadeia de Markov finita e irredutível, se existir uma medida invariante, podemos aplicar o Teorema 10 para determinarmos o tempo médio de retorno para cada estado da cadeia.

Teorema 11 A matriz Q dada em (2) possui uma medida invariante $w = (w_0, w_1, w_2, \dots, w_N)$, dada pela distribuição de Bernoulli, isto é,

$$w_k = \frac{1}{2^N} \binom{N}{k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N.$$

Demonstração. Tomemos a distribuição

$$w = \left(\frac{1}{2^N} \binom{N}{0}, \frac{1}{2^N} \binom{N}{1}, \dots, \frac{1}{2^N} \binom{N}{N} \right),$$

e verifiquemos que $Qw = w$.

Para isto, notemos primeiramente que

$$(Qw)_k = q_{k0}w_0 + q_{k1}w_1 + q_{k2}w_2 + \dots + q_{kN}w_N = \sum_{j=0}^N q_{kj}w_j,$$

onde cada q_{kj} é diferente de zero quando $j = k + 1$ e $j = k - 1$, e q_{kj} é igual à zero para os demais casos. Vamos agora mostrar que $(Qw)_k = w_k$ para $1 \leq k \leq N - 1$. Temos que

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^N q_{kj}w_j &= q_{k,k-1}w_{k-1} + q_{k,k+1}w_{k+1} \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{N - (k - 1)}{N} \binom{N}{k - 1} + \frac{(k + 1)}{N} \binom{N}{k + 1} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{N - (k - 1)}{N} \frac{N!}{(N - (k - 1))!(k - 1)!} + \frac{(k + 1)}{N} \frac{N!}{(N - (k + 1))!(k + 1)!} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{(N - 1)!}{(N - k)!(k - 1)!} + \frac{(N - 1)!}{(N - (k + 1))!k!} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{(N - 1)!}{[(N - k)(N - (k + 1))!](k - 1)!} + \frac{(N - 1)!}{[(N - (k + 1))!k(k - 1)!]} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{(N - 1)!k + (N - 1)!(N - k)}{(N - (k + 1))!(N - k)(k - 1)!k} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{(N - 1)!N}{(N - (k + 1))!(N - k)(k - 1)!k} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \left[\frac{N!}{(N - k)!k!} \right] \\ &= \frac{1}{2^N} \binom{N}{k}. \end{aligned}$$

Agora só falta analisar os casos $k = 0$ e $k = N$.

Para $k = 0$ temos:

$$\begin{aligned}
 (Qw)_0 &= \underbrace{q_{0,0}w_0}_{=0} + \underbrace{q_{0,1}w_1}_{=0} + \underbrace{q_{0,2}w_2}_{=0} + \underbrace{\dots}_{=0} + \underbrace{q_{0,N}w_N}_{=0} \\
 &= q_{0,1}w_1 \\
 &= \frac{1}{N} \frac{1}{2^N} \binom{N}{1} \\
 &= \frac{1}{2^N} \frac{1}{N} \frac{N!}{(N-1)!} \\
 &= \frac{1}{2^N} \frac{N!}{N!} \\
 &= \frac{1}{2^N} \binom{N}{0}.
 \end{aligned}$$

Enquanto que para $k = N$ temos:

$$\begin{aligned}
 (Qw)_N &= \underbrace{q_{N,0}w_0}_{=0} + \underbrace{q_{N,1}w_1}_{=0} + \underbrace{q_{N,2}w_2}_{=0} + \underbrace{\dots}_{=0} + \underbrace{q_{N,N-1}w_{N-1}}_{=0} + \underbrace{q_{N,N}w_N}_{=0} \\
 &= q_{N,N-1}w_{N-1} \\
 &= \frac{N - (N-1)}{N} \frac{1}{2^N} \binom{N}{N-1} \\
 &= \frac{1}{2^N} \frac{N - (N-1)}{N} \frac{N!}{(N - (N-1))!(N-1)!} \\
 &= \frac{1}{2^N} \frac{1}{N} \frac{N!}{(N - N + 1)!(N-1)!} \\
 &= \frac{1}{2^N} \frac{N!}{(N - N)!N!} \\
 &= \frac{1}{2^N} \binom{N}{N}.
 \end{aligned}$$

□

3.0.1 Tempo médio de recorrência

Como encontramos uma medida invariante para o modelo das partículas de gás podemos usar o Teorema 10 para determinar o tempo médio de recorrência m_0 , pois como se trata de uma cadeia finita e irredutível, a existência da medida invariante garante que todos os estados são positivos recorrentes. Sendo assim, pelo Teorema 10, temos que

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = 2^N.$$

Vejamos alguns casos particulares para o número de partículas N .

Para o caso em que $N = 10$, temos

$$w_5 = \frac{1}{2^{10}} \binom{10}{5} = \frac{1}{2^{10}} \frac{10!}{5!5!} \simeq 0,246.$$



Isto significa que, ao longo da evolução, a partícula virtual passa em torno de 25 % do seu tempo no estado na situação em que o número de partículas no compartimento A e no compartimento B estão igualmente distribuídas ($N_A = N_B = 5$), usualmente chamado de estado de equilíbrio. Por outro lado, temos

$$w_0 = \frac{1}{2^{10}} \binom{10}{0} = \frac{1}{2^{10}} \frac{10!}{10!0!} = \frac{1}{2^{10}} \approx 0,001.$$

Ou seja, a fração de tempo que o sistema passa no estado 0 (em que todas as partículas estão no compartimento A) é em média bem menor do que 1%. Note ainda que

$$m_5 = \frac{1}{0,246} \approx 4,07,$$

ou seja, depois de deixar o estado 5, leva em média 4,07 unidades de tempo para retornar ao estado 5. Por outro lado, $m_0 = 1024$, que significa que após deixar o estado 0, leva em média 1024 unidades de tempo para retornar ao estado 0.

Agora, vamos supor que o tempo seja em segundos e vamos estimar o tempo de retorno para o estado inicial para algumas quantidades de partículas:

- Caso o sistema inicie com 20 partículas no compartimento A e 0 no compartimento B , ou seja, $N = 20$, temos

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = 2^{20} \text{ segundos} \approx 1048576 \text{ segundos} \approx 12 \text{ dias};$$

- Iniciando com 40 partículas, todas no compartimento A ($N = 40$), temos

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = 2^{40} \text{ segundos} \approx 1,1 \text{ trilhões de segundos} \approx 35000 \text{ anos};$$

- Para $N = 100$, com as 100 partículas iniciando no compartimento A , temos o seguinte:

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = 2^{100} \text{ segundos} \approx 1,26765 \times 10^{30} \text{ segundos} \approx 4 \times 10^{22} \text{ anos}.$$

Observe que, conforme aumentamos aos poucos o número N de partículas iniciais no sistema, o tempo médio de retorno aumentou consideravelmente. O resultado para que 100 partículas retornem ao seu estado inicial é um tempo muito longo, ultrapassando até mesmo a idade do universo (aproximadamente $1,37 \times 10^{10}$ anos), e este tempo só tende a aumentar se considerarmos que, em uma situação real, o número de partículas é de $N \approx 10^{23}$ (número de Avogrado).

Este modelo explica, de certa forma, o uso do termo irreversibilidade. Apesar de o tempo de retorno, para o estado inicial ser um número finito, este número é tão alto que para escalas humanas, o processo é considerado irreversível.

4 Uma pequena perturbação na matriz estocástica e uma versão do Teorema de Perron-Frobenius

Nesta seção faremos uma pequena modificação em nosso modelo para que possamos utilizar uma versão do Teorema de Perron-Frobenius para encontrar a medida invariante e outros resultados que exigem um cálculo simples de matrizes.

Definição 12 Uma matriz estocástica T é dita regular se alguma de suas potências T^k tem todos os elementos não nulos.

Note que se uma matriz de transição T é regular então sua cadeia é irredutível, uma vez que existe um número inteiro k tal que $p_{ij}^{(k)} > 0$, para todo $i, j \in E$.

A matriz de transição Q do modelo de irreversibilidade dos gases, representada em (2), não é regular. Isto pode ser verificado facilmente para o caso $N = 2$ ($E = \{0, 1, 2\}$). Neste caso a matriz é dada por

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}.$$

Elevando esta matriz a potência 2, temos

$$Q^2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

E a potência 3 temos:

$$Q^3 = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} = Q.$$

Portanto é fácil notar que $Q^{2k} = Q^2$ e $Q^{2k+1} = Q$ para $k = 1, 2, \dots$.

O resultado a seguir é uma versão do Teorema de Perron-Frobenius, cuja demonstração deste resultado pode ser visto, por exemplo, em Silva e Rota (2016).

Teorema 13 Se T é uma matriz estocástica regular $r \times r$ então:

- i) A matriz T^n aproxima-se de uma matriz estocástica P , quando $n \rightarrow \infty$;
- ii) Todas as colunas de P são iguais a um vetor $w = (w_1, \dots, w_r)$, ou seja,

$$P = \begin{bmatrix} w_1 & \dots & w_1 \\ \vdots & & \vdots \\ w_r & \dots & w_r \end{bmatrix}$$

com $w_1 > 0, w_2 > 0, \dots, w_r > 0$;

- iii) Para qualquer distribuição inicial v_0 , temos que

$$T^n v_0 \rightarrow w, \quad \text{quando } n \rightarrow \infty,$$

ou seja, a distribuição $T^n v_0$ aproxima-se de $w = (w_1, \dots, w_r)$ quando n cresce;

- iv) O vetor w é o único vetor que satisfaz a equação

$$Tw = w.$$

A matriz definida em (2) não satisfaz as condições do Teorema 13, pois como já observamos não é regular. Porém faremos uma pequena perturbação no modelo para satisfazer as condições do teorema. Assumiremos que existe uma pequena possibilidade, $2\epsilon > 0$, da partícula virtual se manter no estado atual quando o tempo evolui. Sendo assim, temos a matriz de transição

$$Q_\epsilon = \begin{pmatrix} 2\epsilon & \frac{1}{N} - \epsilon & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 - 2\epsilon & 2\epsilon & \frac{2}{N} - \epsilon & \dots & 0 & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \frac{N-1}{N} - \epsilon & 2\epsilon & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{N-2}{N} - \epsilon & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{k}{N} - \epsilon & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2\epsilon & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{N-k}{N} - \epsilon & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \frac{N-2}{N} - \epsilon & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & 2\epsilon & \frac{N-1}{N} - \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \frac{2}{N} - \epsilon & 2\epsilon & 1 - 2\epsilon \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{N} - \epsilon & 2\epsilon \end{pmatrix}, \quad (5)$$

para $0 < \epsilon < \frac{1}{2N}$. Vale observar que $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} Q_\epsilon = Q$.

Proposição 14 A matriz Q_ϵ é regular.

Demonstração. Note primeiramente que para o caso $N=1$, temos a matriz de transição

$$Q_\epsilon = \begin{bmatrix} 2\epsilon & 1 - 2\epsilon \\ 1 - 2\epsilon & 2\epsilon \end{bmatrix}.$$

Como $\epsilon < \frac{1}{2}$, todos os elementos da matriz são não nulos, e portanto Q_ϵ é regular.

Vamos agora analisar o caso $N \geq 2$. As probabilidades de transição quando se desloca do estado 0 em direção ao estado N , podem ser observadas abaixo da diagonal da matriz de transição (5), enquanto que as probabilidades de transição do estado N em direção ao estado 0 estão acima da diagonal da matriz (diagonais secundárias).

Dentre as probabilidades da forma $\frac{k}{N} - \epsilon$, a menor é $\frac{1}{N} - \epsilon$. Além disso, $\frac{1}{N} - \epsilon$ é menor que a probabilidade $1 - 2\epsilon$. De fato, isto é equivalente a mostrar que

$$1 > \frac{1}{N} + \epsilon.$$

Mas como $0 < \epsilon < \frac{1}{2N}$, segue que

$$\frac{1}{N} + \epsilon < \frac{1}{N} + \frac{1}{2N} = \frac{3}{2N} < 1.$$

Agora, vamos mostrar que $(Q_\epsilon)_{i,j}^N > 0$ para qualquer estado $i, j \in E$.

Temos que a probabilidade $(Q_\epsilon)_{i,j}^N$ é maior ou igual a probabilidade da partícula virtual saltar $N - |j - i|$ vezes em j para depois saltar $|j - i|$ vezes em direção a i . Pois esta é apenas uma das

trajetórias possíveis de se sair de j e chegar em i , enquanto $(Q_\epsilon)_{i,j}^N$ representa a probabilidade de sair de j e chegar em i por diversos caminhos possíveis. Cada probabilidade de transição, quando saltamos de j em direção a i , é maior ou igual que $\left(\frac{1}{N} - \epsilon\right)$, e portanto, a probabilidade desta trajetória particular (saltar $N - |j - i|$ vezes em j para depois saltar $|j - i|$ vezes em direção a i) é maior ou igual a

$$(2\epsilon)^{N-|j-i|} \left(\frac{1}{N} - \epsilon\right)^{|j-i|},$$

que é um valor positivo.

Portanto, a matriz Q_ϵ satisfaz a condição de regularidade do Teorema 13. \square

Proposição 15 *A cadeia de Markov associada à matriz de transição (5) é ergódica.*

Demonstração. Como Q_ϵ é regular, segue que a probabilidade $(Q_\epsilon)_{i,j}^N > 0$ para todo $i, j \in E$. Logo, a cadeia é irredutível (pois $i \leftrightarrow j$ para todo i, j). A regularidade da matriz também garante, pelo Teorema 13, a existência da medida invariante w ($Q_\epsilon w = w$). Logo pelo Teorema 10 todos os estados são positivos recorrentes.

Além disso, dado um estado $i \in E$, temos que

$$(Q_\epsilon)_{ii}^N, (Q_\epsilon)_{ii}^{N+1}, \dots, (Q_\epsilon)_{ii}^{N+k}, \dots$$

são todos positivos. Logo, $d(i) = 1$ e i é aperiódico. \square

Exemplo 4 *Considere a matriz de transição para o caso $N = 5$, isto é,*

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{2}{5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{5} & 0 & \frac{3}{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & 0 & \frac{4}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{5} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{5} & 0 \end{bmatrix}.$$

Tomando uma perturbação no modelo com $\epsilon = \frac{1}{1000}$, obtemos

$$Q_\epsilon = \begin{bmatrix} 2 \cdot \frac{1}{1000} & \frac{1}{5} - \frac{1}{1000} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 - 2 \cdot \frac{1}{1000} & 2 \cdot \frac{1}{1000} & \frac{2}{5} - \frac{1}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{5} - \frac{1}{1000} & 2 \cdot \frac{1}{1000} & \frac{3}{5} - \frac{1}{1000} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} - \frac{1}{1000} & 2 \cdot \frac{1}{1000} & \frac{4}{5} - \frac{1}{1000} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{5} - \frac{1}{1000} & 2 \cdot \frac{1}{1000} & 1 - 2 \cdot \frac{1}{1000} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{5} - \frac{1}{1000} & 2 \cdot \frac{1}{1000} \end{bmatrix}$$

ou seja,

$$Q_\epsilon = \begin{bmatrix} \frac{2}{1000} & \frac{199}{1000} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{499}{500} & \frac{1000}{2} & \frac{399}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{799}{1000} & \frac{2}{1000} & \frac{599}{1000} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1000}{599} & \frac{1000}{2} & \frac{799}{1000} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1000}{399} & \frac{1000}{2} & \frac{499}{500} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1000}{199} & \frac{2}{1000} \end{bmatrix}.$$

Uma representação para este modelo de cadeia, dada pela matriz de transição Q_ϵ , é a Figura 4.

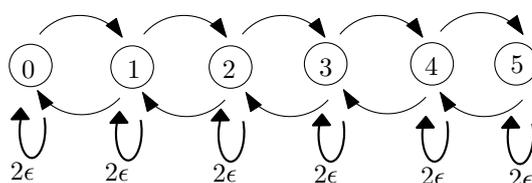


Figura 5: Representação da cadeia dada pela matriz de transição Q_ϵ .

Como esta matriz é regular, podemos utilizar o Teorema 13 para encontrar uma medida invariante $w = (w_0, \dots, w_5)$. Para isto, basta resolver a equação

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{1000} & \frac{199}{1000} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{500}{499} & \frac{1000}{2} & \frac{399}{1000} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{799}{1000} & \frac{1000}{2} & \frac{599}{1000} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{599}{1000} & \frac{799}{2} & \frac{1000}{1000} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{399}{1000} & \frac{2}{1000} & \frac{499}{500} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{199}{1000} & \frac{2}{1000} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \end{bmatrix},$$

cuja solução é aproximadamente

$(0, 03113752496; 0, 1561570347; 0, 3127054403; 0, 3127054403; 0, 1561570346; 0, 03113752494)$.

Elevando a matriz Q_ϵ a uma potência 100 (com auxílio de uma calculadora para matrizes), por exemplo, obtem-se

$$Q_\epsilon^{100} = \begin{bmatrix} 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 \\ 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 \\ 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 \\ 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 & 0,31270544 \\ 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 & 0,15615703 \\ 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 & 0,03113752 \end{bmatrix}.$$

É interessante observar que as colunas de Q_ϵ^{100} tem valores bem próximos de w . E isto se deve ao fato que as colunas de Q_ϵ^n aproximam-se cada vez mais da distribuição w , quando n cresce (como é dito nos itens i) e ii) do Teorema 13). Por fim, conforme comentamos antes (ver proposição acima), trata-se de uma cadeia ergódica.

Usaremos este modelo Q_ϵ na próxima seção, com uma abordagem que possa ser realizada com alunos do Ensino Médio. Para simplificar, denotaremos Q_ϵ apenas por T .

5 Uma abordagem voltada para o ensino: sorteio de bolinhas

Nesta seção apresentaremos uma abordagem para o modelo das partículas que possa ser aplicado em oficinas ou aulas de matemática para alunos que tenham conhecimento de matrizes e sistemas lineares. Basicamente é o mesmo modelo das partículas, porém agora as partículas serão representadas por bolinhas, e suas cores representarão os lados A e B. E para nossas estimativas usaremos o Teorema 13.

Considere uma caixa preta, tendo apenas uma abertura para passagens das mãos, na qual o aluno que sorteará as bolinhas não consiga visualizar o seu interior, logo o sorteio não sofrerá influências externas. Considere ainda que a quantidade de bolinhas iniciais dentro da caixa é fixa (Ver Figura 6), e que todas as bolinhas possuem mesma massa, tamanho e material, sendo indistinguíveis ao tato. Suporemos que nosso sorteio inicie apenas com bolinhas vermelhas.

Caso a bolinha sorteada seja vermelha, o que certamente irá acontecer em um primeiro momento, ela será substituída por uma de cor azul (considere que fora da caixa há bolinhas azuis, porém, estas serão utilizadas apenas para substituição e em nada modificam a quantidade de bolinhas existente dentro da caixa). Após a substituição, a bolinha azul vai para a caixa e a bolinha vermelha que foi sorteada é descartada, ficando de fora da caixa. É realizado um novo sorteio. Se a bolinha sorteada for vermelha será substituída por outra de cor azul ou se a bolinha sorteada for da cor azul, será substituída por uma bolinha vermelha. A bolinha substituta vai para caixa e a sorteada é descartada. E assim um novo sorteio é realizado repetindo-se inúmeras vezes o processo descrito.

Figura 6: Modelo apresentado para ser abordado em aulas de Matemática do Ensino Médio.



Para o modelo apresentado neste trabalho, vamos supor que:

- A caixa contém um número fixo 4 de bolinhas indistinguíveis;
- O que nos importa é o número de bolinhas contidas dentro da caixa (para a substituição das bolinhas serão utilizadas bolinhas extras que estarão fora da caixa);
- Cada sorteio será realizado em um instante de tempo (pode ser 5 segundos, por exemplo) e consideraremos apenas os instantes discretos, no qual indicaremos pela letra n . Logo, $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$.

A variável

X_n := número de bolinhas azuis dentro da caixa no instante n ,

representa o estado do sistema. Como o número de bolinhas azuis dentro da caixa pode ser zero, um, dois, três, ou quatro, temos que a imagem de X_n é $\{0, 1, 2, 3, 4\} \subseteq \mathbb{R}$.

No tempo $n = 0$, todas as bolinhas serão vermelhas e não há bolinhas azuis no início do sorteio. Logo, a condição inicial é dada por $X_0 = 0$.

Como a cada instante, uma e apenas uma bolinha será sorteada e substituída por outra bolinha de outra cor, temos que $X_{n+1} = X_n \pm 1$; e nosso primeiro passo será representado pela probabilidade condicional:

$$\mathbb{P}(X_1 = 1 \mid X_0 = 0) = 1,$$

já que de $n = 0$ para $n = 1$ a única coisa que pode ocorrer é uma das quatro bolinhas vermelhas ser sorteada e na sequência ser substituída por uma azul ($X_1 = 1$).

Para $n = 2$ temos duas situações:

1. uma das três bolinhas vermelhas dentro da caixa (urna) ser sorteada e substituída por uma azul. Representaremos esse passo através da probabilidade:

$$\mathbb{P}(X_2 = 2 \mid X_1 = 1) = \frac{3}{4}.$$

2. a única bolinha azul dentro da urna ser sorteada e substituída por uma vermelha. Para esta situação temos:

$$\mathbb{P}(X_2 = 0 \mid X_1 = 1) = \frac{1}{4}.$$

Supondo que a quantidade de bolinha azul dentro da caixa seja k no tempo n ($X_n = k$), então no tempo $n + 1$ ela será de $k + 1$ ou $k - 1$, e suas probabilidades serão

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = k + 1 \mid X_n = k) = \frac{4 - k}{4},$$

e

$$\mathbb{P}(X_{n+1} = k - 1 \mid X_n = k) = \frac{k}{4}.$$

Assim como acontece no modelo da Urna de Ehrenfest, as bolinhas da cor que está em maior quantidade dentro da caixa tende a ser sorteadas e conseqüentemente serem substituídas pelas bolinhas da outra cor. A matriz de transição é dada por

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{2}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} & 0 & \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{4} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix}$$

Observe que Q possui as mesmas propriedades da matriz (2) descrita na seção anterior. Para que Q satisfaça as condições do Teorema 13, vamos dar uma nova regra ao nosso sorteio:

- Antes de sortear uma bolinha, joga-se dois dados. Caso ambas as faces voltadas para cima dos dados sejam 6, nenhuma bolinha será retirada da caixa neste instante de tempo. Do contrário, o sorteio de uma bolinha deve ocorrer.

Sendo assim a matriz Q sofre uma modificação (tornando-se T)

$$T = \begin{pmatrix} 2 \cdot \frac{1}{36} & \frac{1}{4} - \frac{1}{36} & 0 & 0 & 0 \\ 1 - 2 \cdot \frac{1}{36} & 2 \cdot \frac{1}{36} & \frac{2}{4} - \frac{1}{36} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{4} - \frac{1}{36} & 2 \cdot \frac{1}{36} & \frac{3}{4} - \frac{1}{36} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{4} - \frac{1}{36} & 2 \cdot \frac{1}{36} & 1 - 2 \cdot \frac{1}{36} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} - \frac{1}{36} & 2 \cdot \frac{1}{36} \end{pmatrix}.$$

onde $\epsilon = \frac{1}{36}$ é a probabilidade de cair duas faces 6 no lançamento simultâneo de dois dados. Logo,

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{18} & \frac{2}{9} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & \frac{17}{36} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{13}{18} & \frac{1}{18} & \frac{13}{18} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{17}{36} & \frac{1}{18} & \frac{17}{18} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{9} & \frac{1}{18} \end{pmatrix}.$$

Vamos agora verificar que T é regular, ou seja, existe $k \in \mathbb{N}$ tal que T^k tem todas as entradas não-nulas:

Para $k = 2$,

$$T^2 = \begin{pmatrix} \frac{23}{108} & \frac{2}{81} & \frac{17}{162} & 0 & 0 \\ \frac{108}{17} & \frac{359}{18} & \frac{17}{162} & \frac{221}{17} & 0 \\ \frac{162}{221} & \frac{648}{13} & \frac{324}{37} & \frac{648}{13} & \frac{221}{13} \\ \frac{324}{0} & \frac{162}{221} & \frac{54}{17} & \frac{162}{359} & \frac{324}{17} \\ 0 & 0 & \frac{17}{648} & \frac{324}{648} & \frac{162}{17} \\ 0 & 0 & \frac{17}{162} & \frac{2}{81} & \frac{23}{108} \end{pmatrix}.$$

Para $k = 3$,

$$T^3 = \begin{pmatrix} \frac{205}{5832} & \frac{121}{972} & \frac{17}{972} & \frac{221}{2916} & 0 \\ \frac{2057}{3888} & \frac{1073}{11664} & \frac{1241}{2916} & \frac{221}{3888} & \frac{3757}{11664} \\ \frac{3888}{221} & \frac{11664}{949} & \frac{2916}{83} & \frac{3888}{949} & \frac{11664}{221} \\ \frac{1944}{3757} & \frac{1458}{221} & \frac{729}{1241} & \frac{1458}{1073} & \frac{1944}{2057} \\ \frac{11664}{0} & \frac{3888}{221} & \frac{2916}{17} & \frac{11664}{121} & \frac{3888}{205} \\ 0 & \frac{2916}{972} & \frac{17}{972} & \frac{972}{972} & \frac{5832}{5832} \end{pmatrix}.$$

Para $k = 4$,

$$T^4 = \begin{pmatrix} \frac{12547}{104976} & \frac{359}{13122} & \frac{5015}{52488} & \frac{221}{13122} & \frac{3757}{52488} \\ \frac{6103}{52488} & \frac{90289}{209952} & \frac{2465}{26244} & \frac{26741}{69984} & \frac{3757}{52488} \\ \frac{52488}{65195} & \frac{209952}{1885} & \frac{1811}{26244} & \frac{1885}{69984} & \frac{65195}{52488} \\ \frac{104976}{3757} & \frac{13122}{26741} & \frac{2916}{2465} & \frac{13122}{90289} & \frac{104976}{6103} \\ \frac{52488}{3757} & \frac{69984}{221} & \frac{26244}{5015} & \frac{209952}{359} & \frac{52488}{12547} \\ \frac{52488}{52488} & \frac{13122}{13122} & \frac{52488}{52488} & \frac{13122}{13122} & \frac{104976}{104976} \end{pmatrix}.$$

Portanto, T é regular e satisfaz as condições do Teorema 13. Sendo assim, resolvendo o sistema $T.w = w$, temos

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{18} & \frac{2}{9} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{17}{18} & \frac{1}{18} & \frac{17}{36} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{13}{18} & \frac{1}{18} & \frac{13}{18} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{17}{36} & \frac{1}{18} & \frac{17}{18} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{9} & \frac{1}{18} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{pmatrix}$$

que resulta no sistema de equações

$$\begin{aligned}\frac{1}{18}w_0 + \frac{2}{9}w_1 + 0w_2 + 0w_3 + 0w_4 &= w_0 \\ \frac{17}{18}w_0 + \frac{1}{18}w_1 + \frac{17}{36}w_2 + 0w_3 + 0w_4 &= w_1 \\ 0w_0 + \frac{13}{18}w_1 + \frac{1}{18}w_2 + \frac{13}{18}w_3 + 0w_4 &= w_2 \\ 0w_0 + 0w_1 + \frac{17}{36}w_2 + \frac{1}{18}w_3 + \frac{17}{18}w_4 &= w_3 \\ 0w_0 + 0w_1 + 0w_2 + \frac{2}{9}w_3 + \frac{1}{18}w_4 &= w_4\end{aligned}$$

Resolvendo este sistema de equações pelo método da substituição, e deixando todos os valores em função de w_0 temos que $w = (w_0, \frac{17}{4}w_0, \frac{13}{2}w_0, \frac{17}{4}w_0, w_0)$, e do fato de

$$w_0 + \frac{17}{4}w_0 + \frac{13}{2}w_0 + \frac{17}{4}w_0 + w_0 = 1,$$

resulta que $w_0 = \frac{1}{17}$. Logo

$$w = \left(\frac{1}{17}, \frac{1}{4}, \frac{13}{34}, \frac{1}{4}, \frac{1}{17} \right).$$

Vamos agora calcular o tempo estimado para que as quatro bolinhas dentro da caixa retornem ao seu estado inicial, ou seja, tenhamos todas vermelhas. Utilizando o fato que $\mu_i = \frac{1}{m_i}$ e supondo que o tempo para a realização do sorteio é de 10 segundos, temos que o tempo médio de retorno para o estado 0 (inicial) é dado por

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = \frac{1}{\frac{1}{17}} = 17 \text{ unidades de tempo} = 17 \times 10 \text{ seg} = 170 \text{ seg} \approx 2,83 \text{ min.}$$

Ou seja, caso um professor leve para sua sala de aula este experimento iniciando com 4 bolinhas vermelhas, é bem razoável esperar que em uma aula (com duração média de 50 minutos) os alunos vejam todas as bolinhas dentro da caixa retornarem ao seu estado inicial.

Repare ainda que, o fato de termos feito uma modificação em nosso experimento (adicionado a regra do lançamento de dados onde, caso ambas as faces fossem 6 o sorteio da bolinha não seria realizado) e por consequência uma modificação em nossa matriz de probabilidade de transição, fez com que o tempo de retorno aumentasse. Isso se deve ao fato de que existe a probabilidade de não efetuarmos o sorteio e as bolinhas permanecerem em seu estado atual.

Caso essa modificação em nosso modelo não existisse, w seria o mesmo encontrado em Teorema 10, e o tempo médio de retorno seria de

$$m_0 = \frac{1}{w_0} = 2^4 \text{ unidades de tempo} = 16 \text{ unidades de tempo} = 16 \cdot 10 \text{ seg} = 160 \text{ seg} \approx 2,7 \text{ min.}$$

Para o nosso modelo, iniciando com 4 bolinhas da cor vermelha, e com a modificação proposta pudemos verificar que houve uma diferença de 1 unidade de tempo (no nosso caso 10 segundos) para o tempo médio de retorno.

É interessante que o professor comente com seus alunos que, a medida que aumenta a quantidade de bolinhas iniciais no sorteio, o tempo de retorno aumenta “consideravelmente bem mais”, e isto pode ser observado ou verificado, por exemplo, repetindo as contas com $N = 5$.



5.1 Relato de uma aplicação deste modelo em sala de aula

A aplicação foi feita pela autora e professora J. G. GOMES, durante a realização de sua dissertação do mestrado profissional PROFMAT.

5.1.1 Descrição da turma

A aplicação foi para alunos da 2ª série do Ensino Médio de uma escola estadual localizada no interior do estado de São Paulo. A turma era pouco numerosa, com cerca de 8 alunos, porém demonstravam apatia em todas as disciplinas, não apenas em Matemática, segundo os seus professores.

A professora que aplicou a atividade não era a atual professora de Matemática dos alunos, por este motivo, contou com a colaboração da professora da turma, para que esta cedesse algumas aulas e a aplicação pudesse ocorrer. Porém, a professora aplicadora conhecia todos os alunos, já que lecionou aulas para a turma do 6º ao 9º ano do Ensino Fundamental, e isto facilitou a aceitação e participação dos alunos na execução das atividades.

A motivação para a aplicação do experimento ocorrer nesta turma, foi devido ao fato de os conteúdos e habilidades necessárias para a realização da atividade serem contemplados no Currículo do Estado de São Paulo do 2º ano do Ensino Médio. E como a aplicação ocorreu quase no fim do ano letivo de 2018, esperava-se que os alunos já tivessem estudado tais conteúdos e a interação com o experimento fosse maior.

Conteúdos programáticos necessários para o experimento

Para a realização da atividade era necessário que os alunos já tivessem um conhecimento prévio sobre matrizes, sistemas lineares, probabilidade condicional.

A professora aplicadora também introduziu aos alunos conceitos básicos de Cadeia de Markov.

Material necessário para a aplicação

Para a aplicação da atividade foram necessários a utilização de data show para projeção da parte teórica dos conteúdos e exemplos, folha impressa com um questionário (que foi aplicado previamente) e atividades, uma caixa com 4 bolinhas azuis e 4 bolinhas vermelhas (já produzida durante a dissertação de mestrado da professora aplicadora) e dois dados.

A aplicação em sala de aula

Antes de iniciar o roteiro de atividades com a turma (revisão de conteúdos, introdução aos conceitos de Cadeia de Markov e aplicação do modelo da urna) a professora aplicadora pediu que a professora da turma aplicasse um questionário, para que fosse possível avaliar o nível de entendimento dos alunos acerca dos conteúdos que seriam necessários para a realização da atividade. O questionário contava com perguntas do tipo: Você aprendeu o conteúdo de matrizes? Poderia citar uma aplicação deste conteúdo no cotidiano? Você aprendeu o conteúdo Sistemas Lineares? E probabilidade? Você acredita que profissionais utilizam-se de tais conteúdos no seu dia-a-dia ou isto é aprendido na escola e depois não mais utilizado?

A partir das respostas dos alunos a professora aplicadora pôde concluir que: eles não aprenderam sobre o conteúdo matrizes (pois ficaram sem professor de Matemática por um período no ano de 2018, a professora atual da turma estava a pouco tempo com eles), os demais conteúdos foram

abordados pela professora, porém a maioria dos alunos não souberam dizer situações cotidianas nas quais utilizasse tais conteúdos.

Através das respostas dos questionários dos alunos a professora aplicadora traçou suas estratégias para aplicação do experimento: 2 aulas seriam utilizadas para uma rápida explicação do conteúdo de Matrizes, 1 aula para retomada do conteúdo de Sistemas Lineares, 1 aula para retomada do conteúdo Probabilidade Condicional, 1 aula para uma introdução ao conceito de Cadeias de Markov e apresentação do problema do gás de Ehrenfest e 1 aula para aplicar o modelo da urna: sorteio das bolinhas. Totalizando 6 aulas de atividades.

Para a explicação do conceito de Matrizes, revisão do conteúdo Probabilidade Condicional e posteriormente apresentação do conceito de Cadeias de Markov e o problema do gás de Ehrenfest, foram utilizados como material os conceitos e exemplos apresentados em Gomes (2018). Já para a retomada do conteúdo de Sistemas Lineares, foram utilizados como material o Caderno do Aluno do Estado de São Paulo da 2ª série volume 1.

Para exemplificar uma Cadeia de Markov a professora utilizou-se de um exemplo apresentado em Gomes(2018) , nele temos que uma criança abre e fecha a porta de seu guarda-roupa de acordo com o resultado do lançamento do dado (face 6 altera o estado da porta). A professora aplicadora utilizou-se do mesmo artifício, pedindo que um aluno fosse até a porta e mudasse o seu estado apenas se o dado, lançado por uma aluna caísse na face 6, sendo que a porta iniciaria aberta. Após o experimento da porta, a professora foi levantando questionamentos com a turma, como por exemplo: O estado atual da porta depende de como ela estava antes? O estado futuro depende de como ela está agora? E o estado futuro depende de como ela estava antes do estado atual? Foi explicado aos alunos que situações como esta (do experimento da porta), quando o futuro do processo depende apenas do seu estado atual e não do que ocorreu anteriormente, é conhecido como Cadeias de Markov.

Na sequência foram lhes apresentados o problema da irreversibilidade dos gases. Durante a explicação, alguns alunos ficaram curiosos, perguntaram como era possível ?ver? partículas de gases ir e vir de um compartimento ao outro, se o físico Ehrenfest possuía instrumentos para isto, entre outras curiosidades. Quando lhes fora explicado o cálculo para o tempo de retorno de 100 partículas e o resultado (superior a idade do Universo), quase que toda a turma ficou espantada com tal resultado.

Foi lhes explicado que, pensando no problema da irreversibilidade dos gases proposto por Ehrenfest, e até mesmo pensando na questão da dificuldade de se ?ver? partículas de gases dentro de uma sala de aula, foi se pensado em uma abordagem prática: a urna para o sorteio de bolinhas.

A professora então, explicou as regras para o sorteio: a urna inicia com 4 bolinhas vermelhas, faz-se o lançamento dos 2 dados e caso caia duas faces 6, o sorteio de uma bolinha de dentro da urna não é realizado, sendo necessário lançar novamente os dados. Para qualquer lançamento diferente de duas faces 6, realizasse o sorteio de uma bolinha. Se a bolinha sorteada for da cor azul, ela será substituída por uma vermelha; caso seja de cor vermelha, será substituída por uma azul. Foi dito ainda que, para o modelo da urna para o sorteio de bolinhas, as cores das bolinhas faziam o mesmo papel dos dois compartimentos do modelo de Ehrenfest. A todo momento, a professora fazia intervenções para que os alunos percebessem a similaridade entre os dois modelos (urna de Ehrenfest e urna de bolinhas).

O experimento foi realizado 3 vezes. Em todas as vezes, foi pedido aos alunos cronometrarem o tempo que as quatro bolinhas voltaram a ser vermelhas dentro da caixa, ou seja, o tempo de retorno (foram eles: 1m47s, 2m18s e 2m04s). Na sequência, a professora explicou aos alunos que, assim como no modelo de Ehrenfest era possível calcular o tempo médio de retorno das partículas ao compartimento inicial, no modelo do sorteio das bolinhas isto também era possível. Dessa maneira, a professora deu-lhes as instruções de como realizar tal procedimento.



Muitos apresentaram dificuldades, principalmente na resolução do sistema linear, porém estavam empenhados em descobrir o tempo médio de retorno. Na sequência a professora realizou com os alunos o passo-a-passo da resolução do sistema linear, chegando no resultado de $m_0 = 17$ unidades de tempo. A professora ainda explicou-lhes que o termo unidades de tempo refere-se ao tempo utilizado para a realização de cada um dos sorteios, podendo ser de 1 segundo, 5 segundos, ou até minutos, dependendo do que se está realizando entre um sorteio e outro.

Os alunos, durante toda a realização da aplicação do experimento, seja no momento da explicação da parte teórica, quanto na parte prática, interagiram com a professora (apesar de suas limitações e dificuldades com a disciplina), demonstrando interesse com o assunto. Relataram ter gostado, principalmente dos momentos práticos (abrir e fechar da porta e o sorteio das bolinhas).

Para finalizar a professora, agradeceu aos alunos pelo comprometimento durante as aulas, e também enfatizou que o que lhes foi apresentado é apenas uma pequena parte de todo um estudo de uma área da Matemática: as Cadeias de Markov. Que existem diversos estudos nesta área e em diversas situações do dia-a-dia. Colocou-se a disposição para caso algum aluno tenha interesse em ler ou saber mais sobre o tema e encerrou a aplicação.

Agradecimentos

A autora J. G. Gomes agradece o programa PROFMAT e a bolsa CAPES. A autora G. S. Pascolat agradece à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro através da bolsa de iniciação científica (processo n. 2019/12841-6). O autor F. B. Silva agradece à FAPESP pelo apoio financeiro (projeto regular, processo n. 2018-16568-0). Além disso, os autores agradecem ao(à) parecerista anônimo(a) pelas sugestões.

6 Referências bibliográficas

ALLEN, L. **An introduction to stochastic processes with applications to biology**. 2nd. ed. Texas: CRC Press, 2010.

BREZEZNIAK, Z.; ZASTAWNIAK, T. **Basic stochastic processes: a course through exercises**. London: Springer, 1999. (Undergraduate Mathematics Series).

EHRENFEST, P.; EHRENFEST, T. Über zwei bekannte Einwände gegen das Boltzmannsche H-Theorem. **Physikalische Zeitschrift**, v. 8, n. 9, p. 311-314, 1907.

FRIEDLI, S. **Dinâmica estocástica: três exemplos**. 2011. Minicurso apresentado ao 1º Colóquio Regional de Matemática da Região Sudeste, São João Del-Rei, 2011. Disponível em: <http://emis.impa.br/EMIS/journals/em/docs/coloquios/SE-1.05.pdf>. Acesso em: 15 set. 2019.

GOMES, J. G. **Um modelo probabilístico para o problema da irreversibilidade dos gases**. 2018. 85 f. Dissertação (Mestrado em Matemática) - Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", São José do Rio Preto, 2018.



MACCLUER, C. R. Nonconvergence of the Ehrenfest thought experiment. **American Journal of Physics**, v. 77, n. 8, p. 695-696, 2009.

REICHL, L. E. **A modern course in statistical physics**. 2nd. Ed. New York: John Wiley & Sons, 1998.

RUFFINO, P. R. C. **Uma iniciação aos sistemas dinâmicos estocásticos**. 2. ed. Rio de Janeiro: IMPA, 2009.

SILVA, F. B.; GOMES, J. G. Teorema ergódico, distribuição de Bernoulli e o problema da irreversibilidade dos gases *In*: ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 6., 2019, Bauru. **Caderno de trabalhos completos e resumos [...]** Bauru: UNESP, Faculdade de Ciências, 2019, p. 512-513. Disponível em: https://drive.google.com/file/d/10TKZOqD7_VB-8GMRKUCAMATYMjkDu5Gu/view. Acesso em: 15 set. 2019.

SILVA, F. B.; PASCOLAT, G. S. Usando o Teorema de Perron-Frobenius para interpretar o problema da irreversibilidade dos gases. *In*: ENCONTRO REGIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 6., 2019, Bauru. **Caderno de trabalhos completos e resumos [...]** Bauru: UNESP, Faculdade de Ciências, 2019, p. 522-523. Disponível em: https://drive.google.com/file/d/10TKZOqD7_VB-8GMRKUCAMATYMjkDu5Gu/view. Acesso em: 15 set. 2019.

SILVA, F. B.; ROTA, I. S. Convergência de matrizes estocásticas regulares. **C.Q.D. - Revista Eletrônica Paulista de Matemática**, v. 8, p. 4-14, 2016. Edição Iniciação Científica. Disponível em: <https://www.fc.unesp.br/Home/Departamentos/Matematica/revistacqd2228/v08ica01-convergencia-de-matrizes.pdf>. Acesso em: 15 set. 2019.