

Metodologia é entre 10 e 20 vezes mais rápida do que as convencionais e mantém nível de eficiência

Unicamp e MIT desenvolvem método para calcular a entropia

MANUEL ALVES FILHO
manuel@reitoria.unicamp.br

A Pesquisadores da Unicamp e do Massachusetts Institute of Technology (MIT), nos Estados Unidos, desenvolveram uma nova metodologia de cálculo para determinar a entropia e a energia livre de sistemas físicos. O método não acrescenta novos conhecimentos essenciais à área, mas é entre 10 e 20 vezes mais rápido do que os convencionais, com a vantagem de manter o mesmo nível de eficiência destes. O foco da pesquisa, que teve início em 1995, é a física dos materiais.

De forma simplificada, entropia é o conceito que mensura a desordem ou desorganização da matéria. A entropia de um sólido, líquido ou gás cresce conforme a temperatura aumenta. Já a energia livre é a parcela da energia que pode ser convertida em trabalho útil. O que os cientistas fazem é promover simulações computacionais para entender o que ocorre com a matéria ao longo de grandes intervalos de temperatura. Esse estudo é importante, pois nem sempre é possível reproduzir em laboratório, por exemplo, as condições encontradas na natureza.

Foco da pesquisa é a física dos materiais

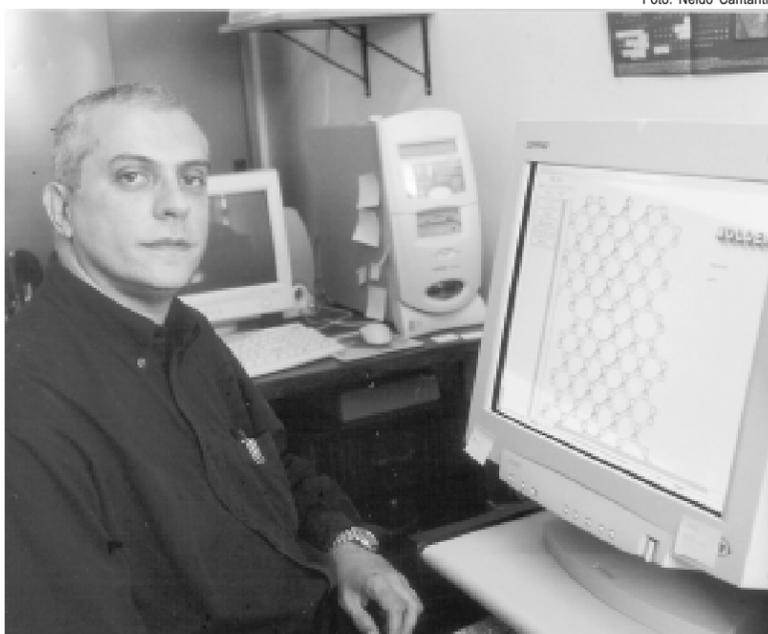


Foto: Neldo Cantanti

O professor Alex Antonelli, do Instituto de Física: método já vem sendo utilizado por alguns grupos de pesquisa no exterior

Um exemplo disso foi uma simulação realizada recentemente por um grupo de pesquisadores da Inglaterra. Por meio de cálculos computacionais, os cientistas estimaram em 6.500º Celsius a temperatura do ferro fundido no centro da Terra. “Essa resposta seria extremamente difícil

de ser obtida de forma experimental, já que não há condições de reproduzir de forma controlada em laboratório as condições de temperatura e pressão encontradas no interior do planeta”, explica o professor Alex Antonelli, do Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW) da Unicamp.

De acordo com ele, existem pelo menos 20 metodologias capazes de calcular a entropia e a energia livre de sistemas físicos. O método concebido conjuntamente por ele e por seu ex-aluno de doutorado, Maurice de Koning, é tão eficiente quanto os outros, mas é bem mais rápido. Em seu trabalho de pós-doutorado no MIT, de Koning percebeu que se alterasse determinados parâmetros do cálculo, também conseguiria conhecer como a energia livre e a entropia variam com a temperatura. Assim, ele ampliou os intervalos (a variação pode girar de 200 a até 2000º Celsius), reduzindo consequentemente o tempo da operação. “Há situações em que o tempo de cálculo cai de semanas para dias”, diz Antonelli.

A partir de 1999, os pesquisadores da Unicamp e do MIT, entre eles o professor Sidney Yip, considerado um dos pioneiros na simulação computacional de sistemas físicos, começaram a fazer a aplicação e a extensão do método. Ele tem sido usado para resolver problemas ligados à física dos materiais. Na natureza, esclarece Antonelli, a tendência é que os fenômenos sigam uma determinada ordem. Tome-se como exemplo uma pessoa filmando a seguinte cena: um vaso cai da mesa e se quebra. Agora imagine esse filme sendo passado ao contrário. Nesse

caso, é fácil perceber que um monte de cacos não pode se juntar e voltar à mesa na forma do vaso.

A Física procura estabelecer critérios mais rigorosos para entender processos como esse. Um problema prático citado pelo professor do IFGW é o silício, material fundamental para a indústria eletroeletrônica. Valendo-se dos conceitos e conhecimentos da termodinâmica, os pesquisadores criam situações virtuais para saber como é o comportamento dos átomos quando esse material é submetido a altas temperaturas ou quando é resfriado. Algumas dessas repostas, reforça Antonelli, seriam muito difíceis de serem obtidas em laboratório.

Conforme o professor do IFGW, a nova metodologia já foi objeto de alguns artigos publicados em revistas conceituadas de circulação internacional. “Felizmente, o método vem tendo uma boa repercussão junto à comunidade científica e já vem sendo utilizado por alguns grupos de pesquisa no exterior”, diz, acrescentando que ele pode ser adaptado às várias técnicas de simulação computacional existentes. Os estudos conduzidos na Unicamp contam com investimentos da ordem de US\$ 40 mil, financiados pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp).

Tese revela impactos da erosão em nutrientes do solo

Microorganismos que desempenham papel relevante nas propriedades do solo são fortemente afetados pela erosão, fenômeno que constitui um dos principais problemas da agricultura brasileira. A conclusão faz parte da dissertação de mestrado defendida pelo biólogo Gustavo Rodrigo Thomazine junto ao Instituto de Biologia (IB) da Unicamp. De acordo com a pesquisa, que também considerou o impacto de diferentes técnicas de manejo sobre a comunidade microbiana, os fungos e as cianobactérias, elementos que participam da ciclagem de nutrientes e exercem funções fotossintetizantes, respectivamente, mostraram-se mais sensíveis ao processo erosivo.

De acordo com o autor da dissertação, os efeitos causados pela erosão têm merecido várias abordagens científicas, sobretudo em relação às partes física e química. Já o aspecto biológico ainda é pouco estudado tanto no Brasil quanto no mundo. Para desenvolver sua pesquisa, Thomazine contou com a colaboração do Instituto Agrônomo de Campinas (IAC), que cedeu técnicos e laboratório. O trabalho foi realizado na Estação Experimental de Mococa, pertencente ao IAC. Lá, houve a simulação de uma erosão, ou seja, uma parte do solo foi “decapitada”.

Ao mesmo tempo, uma outra área foi preservada, definida tecnicamente como “solo testemunha”. Em seguida, Thomazine promoveu, junto às duas áreas, a medição da atividade microbiana e a contagem de alguns grupos de microorganismos (bactérias heterotróficas, fungos, cianobactérias e elementos celulolíticos) que contribuem para a agregação de partículas, aeração, umidade, temperatura e definição do pH do solo. A análise, conforme o biólogo, foi feita em amostras retiradas durante dois anos consecutivos de três camadas: 0 a 10 centímetros, 10

Foram considerados quatro tipos de manejo



Foto: Antoninho Perri

a 20 centímetros e 20 a 30 centímetros de profundidade.

Também foram consideradas na pesquisa quatro formas diferentes de manejo: adubação química, adubação verde associada à adubação química, adubação orgânica junto com a adubação química e calagem acompanhada de adubação química. A quantidade de fungos e bactérias foi estimada pela contagem em placas. Já a estimativa dos microorganismos celulolíticos e das cianobactérias foi feita pelo número mais provável de indivíduos. A atividade microbiana foi medida pela respiração basal, que compreende a quantidade de CO2 liberada pelos



Foto: Neldo Cantanti

O biólogo Gustavo Rodrigo Thomazine: próximo passo é estudar produtividade

microorganismos.

“A análise estatística mostrou que os fungos e cianobactérias foram os atributos biológicos mais sensíveis à erosão, enquanto as bactérias, fungos e microorganismos celulolíticos foram mais sensíveis ao manejo”, afirma Thomazine. Só para se ter uma idéia da redução dessa comunidade microbiana, a medição realizada no primeiro ano do experimento indicou que o número de cianobactérias caiu de 1.500 para 50. A despeito de ter concluído a dissertação de mestrado, o biólogo pretende dar seqüência ao trabalho. Ele quer saber, agora, como a alteração da comunidade biológica interfere na produtividade. Isso será possível porque foi cultivado milho nos solos tomados para a pesquisa.

Perdas – A erosão pode ser explicada pela perda da camada superior do solo, justamente a que concentra a maior quantidade de nutrientes. O fenômeno, causado pela chuva, pelo vento e pelo manejo inadequado, traz problemas de ordem econômica e ecológica. Uma área erodida normalmente é menos produtiva, o que exige a aplicação de grandes quantidades de fertilizantes. Estes, por sua vez, são potencialmente poluidores.

A agricultura dos países em desenvolvimento tem enfrentando sérias dificuldades por causa da erosão. No Brasil, o fenômeno tem sido registrado em praticamente todos os estados. Anualmente, o País perde aproximadamente 500 milhões de toneladas de solo em virtude da erosão. Isso corresponde à retirada de uma camada de 15 centímetros de solo das regiões Sudeste e Centro-Oeste e mais o Estado do Paraná”, compara Thomazine. Mas como impedir que essa tragédia anunciada se concretize, já que o processo tem se mostrado progressivo? Para o biólogo, a saída está no desenvolvimento sustentável, o que inclui a recuperação e a manutenção do solo. (M.A.F.)