

# Introdução à Complexidade

## IQU-728

---



Roberto B. Faria



*Instituto de Química - UFRJ*

*Lab. de Reações Oscilantes, Química de Halogênios e Espectroscopia*  
*LAROQHE*

faria@iq.ufrj.br [www.iq.ufrj.br/~faria](http://www.iq.ufrj.br/~faria) [www.laroqhe.iq.ufrj.br](http://www.laroqhe.iq.ufrj.br)



LAROQHE

PGQu - IQ-UFRJ - 2022

# Prêmio Nobel de Física - 2021

---

- Syukuro Manabe
  - ▶ Modelagem do clima - previsão do aquecimento global
    - Princeton University, USA
- Klaus Hasselmann
  - ▶ Modelagem do clima - previsão do aquecimento global
    - Max Planck Institute, Hamburgo, Alemanha
- Giorgio Parisi
  - ▶ Interações entre desordem e flutuações, desde a escala atômica até planetária, em diferentes sistemas físicos (spin glass), matemáticos, biológicos, neurociência, e inteligência artificial.
    - Sapienza University of Rome, Roma, Itália

# Bibliografia - Leitura recomendada

---

- M. MITCHELL, Complexity - A Guided Tour, Oxford, 2009.
- R. B. FARIA, Introdução aos sistemas químicos oscilantes, *Química Nova* 18:281-294 (1995)
- S. K. SCOTT, Chemical Chaos, Oxford, 1991
- P. GRAY, S. K. SCOTT, Chemical Oscillations and Instabilities - Non-linear Chemical Kinetics, Oxford, 1990
- J. GLEICK, Caos - A criação de uma nova ciência, Editora Campus, 1990 (original de 1987)

## Bibliografia - Leitura recomendada

---

- H. M. NUSSENZVEIG, Complexidade e Caos, Editora UFRJ, 1999
- S. WOLFRAM, A New Kind of Science, Wolfram Media, Inc., 2002.
- D. KONDEPUDI, I. PRIGOGINE, Modern Thermodynamics - From Heat Engines to Dissipative Structures, Wiley, 1998.
- J.A.M. PEREIRA, R.B. FARIA, Phase-Diagram and Complex Patterns in the Modeling of the Bromate-Oxalic Acid-Ce-Acetone Oscillating Reaction, *Química Nova* 30:541-547 (2007).

## Bibliografia - Leitura recomendada

---

- P. LAPLANTE, Fractal Mania, Windcrest/McGraw-Hill, 1994.
- M. A. SAVI, Dinâmica Não-linear e Caos, E-papers Serviços Editoriais Ltda, 2006.
- P. BERGÉ, Y. POMEAU, M. DUBOIS-GANCE, Dos Ritmos ao Caos, Editora UNESP, 1995.
- E. OTT, Chaos in Dynamical Systems, 2a ed., Cambridge University Press, 2002.
- S. H. STROGATZ, Nonlinear Dynamics and Chaos, 2a ed., Westview Press, 2015.

# Jornais Científicos

---

- International Journal of Bifurcation and Chaos in Applied Sciences and Engineering - IJBC
  - ▶ World Scientific
    - [www.worldscientific.com/worldscinet/ijbc](http://www.worldscientific.com/worldscinet/ijbc)
    - Não é assinado pela CAPES
- Chaos - An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science
  - ▶ AIP
    - <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/chaos>
    - Acesso livre

# Jornais Científicos

---

- Journal of Chaos
  - ▶ Hindawi Publishing Corporation
    - <http://www.hindawi.com/journals/jcha/>
    - Acesso livre
  
- Chaos, Solitons & Fractais - The interdisciplinary journal of Nonlinear Science, and Nonequilibrium and Complex Phenomena
  - ▶ Elsevier
    - <http://www.journals.elsevier.com/chaos-solitons-and-fractals/>
    - Fator de impacto: 1,503
    - Não assinado pela CAPES

# O que são sistemas complexos?

---

- O conjunto das correntes oceânicas
- A movimentação da atmosfera
- O clima
  - El Niño
  - Eras do gelo
- As inversões do campo magnético da Terra
- O comportamento do mercado financeiro
  - Cotação do dólar
  - Cotações das ações nas bolsas de valores
- O comportamento emocional dos animais, em especial do homem
  - Paciência × Explosão

# Outros sistemas complexos

---

- O sistema imunológico
- O comportamento das colônias de insetos
- A rede mundial de computadores (The World Wide Web - www)
- O funcionamento do cérebro
  - Os sinais elétricos emitidos pelos neurônios
- A evolução das espécies e a seleção natural
- A diferenciação celular
- A origem da vida

# Temas e termos ligados à complexidade

---

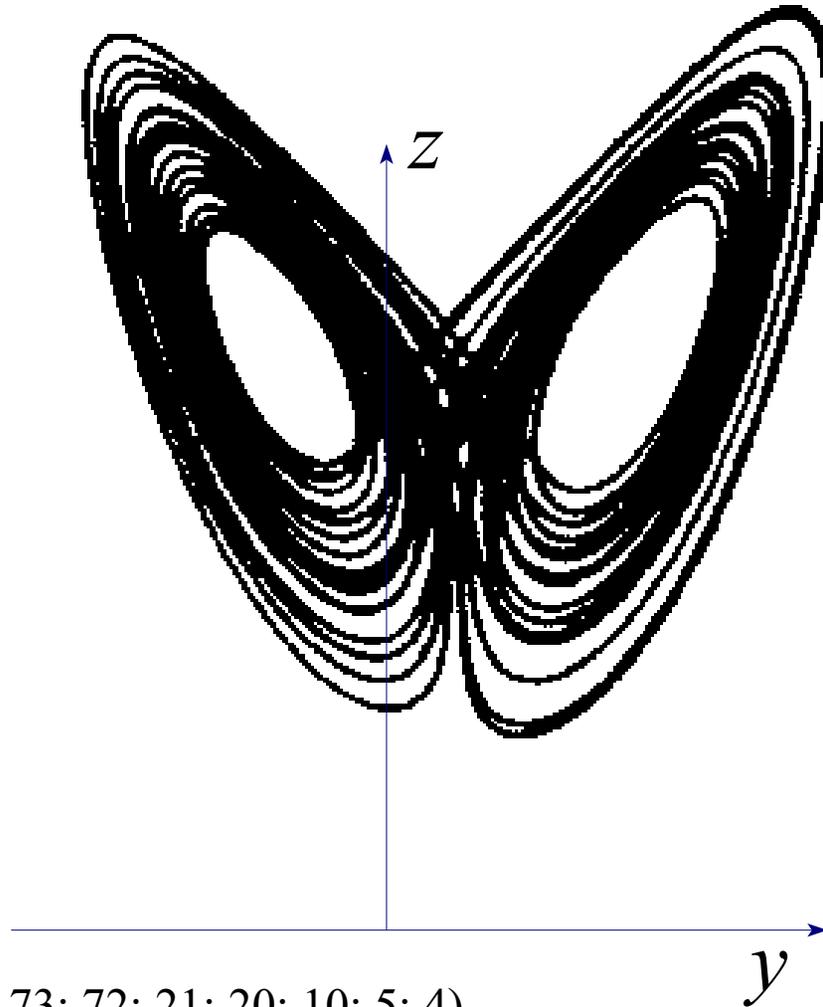
- Sistemas dissipativos
- Caos
- Atratores
- Atratores estranhos
  - ▶ Atrator de Lorenz
  - ▶ Mapa de Hénon

# Atrator de Lorenz

---

$$\begin{aligned}dx/dt &= -ax + ay \\dy/dt &= bx - y - xz \\dz/dt &= -cz + xy\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}a &= 10 \\b &= 28 \\c &= 8/3\end{aligned}$$



Ver Lorentz.pas (experimentar a = 100; 73; 72; 21; 20; 10; 5; 4)

# Atrator (mapa) de Hénon

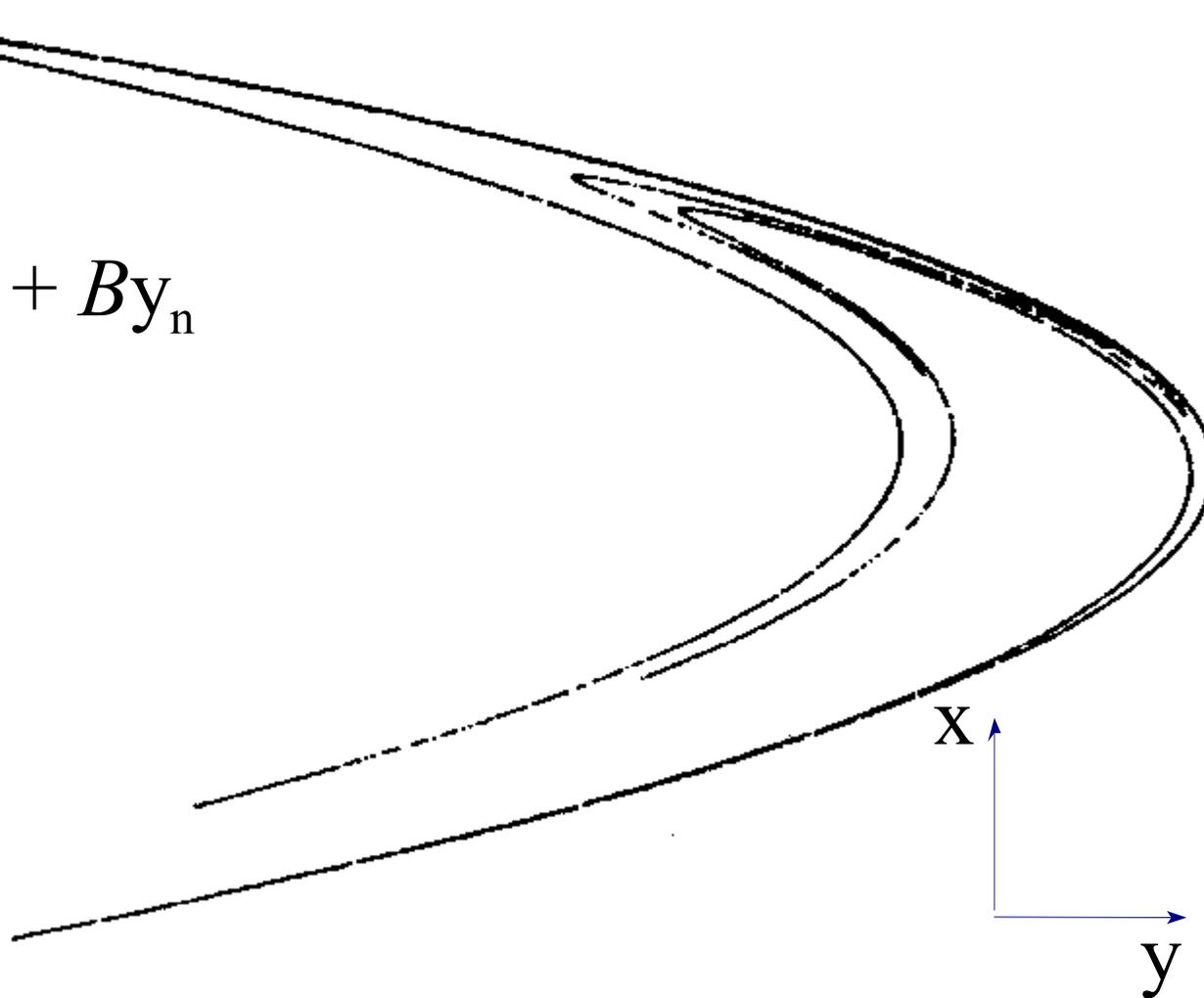
---

$$x_{n+1} = A - x_n^2 + By_n$$

$$y_{n+1} = x_n$$

$$A = 1,4$$

$$B = 0,3$$



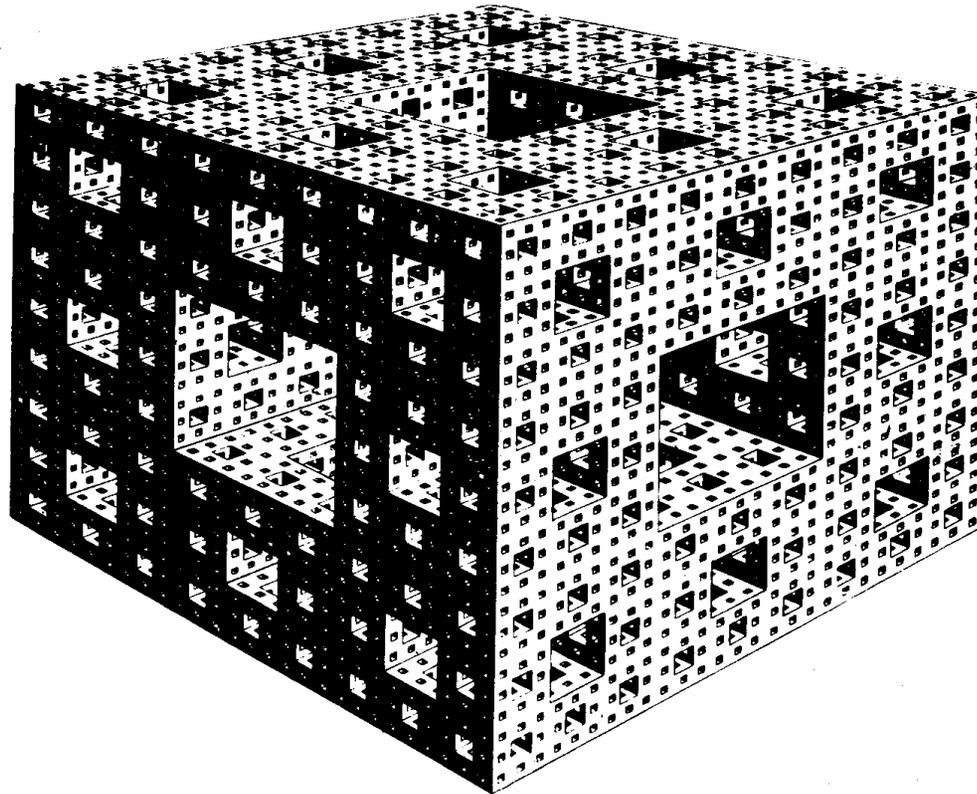
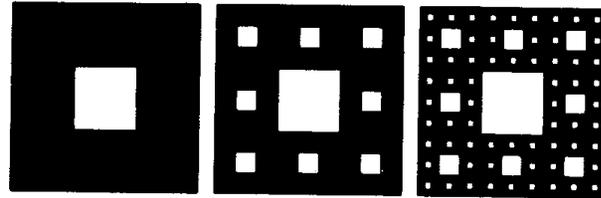
# Temas e termos ligados à complexidade

---

- Sistemas dissipativos e Hamiltonianos
- Fractais
  - ▶ Conjunto de Cantor
  - ▶ Conjunto de Koch
  - ▶ Tapete de Sierpinsky
  - ▶ Esponja de Menger
  - ▶ Triângulo de Sierpinsky
  - ▶ Conjunto de Julia
  - ▶ Conjunto de Mandelbrot
- Dimensão fractal

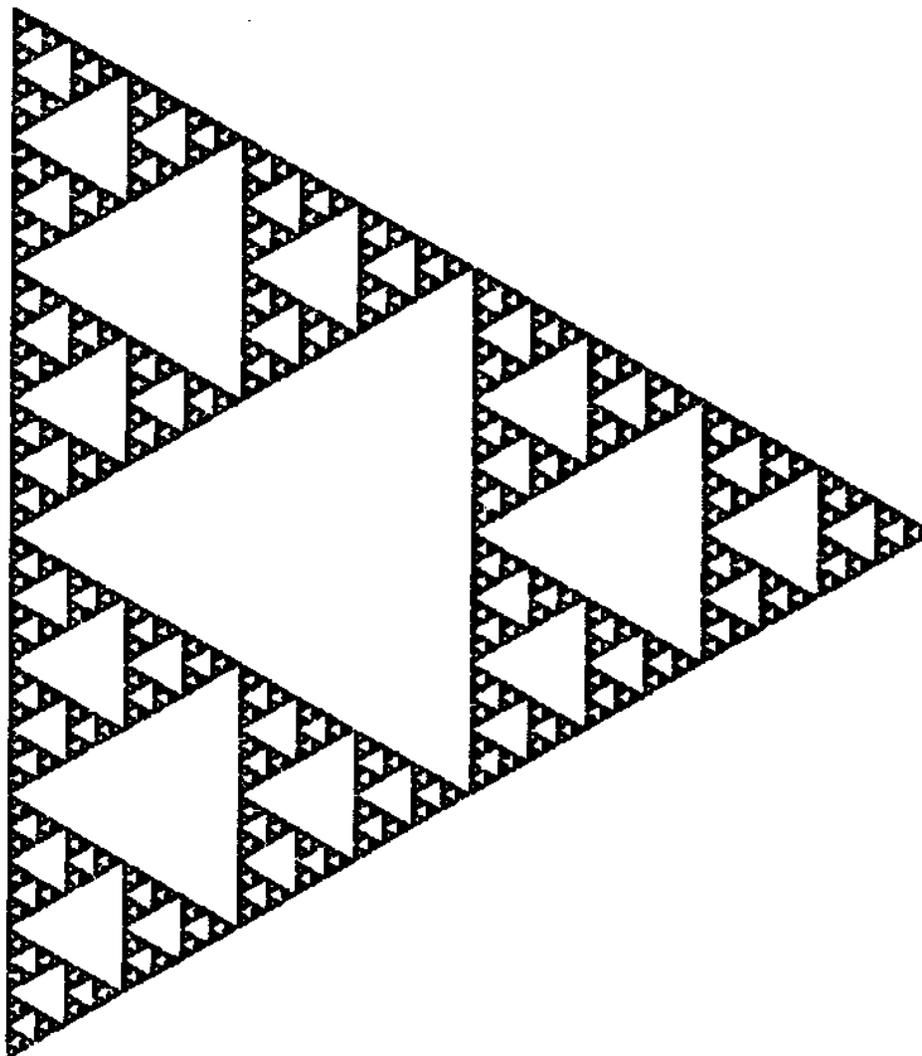
# Tapete de Sierpinsky e a Esponja de Menger

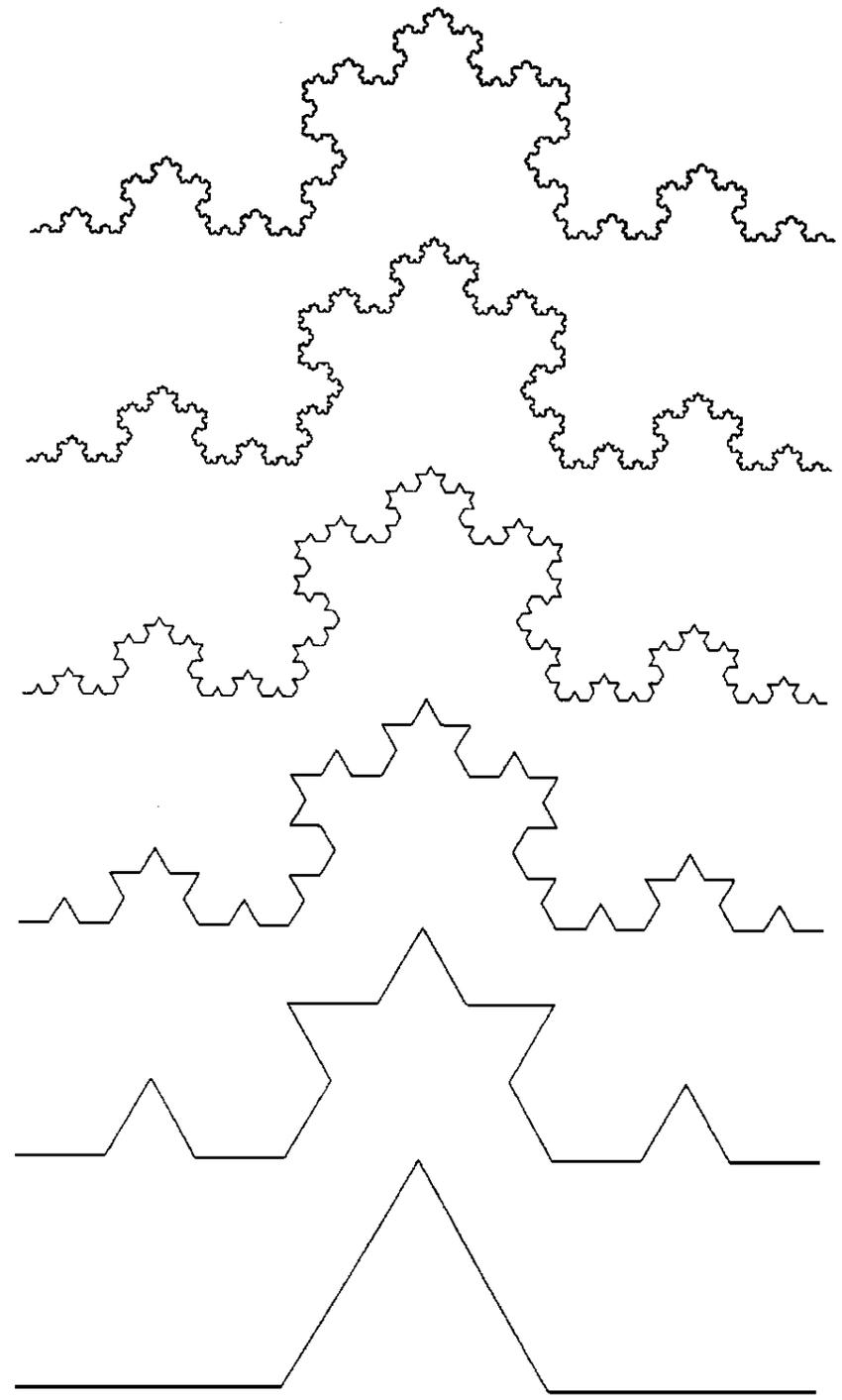
---



# Triângulo de Sierpinsky

---



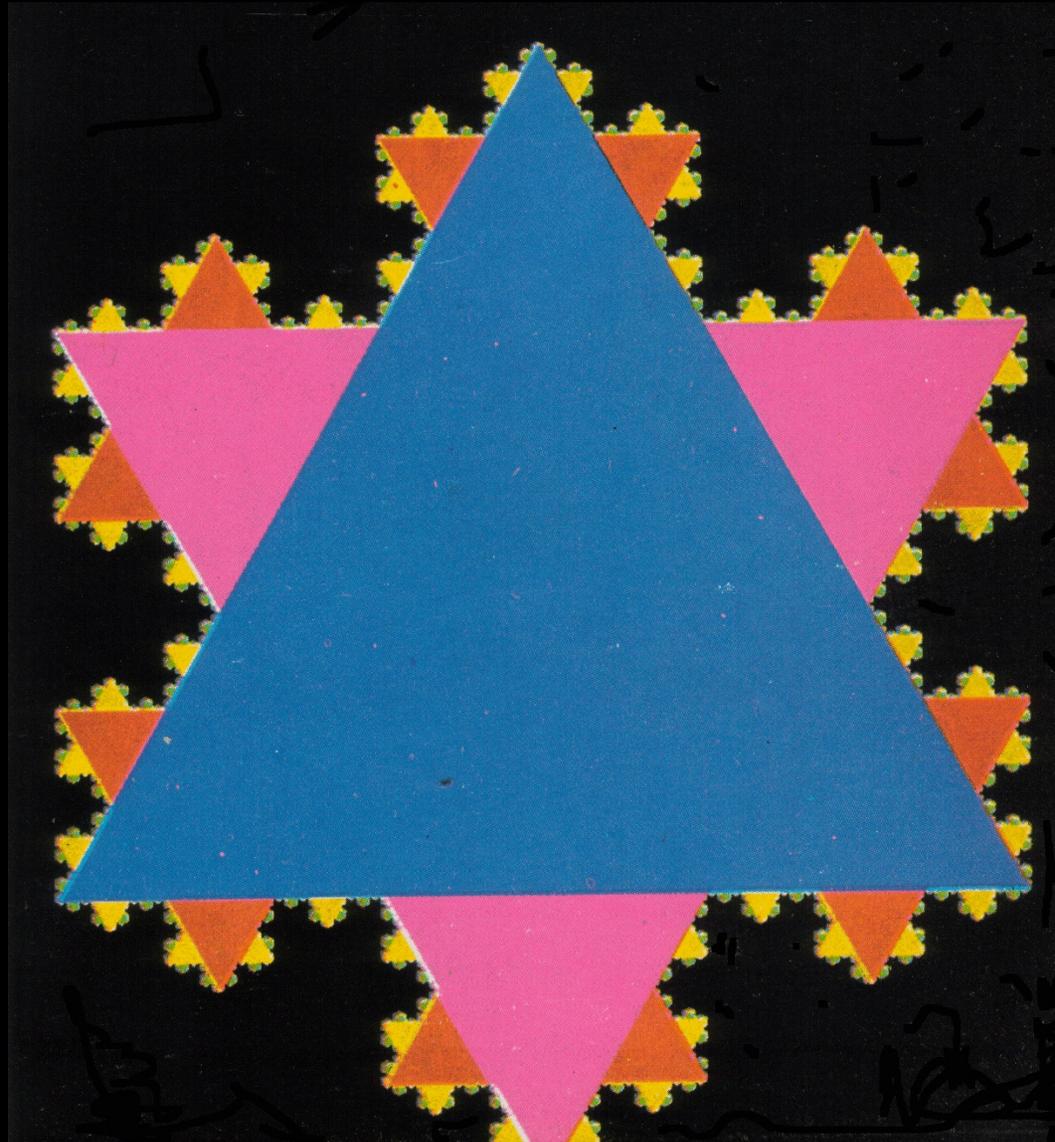


# Conjunto de Koch

---

# Conjunto de Koch

---

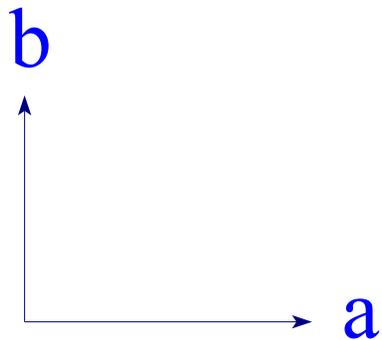
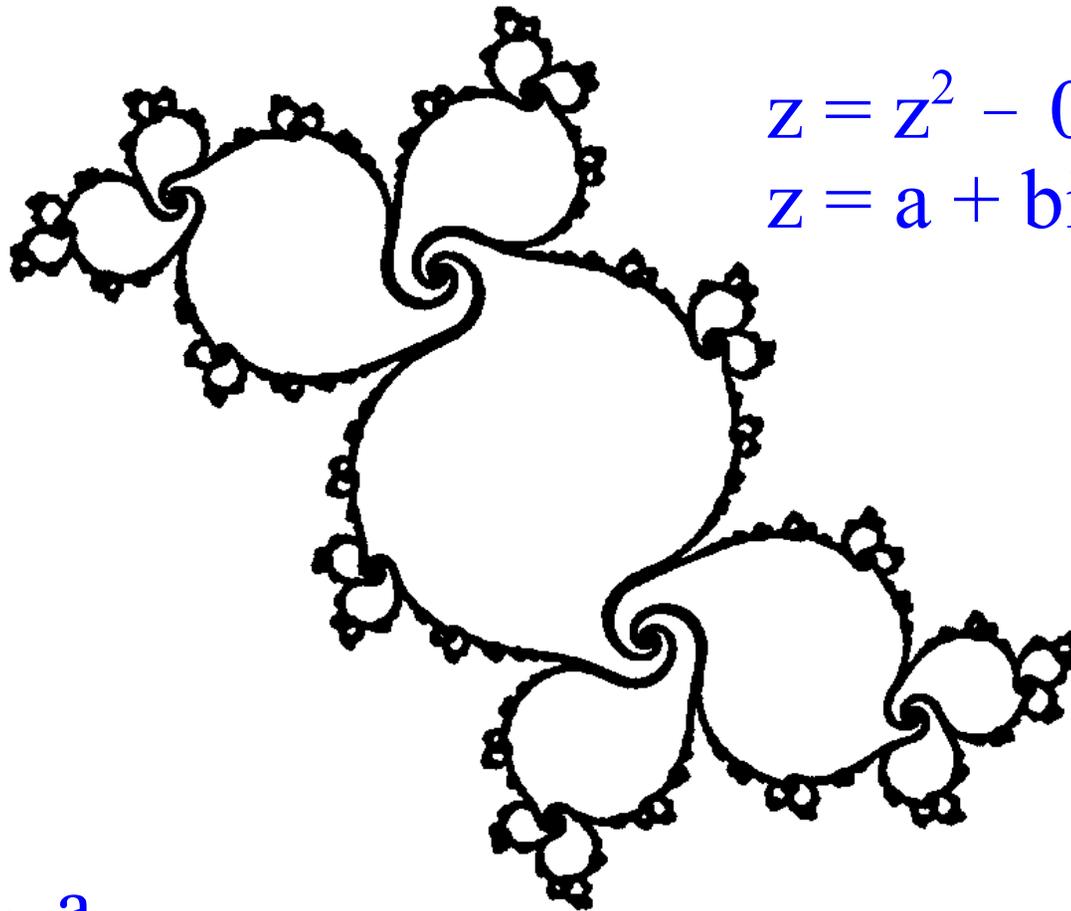


# Conjunto de Julia

---

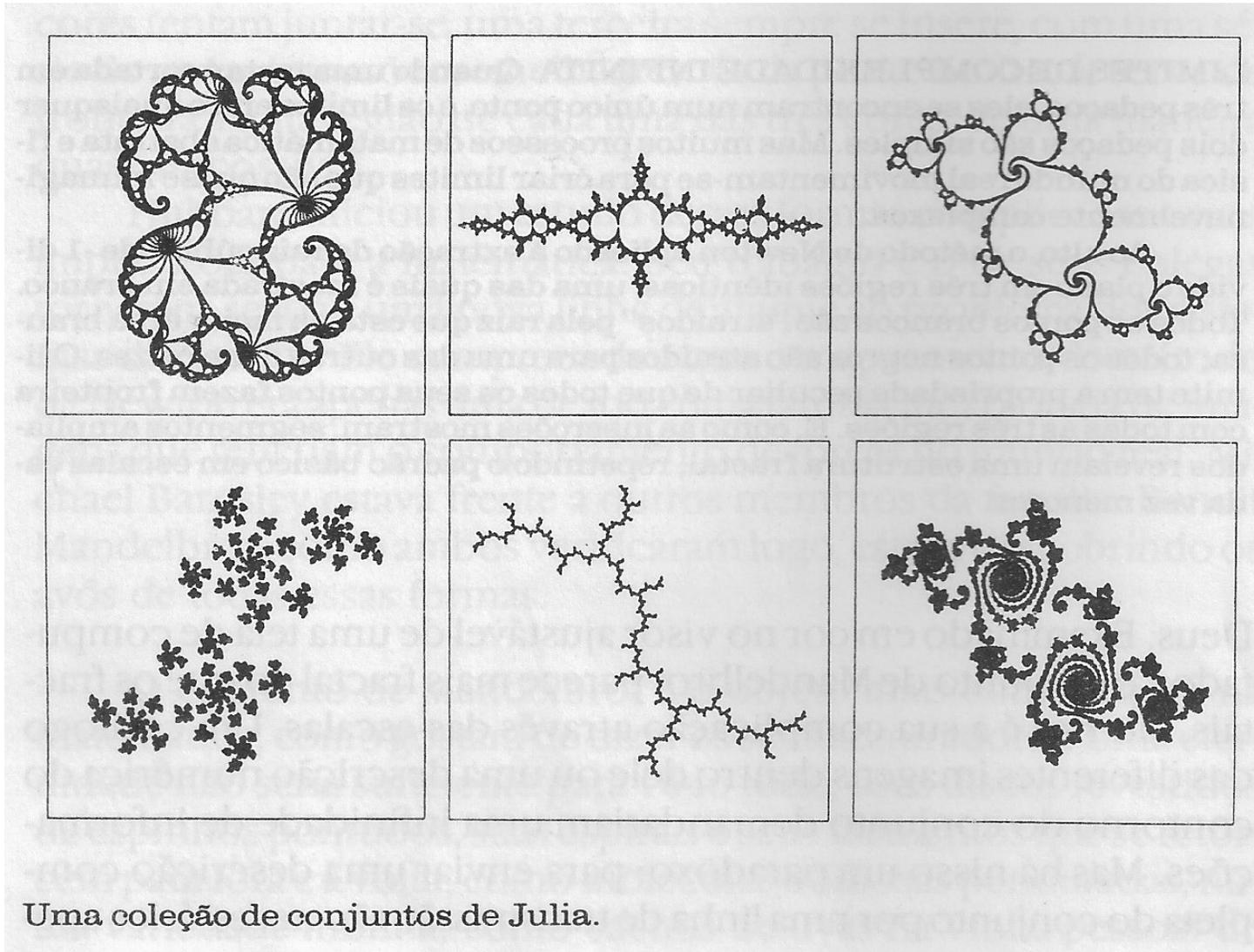
*Coelho de Douady*

$$z = z^2 - 0,122 + 0,745i$$
$$z = a + bi$$



# Conjuntos de Julia

---



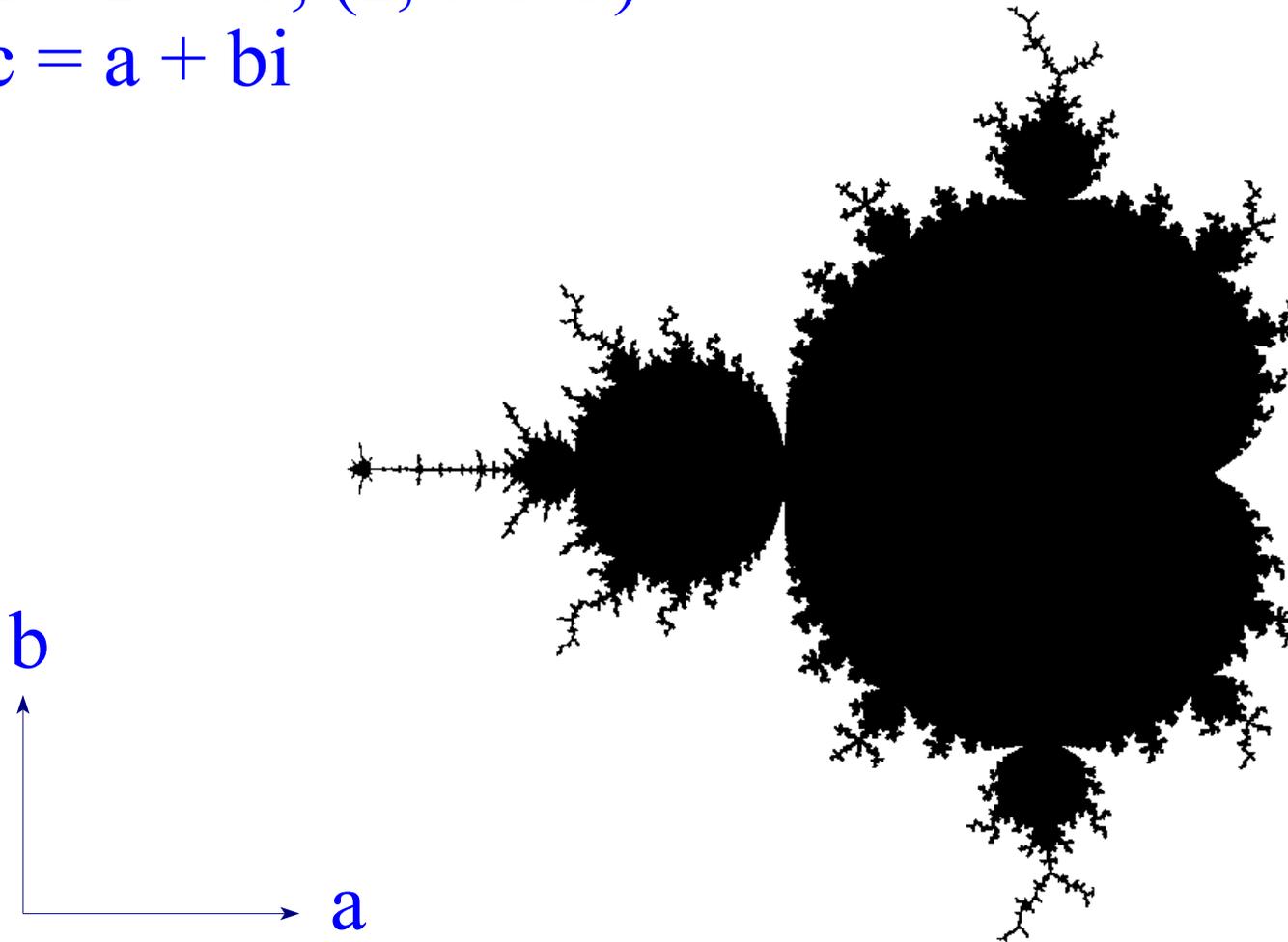
Uma coleção de conjuntos de Julia.

# Conjunto de Mandelbrot

---

$$z = z^2 + c; (z, c \in \mathbb{C})$$

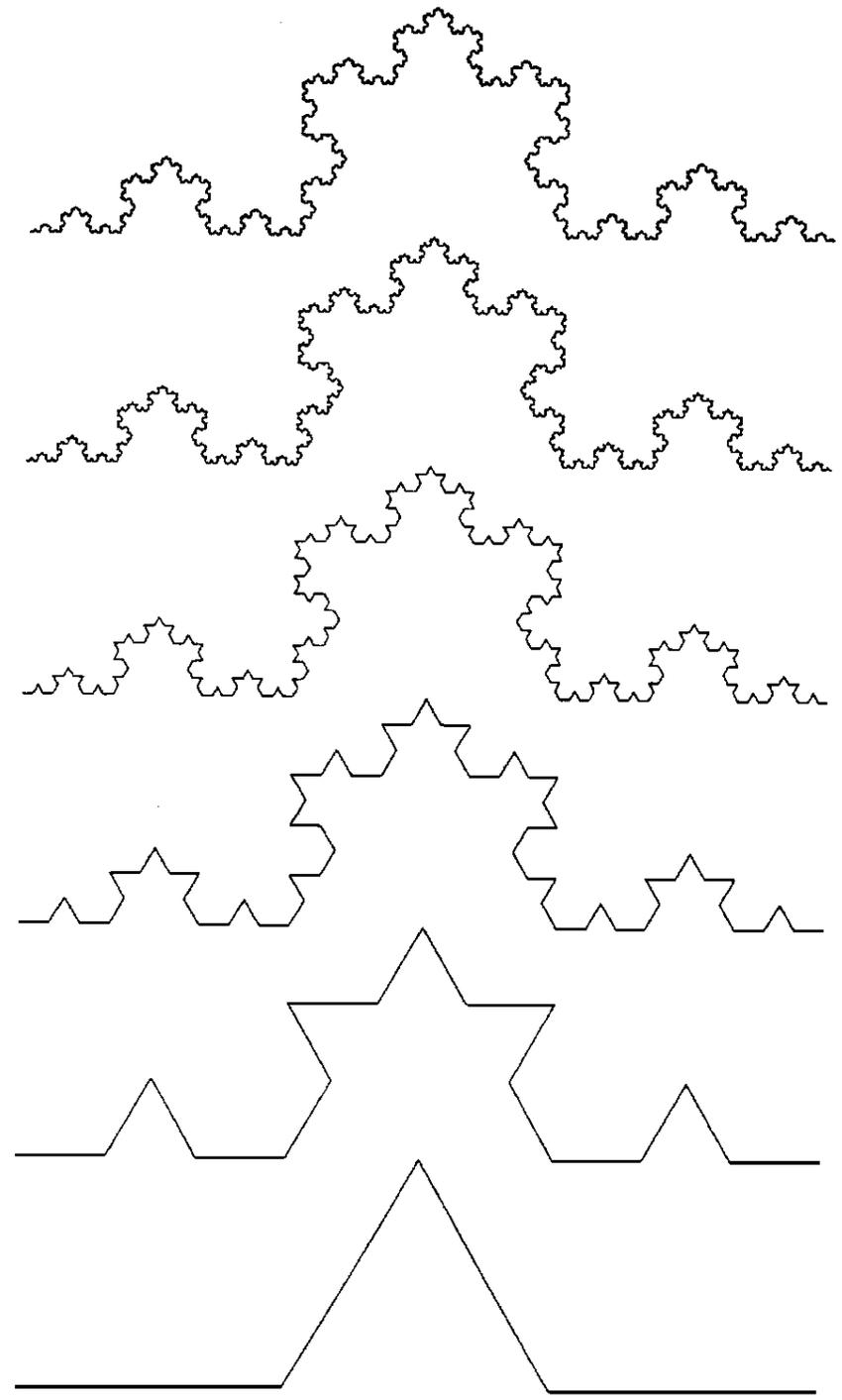
$$c = a + bi$$



# Fractais

---

- São entidades geométricas com dimensão fracionária
- São estruturas com “rugosidades” que apresentam “auto-similaridade” em diferentes escalas.



# Conjunto de Koch

---

# Ilha Esmeralda, Irlanda

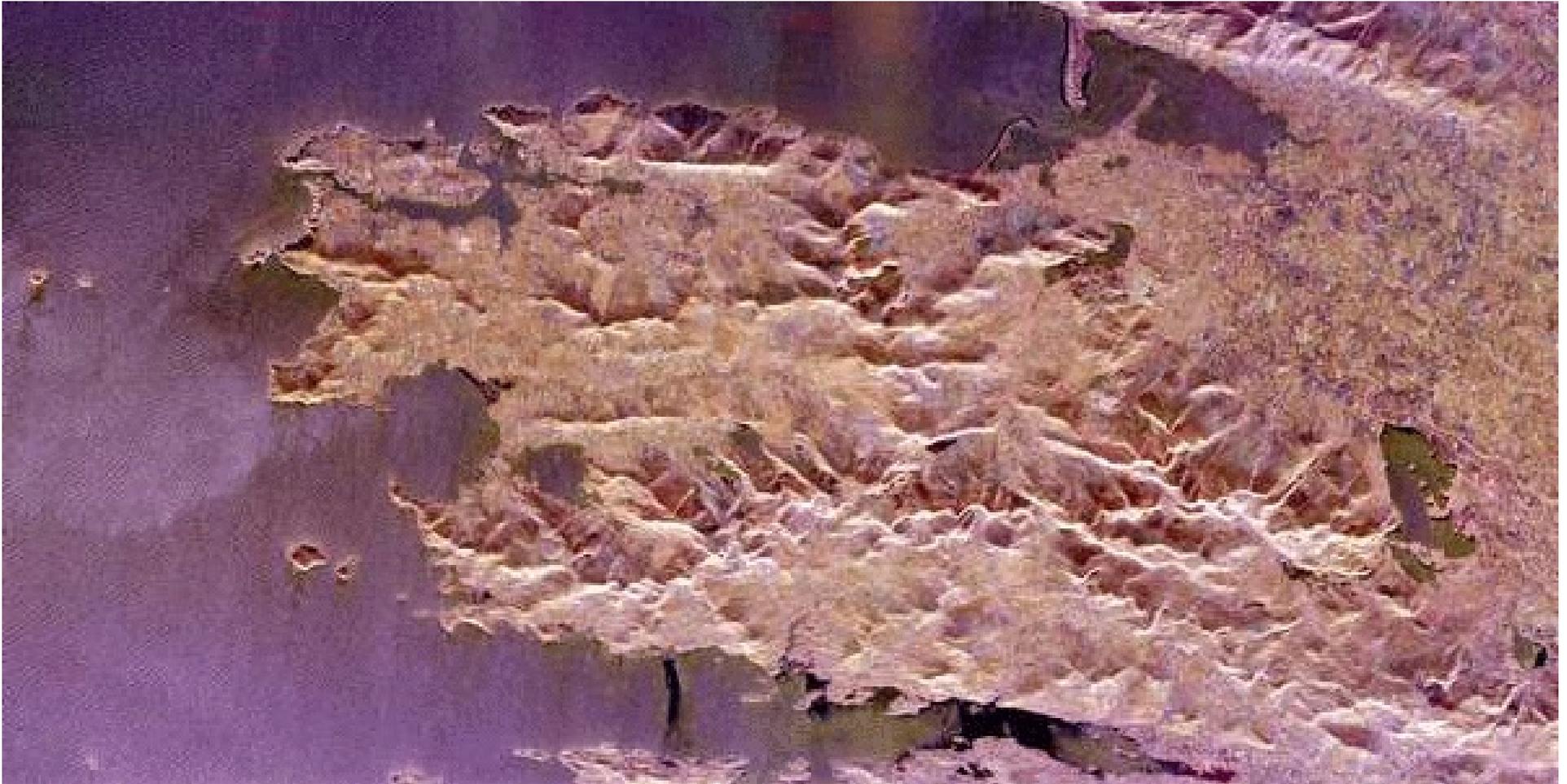
---



Jeff Schmaltz, MODIS Rapid Response Team, NASA/GSFC

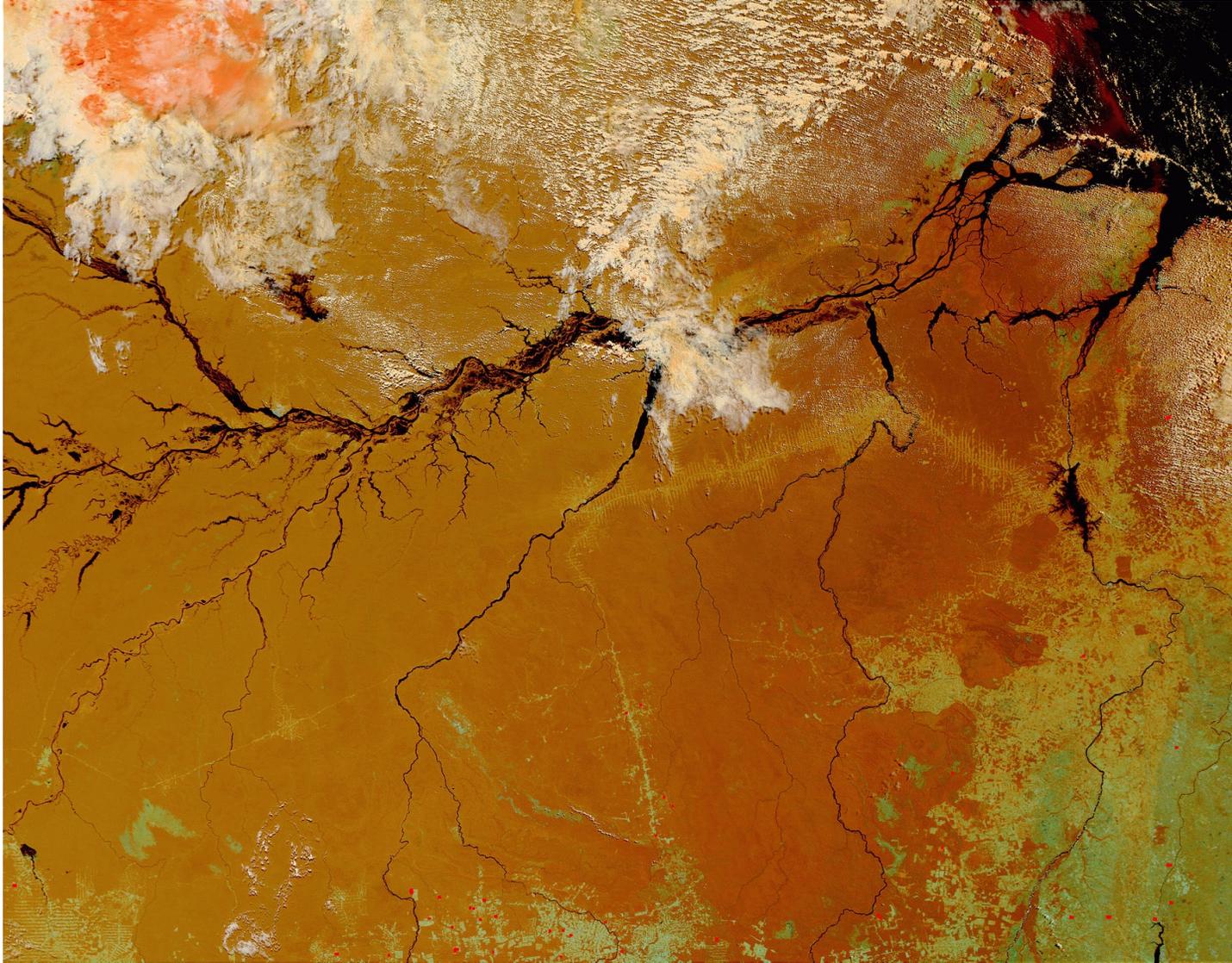
# Península Iveragh, Irlanda

---



# Rio Amazonas

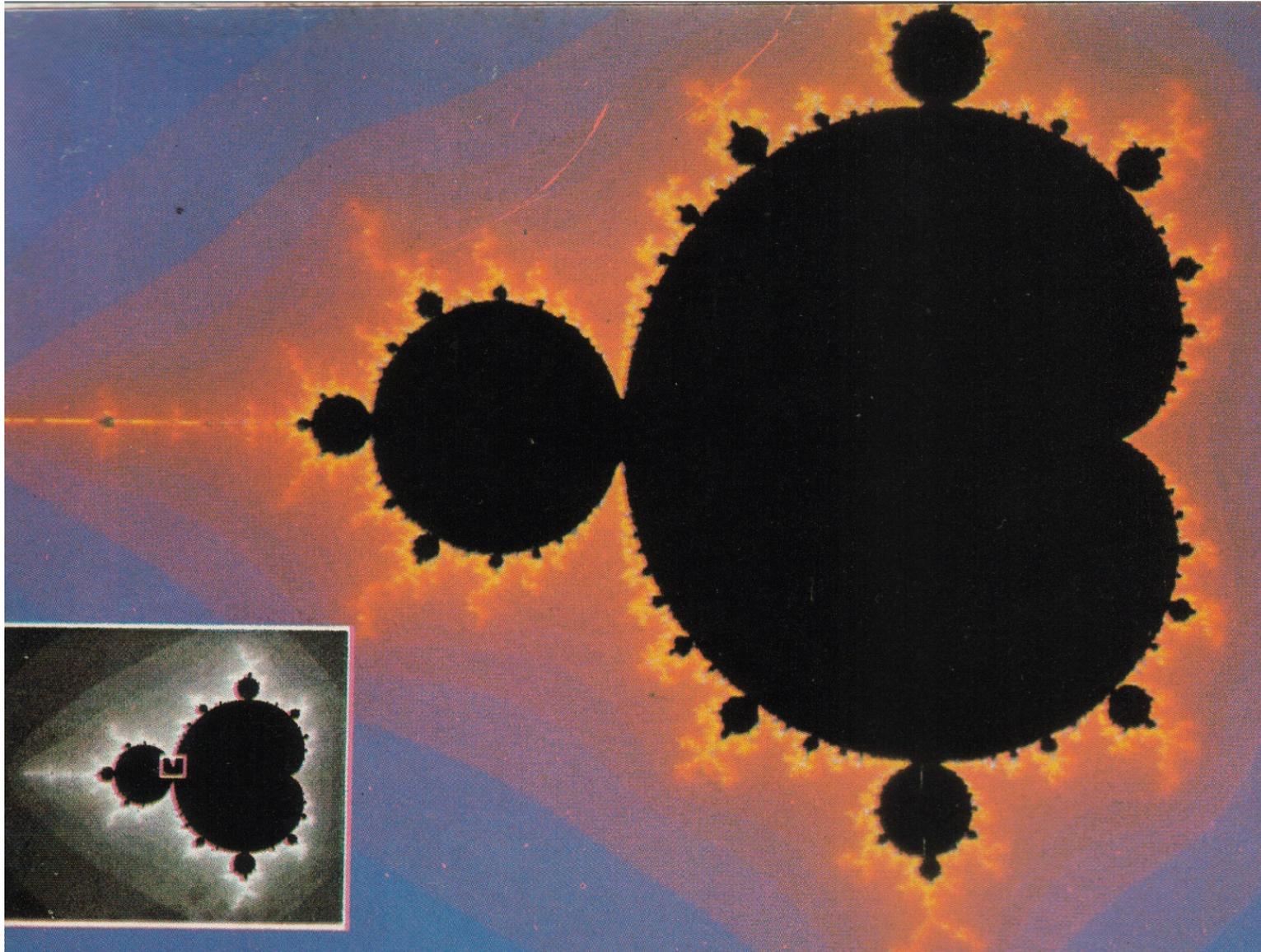
---



Jeff Schmaltz, MODIS Rapid Response Team, NASA/GSFC

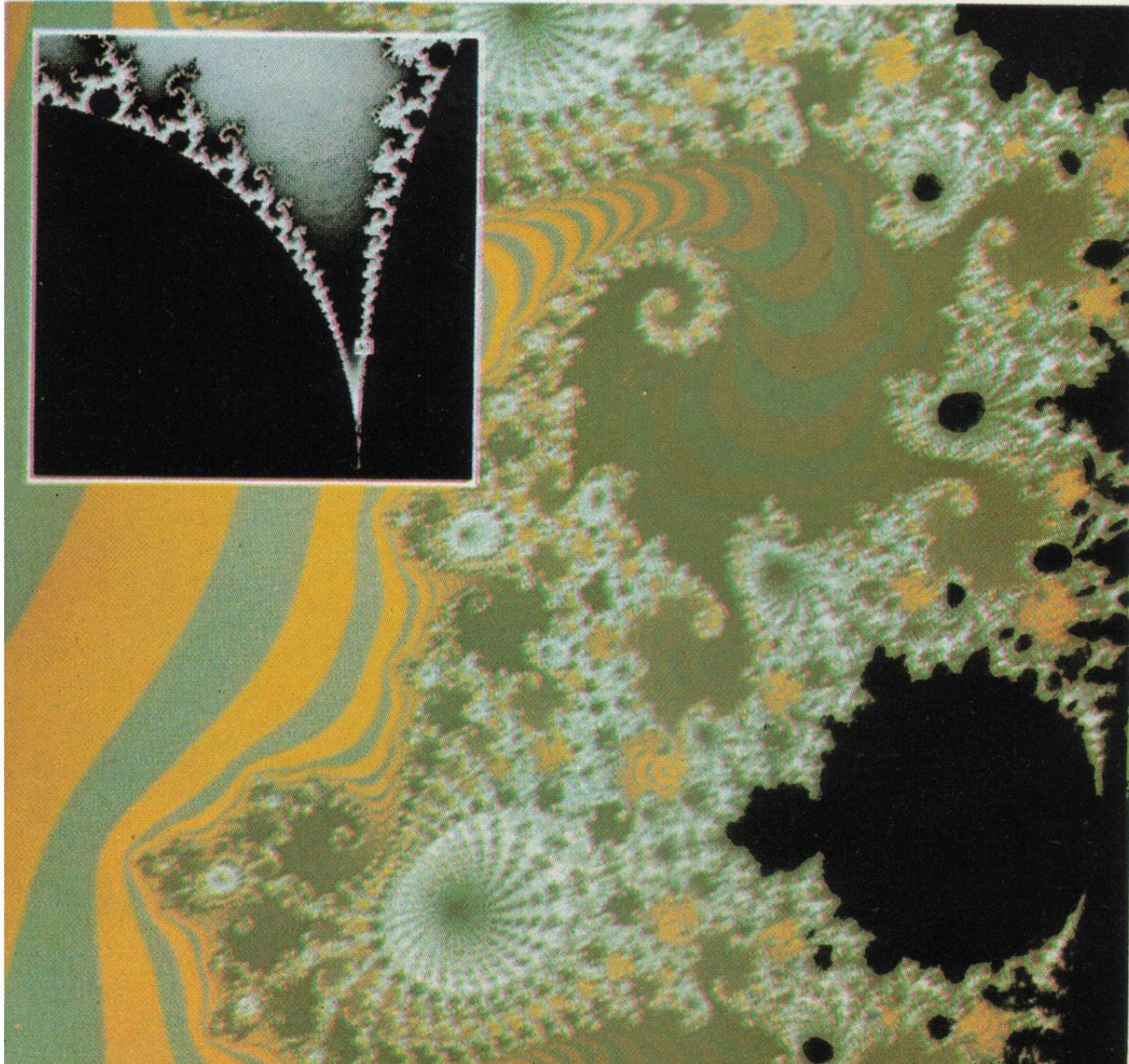
# Conjunto de Mandelbrot

---



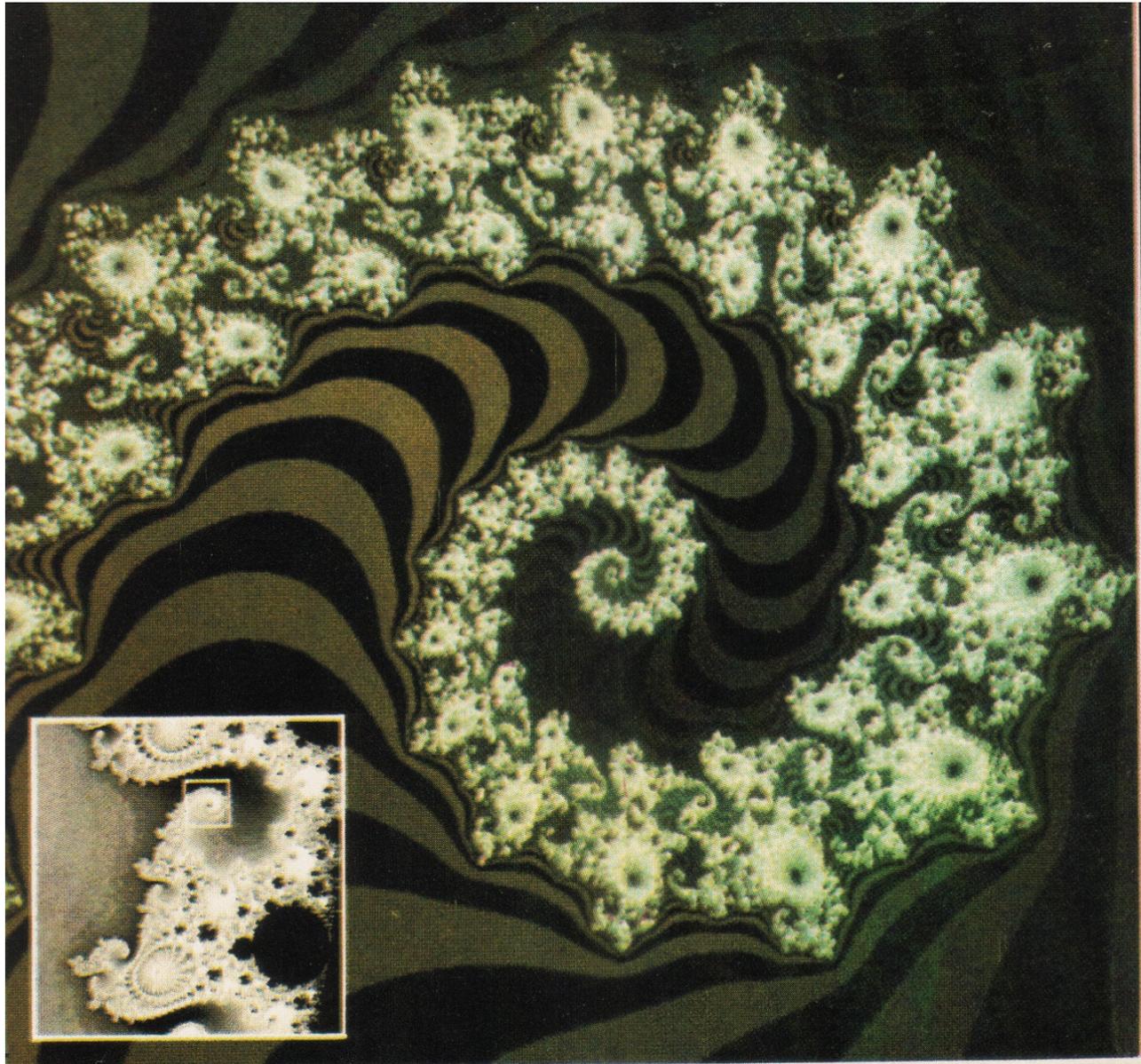
# Conjunto de Mandelbrot

---



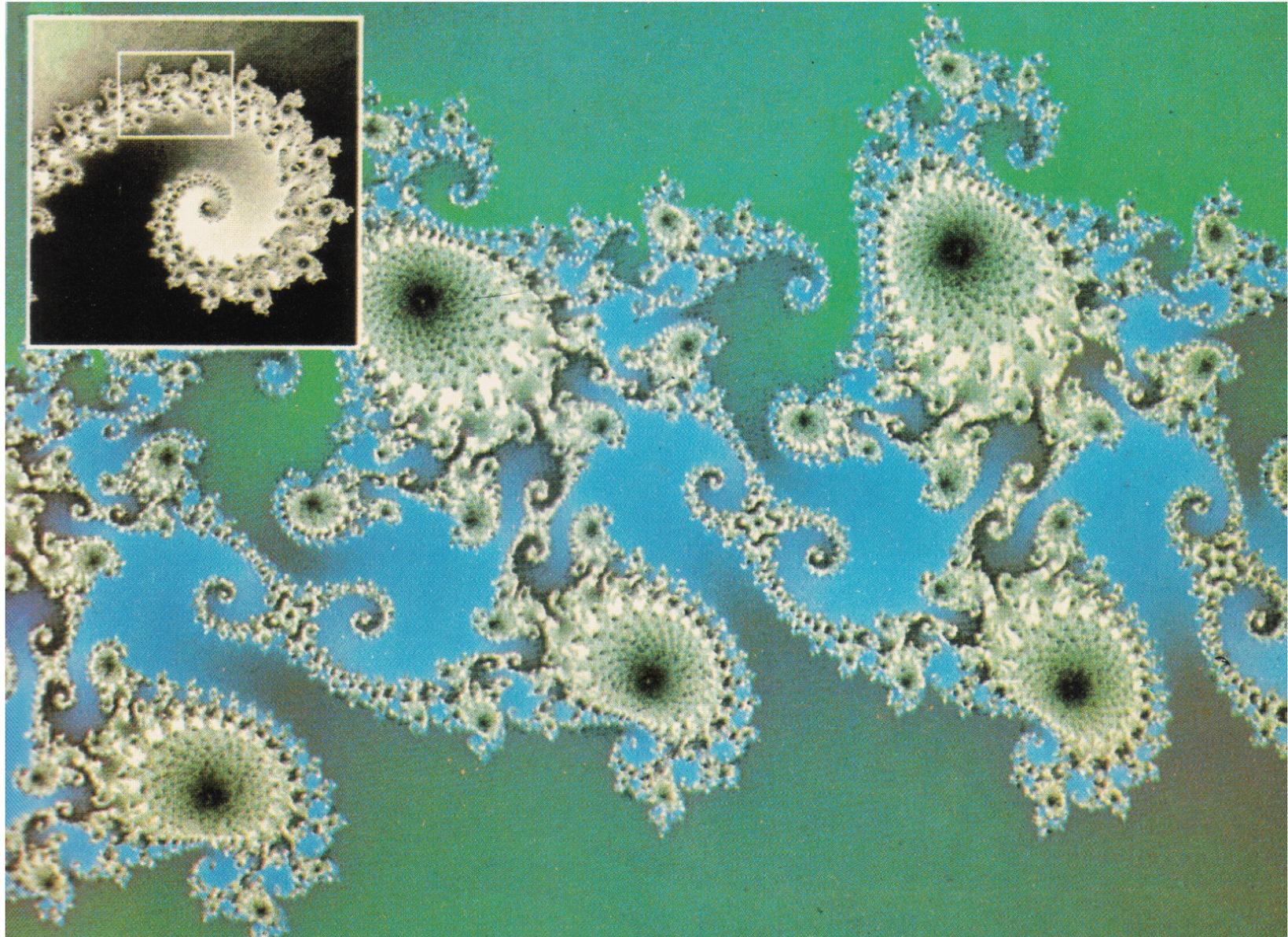
# Conjunto de Mandelbrot

---



# Conjunto de Mandelbrot

---



# Mergulhando no conjunto de Mandelbrot

---

[http://www.youtube.com/watch?v=G\\_GBwuYuOOs&feature=related](http://www.youtube.com/watch?v=G_GBwuYuOOs&feature=related)

Fractais -Uma jornada pela dimensão oculta. Scientific American Brasil, WGBH Educational Foundation and The Catticus Corporation, 2008. DVD, 53 min.

# Determinando a dimensão fractal

---

Uma dimensão

Dividindo uma reta em duas partes



$2^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$2^{\text{dimensão}} = 2$

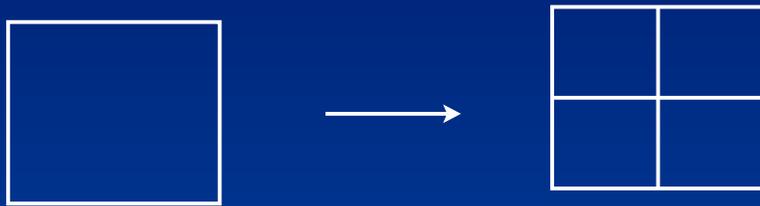
dimensão = 1

# Determinando a dimensão fractal

---

Duas dimensões

Dividindo cada lado de um quadrado em duas partes



$2^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$2^{\text{dimensão}} = 4$

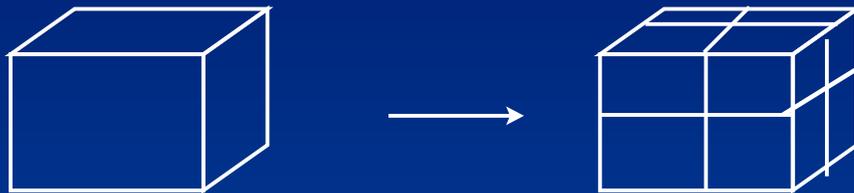
dimensão = 2

# Determinando a dimensão fractal

---

Três dimensões

Dividindo cada lado de um cubo em duas partes



$2^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$$2^{\text{dimensão}} = 8$$

$$\text{dimensão} = 3$$

# Determinando a dimensão fractal

---

Uma dimensão

Dividindo uma reta em 3 partes



$3^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$3^{\text{dimensão}} = 3$

dimensão = 1

# Determinando a dimensão fractal

---

Curva de Koch

Dividindo uma reta em 3 partes



$3^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$$3^{\text{dimensão}} = 4$$

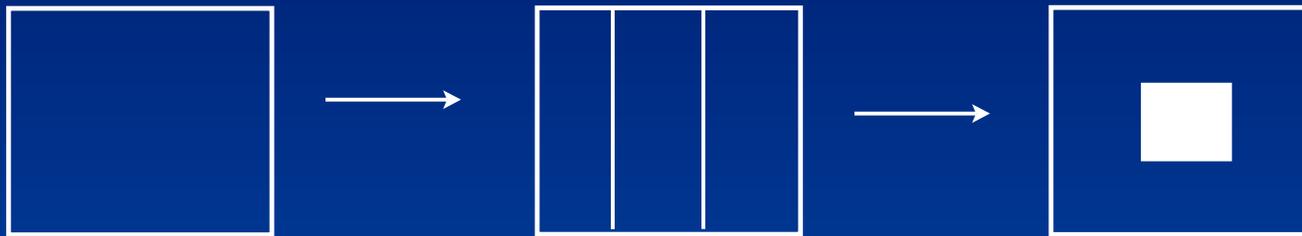
$$\text{dimensão} = \lg(4)/\lg(3) = 1,26$$

# Determinando a dimensão fractal

---

Tapete de Sierpinsky

Dividindo cada lado de um quadrado em 3 partes e retirando o quadrado do meio.



$3^{\text{dimensão}} = n^{\circ}$  de objetos produzidos

$3^{\text{dimensão}} = 8$

dimensão =  $\lg(8)/\lg(3) = 1,89$  (menor do que 2)

# Fractais

---

Podem ser gerados empregando-se fórmulas de recorrência

$$z = f(z) + c$$

onde  $z$  e  $c$  são números complexos.

$$z = a + bi$$

$$c = r + si$$

$$i = (-1)^{1/2}$$

# Gerando fractais

---

Processo de recorrência

$$\text{Passo 1: } z_1 = f(z_0) + c$$

$$\text{Passo 2: } z_2 = f(z_1) + c$$

$$\text{Passo 3: } z_3 = f(z_2) + c$$

$$\text{Passo 4: } z_4 = f(z_3) + c$$

etc.

Pode ocorrer que:

- 1) Cada valor de  $z_{n+1}$  obtido é sempre significativamente diferente de  $z_n$  (comportamento **divergente**).
- 2) A cada iteração os valores de  $z_{n+1}$  são cada vez mais próximos de  $z_n$  (comportamento **convergente**)

# Gerando fractais

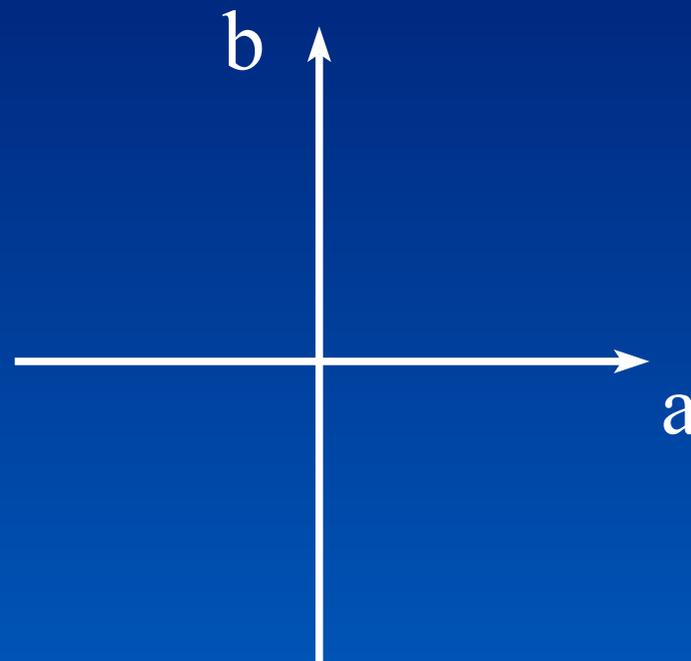
---

Mapeando a fronteira entre os valores de  $z$  convergentes e divergentes - Conjunto de Julia

$$z = a + bi$$

$a$  = parte real (eixo x)

$b$  = parte imaginária (eixo y)



Plano dos  
números  
complexos

# Gerando fractais

---

Diferentes conjuntos de Julia\*

$$z = f(z) + c$$

- $z = \cos(z)$
- $z = \sin(z)$
- $z = z^2 + 0,384$  (rosa)
- $z = z^2 - 0,2541$  (crisântemo)
- $z = z^2 - 1,5$  (EKG)
- $z = z^2 + i$  (dendrito)

\*Laplante, P., Fractal Mania, Nova Iorque: Windcrest/ McGraw-Hill, 1994.

# Gerando fractais

---

Diferentes conjuntos de Julia\*

$$z = f(z) + c$$

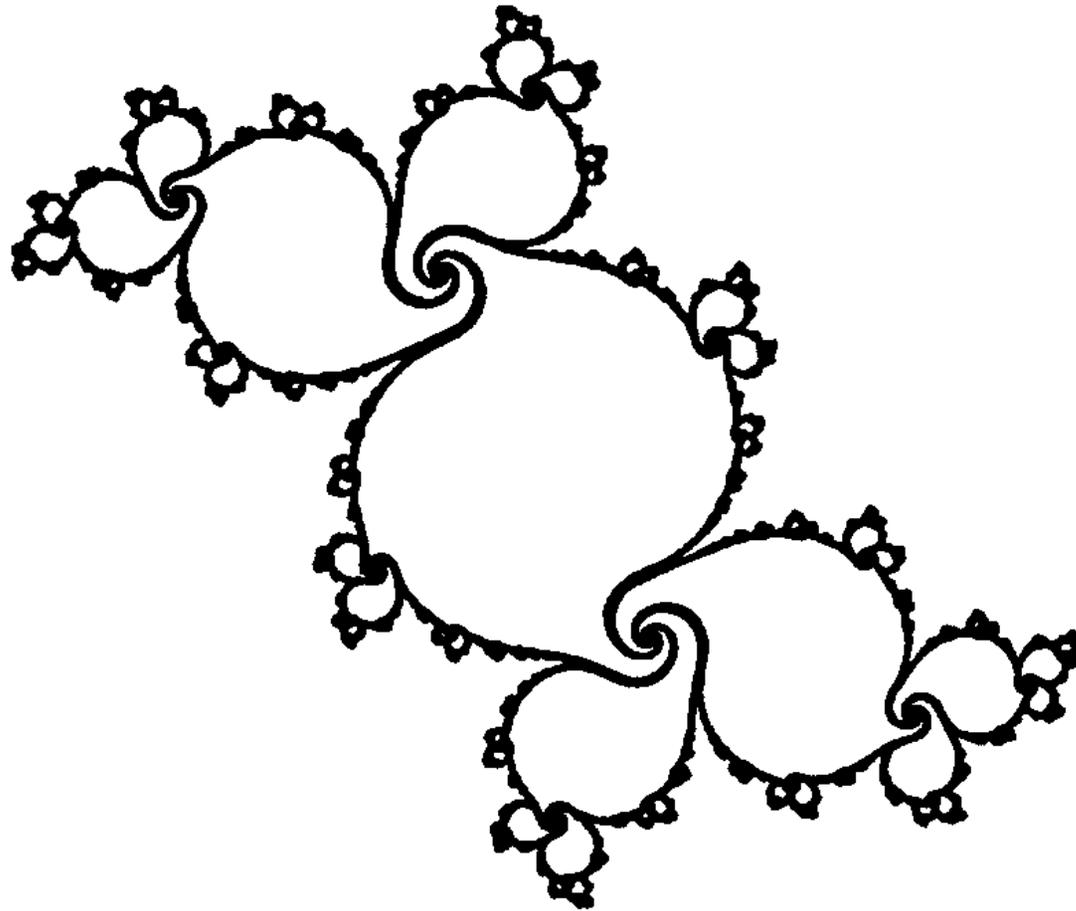
- $z = z^2 - 0,194 + 0,6557i$  (nuvem)
- $z = z^2 - 0,39054 + 0,58679i$  (disco de Siegel)
- $z = z^2 - 0,122 + 0,745i$  (coelho de Douady)
- $z = z^2 - 0,360284 + 0,100376i$  (dragão)

\*Laplante, P., Fractal Mania, Nova Iorque: Windcrest/ McGraw-Hill, 1994.

# Conjunto de Julia

---

*Coelho de Douady*



# Gerando fractais

---

Conjunto de Mandelbrot

Também é gerado empregando-se o processo de recorrência para a expressão

$$z = f(z) + c$$

onde  $z$  e  $c$  são números complexos, mas nesse caso sempre se começa com  $z = 0 + 0i$  e se investiga o que ocorre para valor de  $c$ .

# Gerando fractais

---

Processo de recorrência para o conjunto de Mandelbrot

Passo 0:

$$z_0 = 0 + 0i;$$

$c = a + bi$  (escolhe-se um ponto do plano complexo)

$$\text{Passo 1: } z_1 = f(z_0) + c$$

$$\text{Passo 2: } z_2 = f(z_1) + c$$

$$\text{Passo 3: } z_3 = f(z_2) + c$$

$$\text{Passo 4: } z_4 = f(z_3) + c$$

etc.

Pode ocorrer que:

- 1) Os valores de  $z$  sejam **divergentes**.
- 2) Os valores de  $z$  sejam **convergentes**.

# Gerando fractais

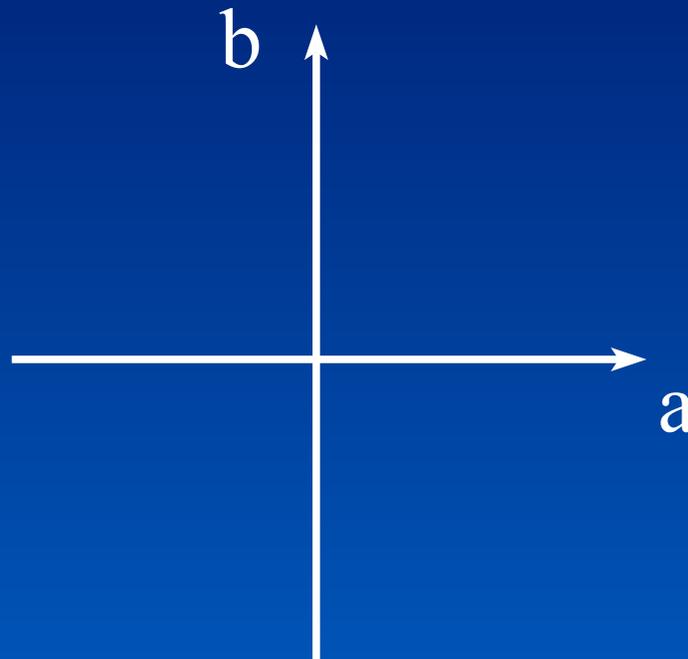
---

Mapeando a fronteira entre os valores de  $z$  convergentes e divergentes - Conjunto de Mandelbrot

$$c = a + bi$$

$a$  = parte real (eixo x)

$b$  = parte imaginária (eixo y)

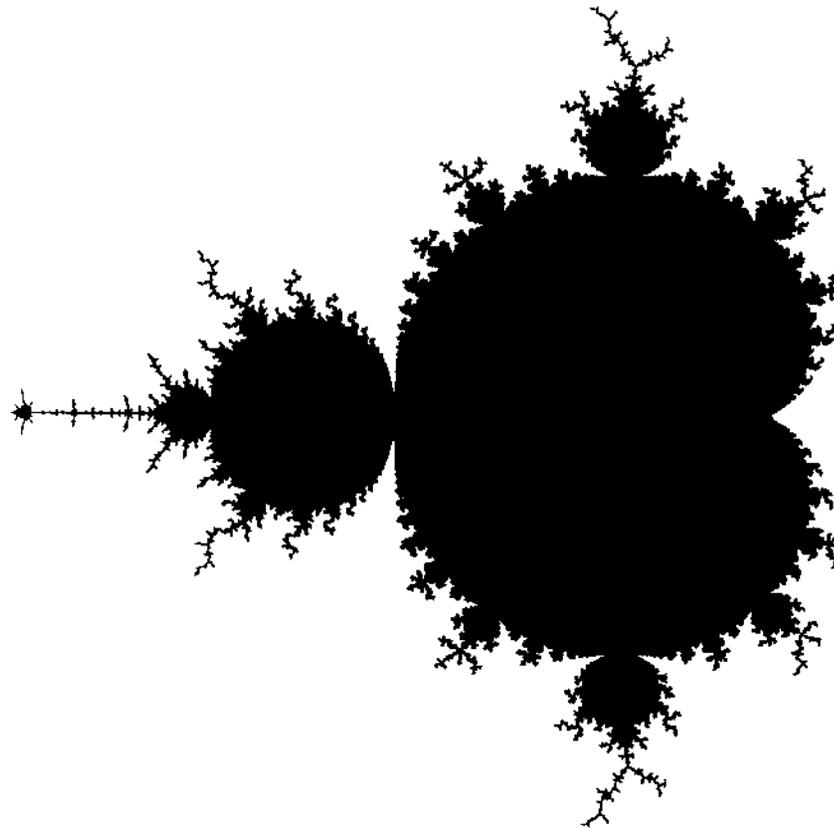


Plano dos  
números  
complexos

# Conjunto de Mandelbrot

---

$$z = z^2 + c$$



# Lista de códigos em Pascal disponíveis no livro Fractal Mania

---

- Amoeba
- Cantor\_set
- Carpet
- Castle
- Cell1
- Cell2
- Cloud
- Clouds2

# Lista de códigos em Pascal disponíveis no livro Fractal Mania

---

- Dendrite
- Dragon (conjunto de Julia)
- Fall
- Fern
- Flower1
- Flower2
- Forest
- Galax1

# Lista de códigos em Pascal disponíveis no livro Fractal Mania

---

- Julia1
- Julia2
- Life
- Rule
- Life2
- Mandel (Mandelbrot)
- Mandel2 (Mandelbrot)
- Mazel

# Lista de códigos em Pascal disponíveis no livro Fractal Mania

---

- Prey
- Price
- Rabbit (conjunto de Julia)
- Forest\_scene
- Rocks
- Siegel (conjunto de Julia)
- Sierp (triângulo de Sierpinsky)
- Sierp2(triângulo de Sierpinsky)

# Lista de códigos em Pascal disponíveis no livro Fractal Mania

---

- Snow
- Swamp
- Tree

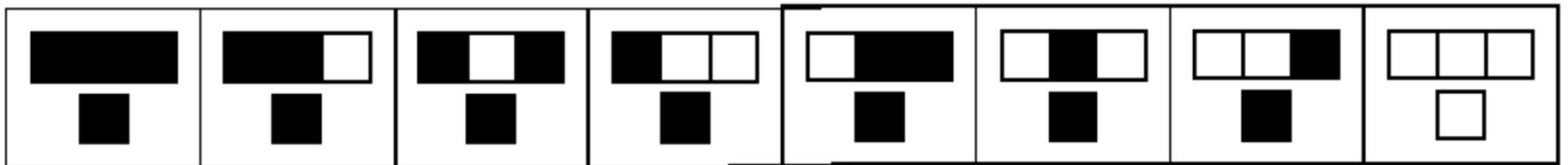
# Outros termos ligados à complexidade

---

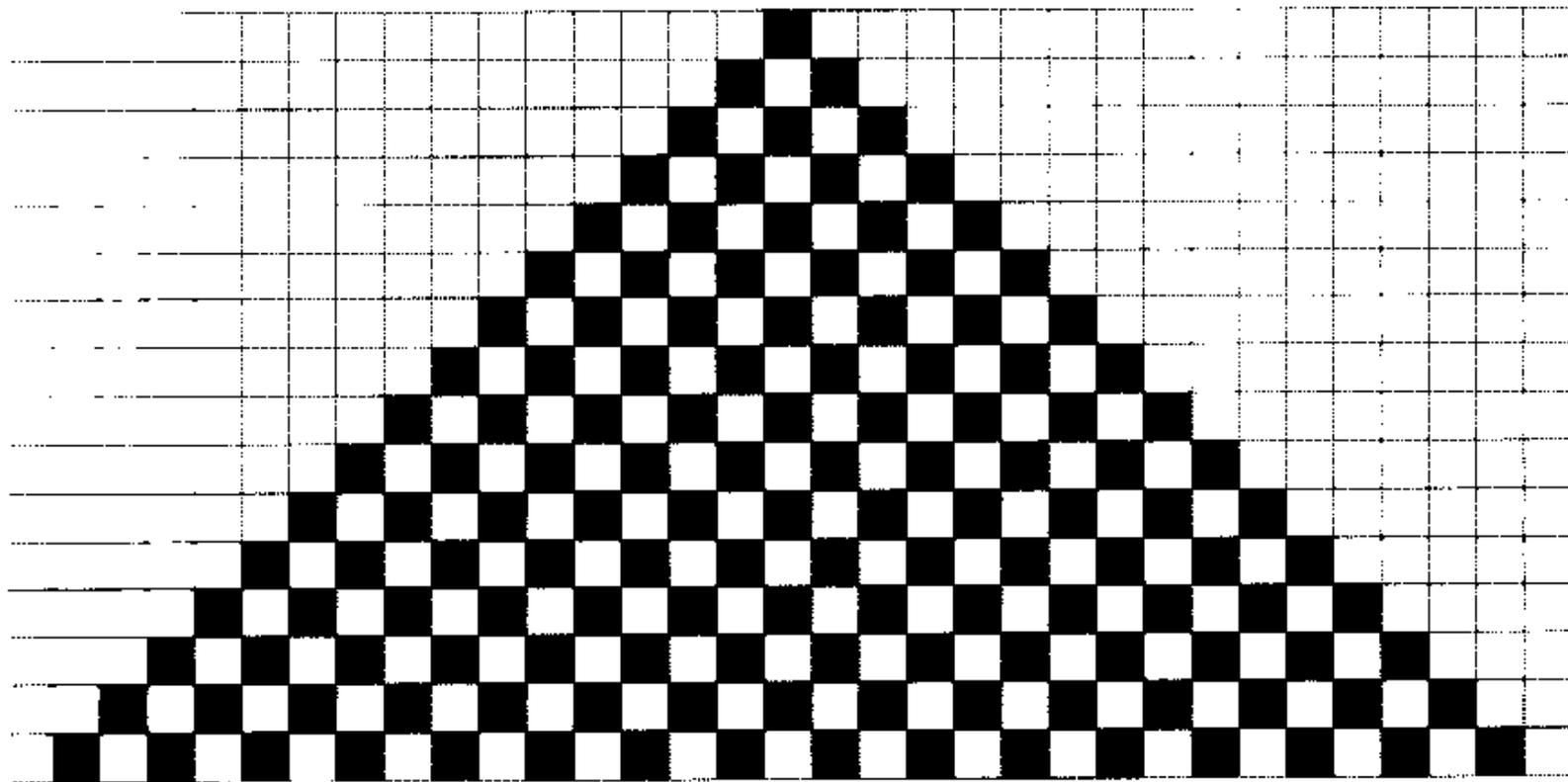
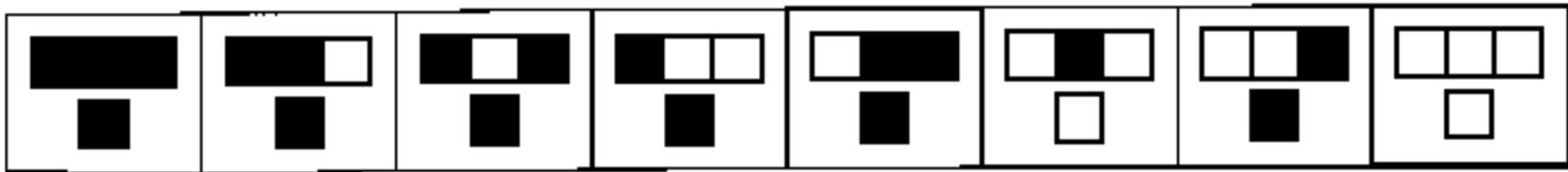
- Autômatos celulares
- Algoritmos genéticos
- Redes

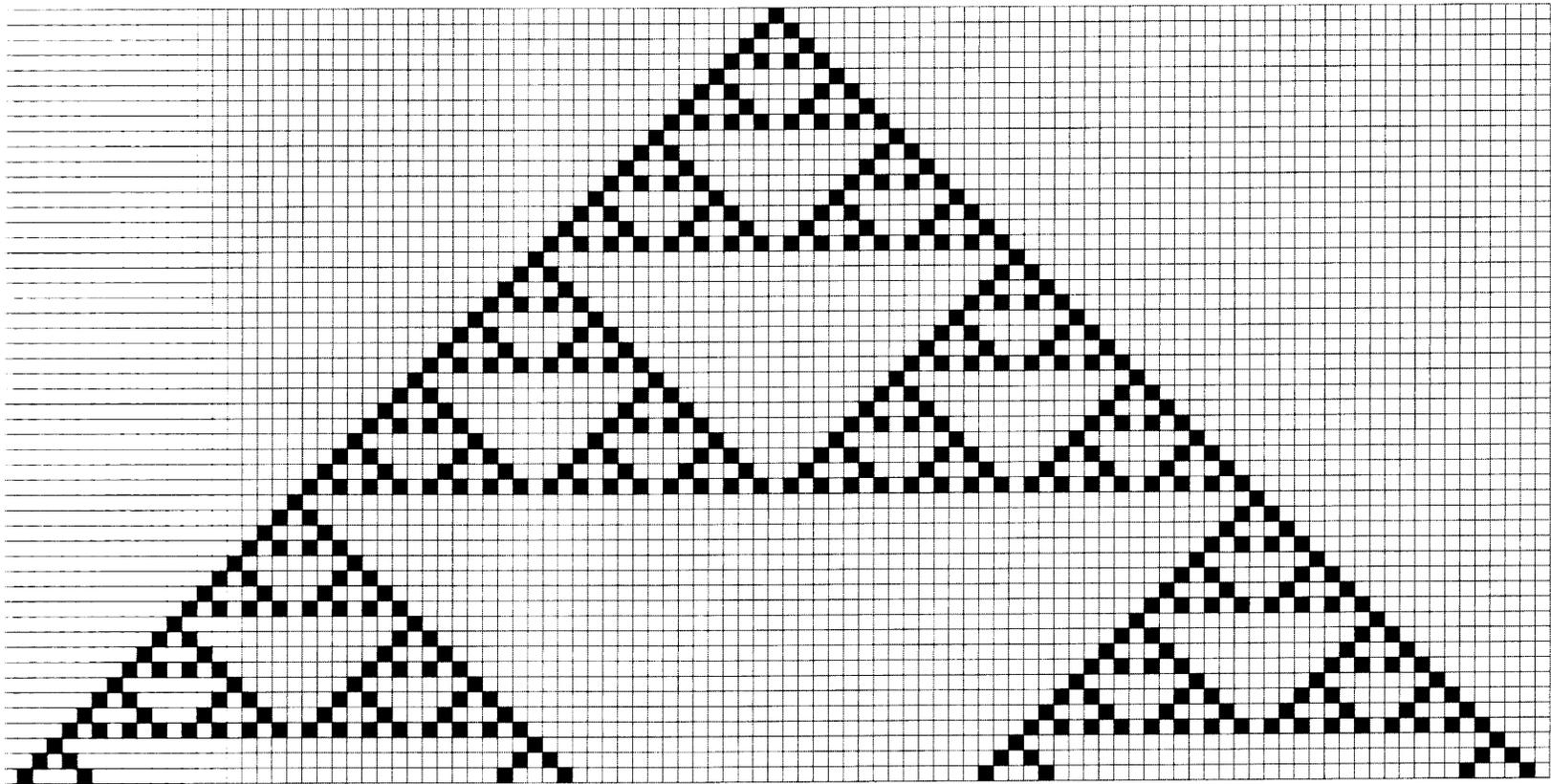
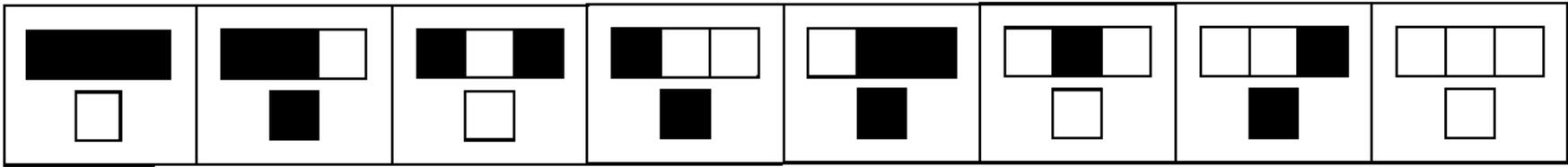
# Autômato celular

---





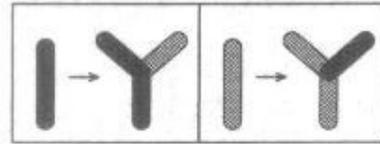
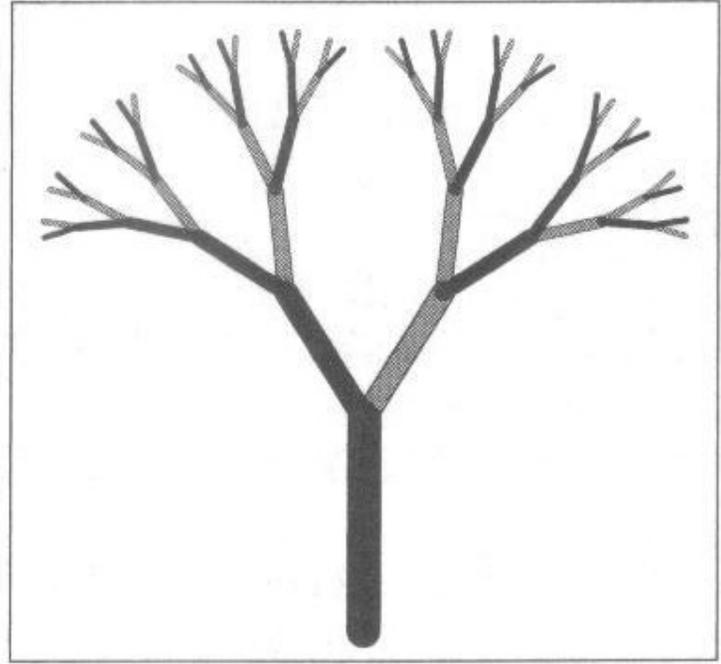
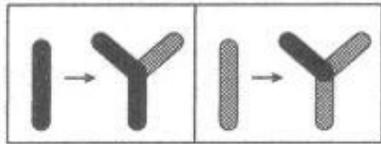
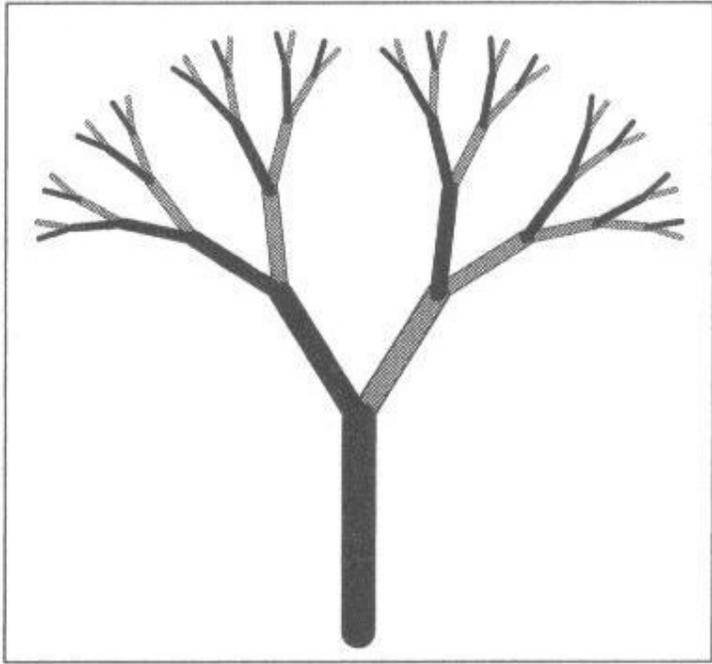


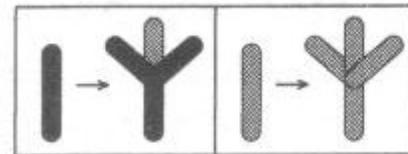
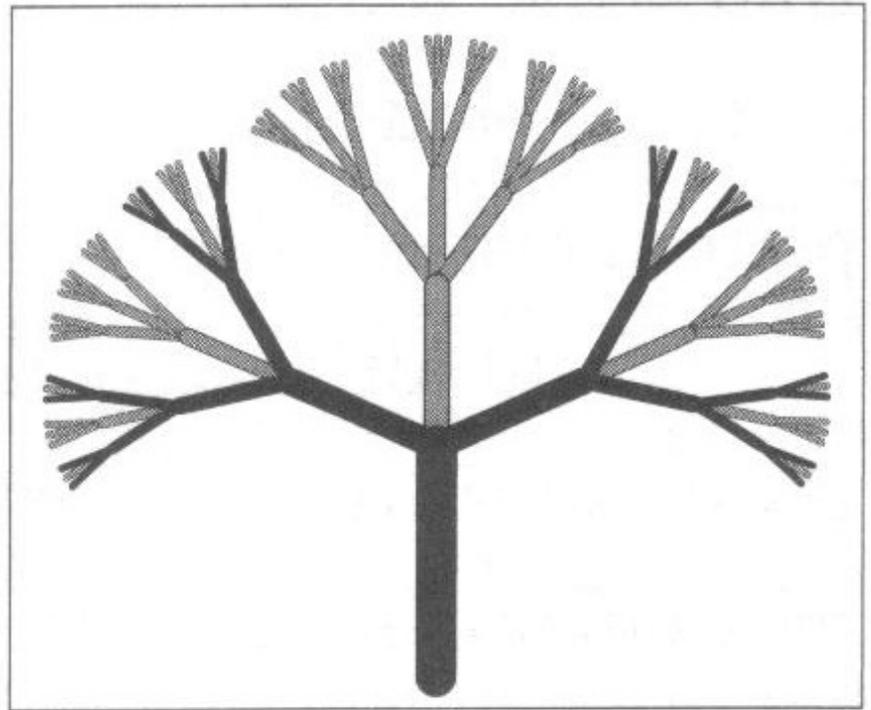
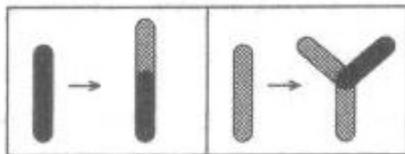
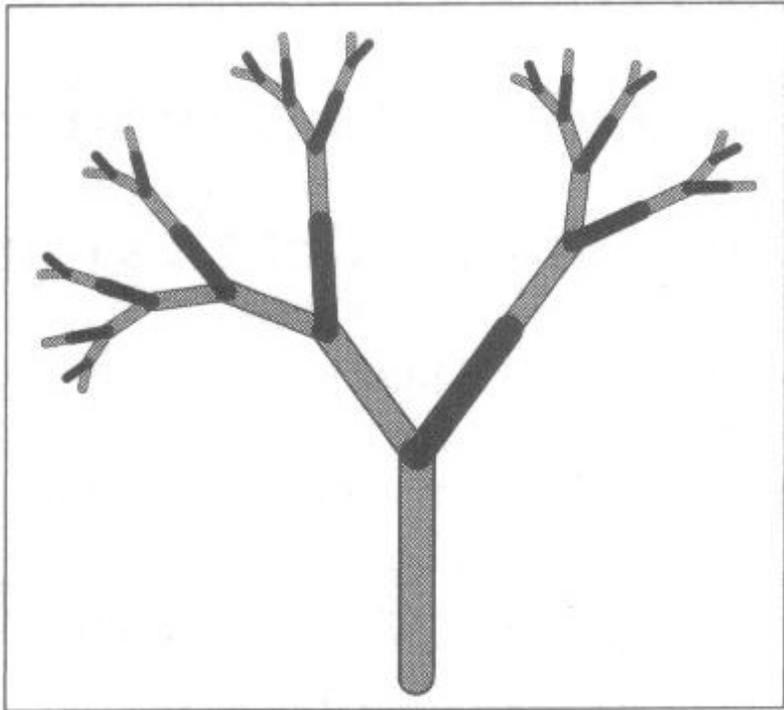


# Outras possibilidades de autômatos celulares

---

- Autômatos celulares totalísticos (3 cores)
- Autômato móvel (Mobile Automata)
- Máquinas de Turing
- Sistemas de substituição
- Sistemas de substituição sequencial
- Sistemas marcados (Tag Systems)
- Máquinas com registros (Register Machines)
- Sistemas simbólicos





# Algoritmos Genéticos

---

- Se referem a procedimentos que podem ser feitos por um computador.
- São procedimentos através dos quais um programa de computador gera um código que é obedecido por um outro programa.
- Buscam simular o processo de seleção natural.

# Algoritmos genéticos

---

*Receita para ser repetida por várias gerações*

- Produza uma população inicial de códigos aleatórios.
- Calcule o desempenho de cada indivíduo.
- Selecione, pelo desempenho, um certo número de indivíduos para serem os *pais* da próxima geração.
- Desses pais selecionados, escolha 2, de maneira aleatória e produza filhos combinando os seus códigos.
- Sempre introduza alterações aleatórias nos códigos produzidos (mutações genéticas).
- Continue combinando os códigos dos pais até restabelecer o total da população inicial.

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- Matriz  $10 \times 10 = 100$  posições
- O robot parte da posição (0,0)
- Latas são colocadas nas diversas posições da matriz de forma aleatória, preenchendo cerca de 50% das posições.
- O Robot pode fazer 7 “movimentos”:
  - ▶ 0 Não faz nada
  - ▶ 1 Move-se para a posição acima
  - ▶ 2 Move-se para a posição abaixo
  - ▶ 3 Move-se para a posição à esquerda
  - ▶ 4 Move-se para a posição à direita
  - ▶ 5 Escolhe uma direção aleatória para se mover
  - ▶ 6 Coleta uma lata

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- Para cada movimento Robot recebe uma pontuação.  
Se o Robot:
  - ▶ Pegar uma lata = 10 pontos
  - ▶ Abaixar para pegar uma lata numa posição vazia = -1 ponto
  - ▶ Bater na parede = -5 pontos
- A cada momento o Robot sabe o conteúdo das posições imediatamente ao seu redor. São 243 possibilidades.

# Algoritmo genético - Robot cata lata

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- O código genético é o que ele faz em cada situação, uma sequência de 243 números:

| <u>acima</u> | <u>abaixo</u> | <u>esq.</u> | <u>direita</u> | <u>Local Atual</u> | <u>Ação</u> |
|--------------|---------------|-------------|----------------|--------------------|-------------|
| vazio        | vazio         | vazio       | vazio          | vazio              | 3           |
| vazio        | vazio         | vazio       | vazio          | lata               | 5           |
| vazio        | vazio         | vazio       | vazio          | parede             | 4           |
| vazio        | vazio         | vazio       | lata           | vazio              | 0           |
| .            | .             | .           | .              | .                  | .           |
| parede       | parede        | parede      | parede         | parede             | 3           |

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- O número máximo de pontos em cada sessão de coleta é igual a 500.
- Em cada sessão de coleta o número máximo de movimentos do robot é limitado a 200.
- Para cada “indivíduo” calcula-se a média dos pontos obtidos em 100 sessões de coleta.

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- Gera-se, de maneira aleatória, o código genético de 200 “indivíduos”
- Cada “indivíduo” realiza 100 sessões diferentes de coleta de latas e calcula-se a média dos pontos obtidos (valor máximo de pontos = 500)
- Escolha dois “indivíduos” para misturar os seus códigos genéticos. Quanto melhor tiver sido o desempenho do indivíduo, maior a sua chance de ser escolhido.

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- A combinação dos códigos é feita sorteando-se um número de 1 a 243. O número sorteado marca o ponto até onde se usa o código do primeiro indivíduo e a partir do qual se usa o código do segundo indivíduo para gerar o “filho”.
- Inverte-se o procedimento para gerar o código de um segundo “filho”.
- Depois de gerados 200 “filhos” sorteia-se dois filhos e nestes introduz-se “mutações genéticas” alterando-se o código em uma posição qualquer do código genético.

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- Claro que pensando um pouco podemos gerar um código genético que deve funcionar relativamente bem. Tentativas razoáveis costumam produzir “indivíduos” capazes de fazer em torno de 350 pontos.
- Este procedimento de “seleção natural com mutações” costuma gerar “indivíduos” com desempenho em torno de 480!

# Algoritmo genético - Robot cata lata

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009. pg 130

- Uma análise do desempenho dos indivíduos gerados pelo algoritmo genético, revela que estes fazem um uso melhor da opção 5 = fazer um movimento aleatório.

# Algoritmo genético

---

M. Mitchell, *Complexity*, Oxford University Press, 2009.

- É assustador!
- Algoritmos evolucionários como este são capazes de encontrar soluções novas, incapazes de serem pensadas pelos mais experientes profissionais.
- Um exemplo recente foi o concurso recente para o desenho de uma antena para veículos espaciais, proposto pela NASA, cujo vencedor não foi um engenheiro e sim uma antena de formato muito estranho desenhada por um algoritmo genético.
- Engenheiros experientes declararam que não entendem como ela funciona, mas que é um grande avanço sobre todos os desenhos conhecidos até então.

# Tipos/Conceitos de Redes

---

- Mundo pequeno (*small world network*)
- Redes sem escala (*scale-free network*)

# Redes de “mundo pequeno”

---

- Por exemplo, as conexões/amizades/conhecimento entre as pessoas.
- “Quaisquer duas pessoas estão ligadas, em média, através de 6 conexões”
- Propriedade determinante: uma rede de mundo pequeno possui poucas conexões entre nós distantes mas um caminho relativamente pequeno entre quaisquer dois nós.

# Redes sem escala

---

- É um tipo especial de rede de mundo pequeno, mas que se aproxima mais das redes que se originam espontaneamente no mundo real.
- São redes que se caracterizam por terem nós com um número grande de conexões (*hub*).
- Apresentam:
  - ▶ Uma distribuição que segue uma lei exponencial
  - ▶ Auto-semelhança de escala
  - ▶ Resiliência

# Redes sem escala

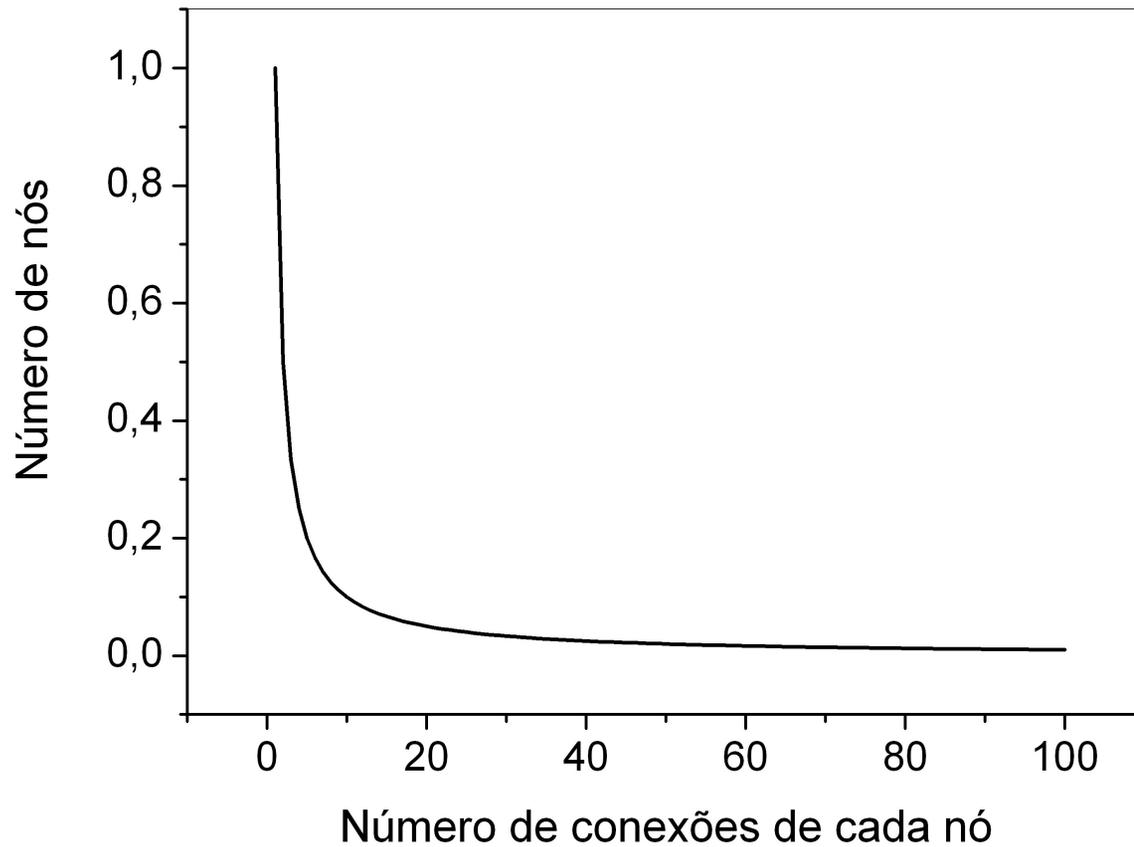
---

*Lei exponencial*

- Número de páginas da internet com  $k$  conexões é proporcional a  $1/k^2$

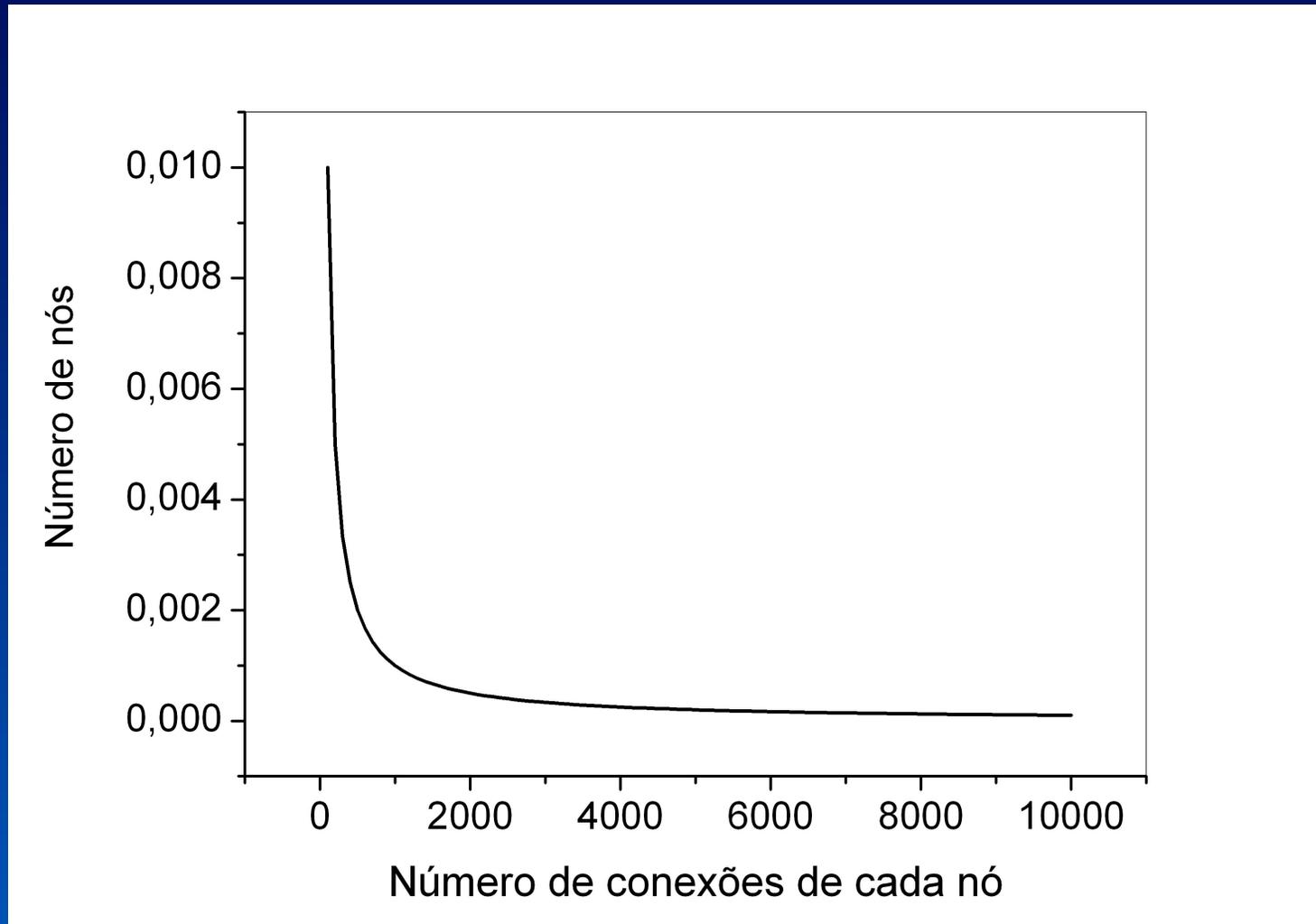
# Redes sem escala

*Auto-semelhança de escala*



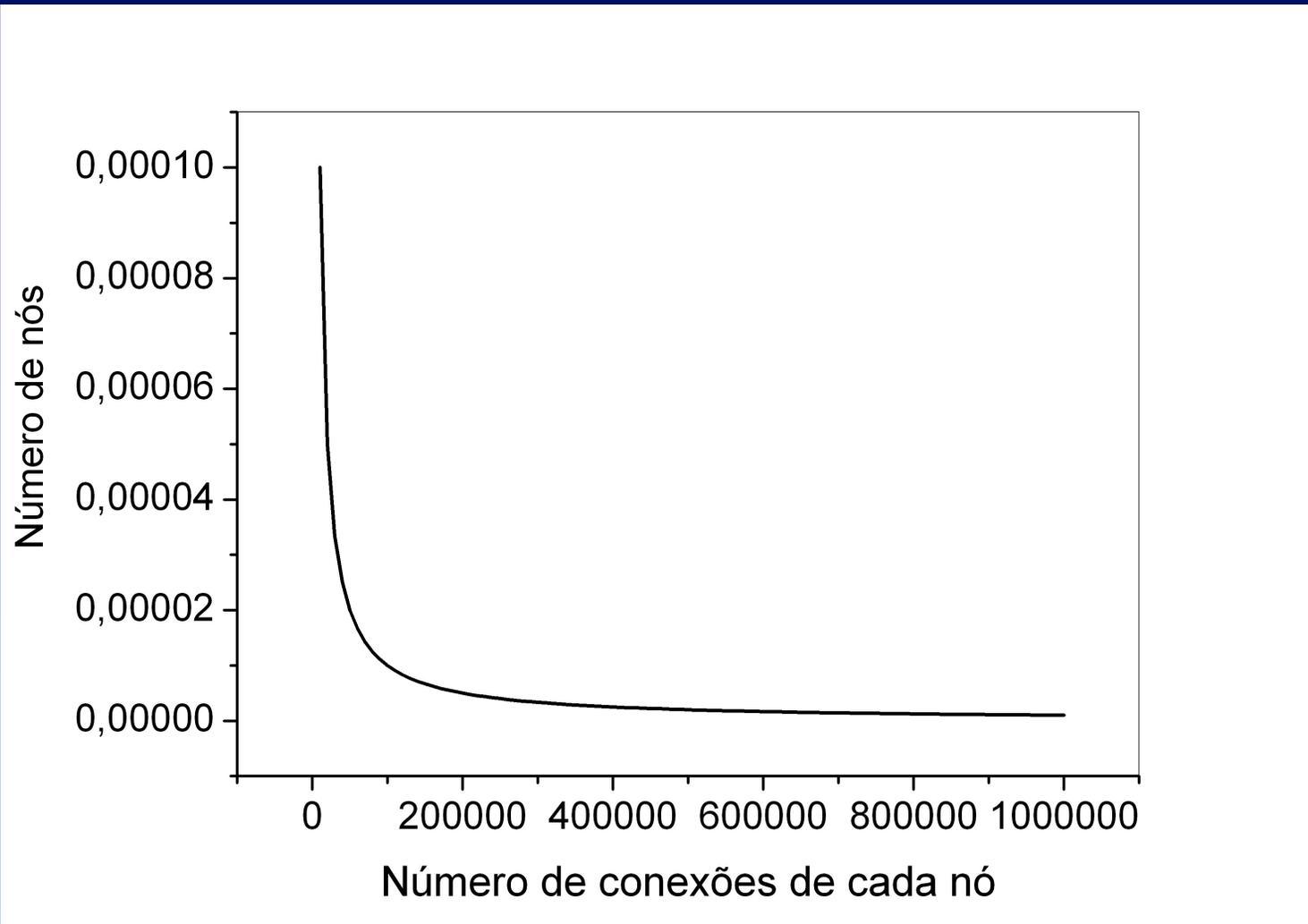
# Redes sem escala

*Auto-semelhança de escala*



# Redes sem escala

*Auto-semelhança de escala*



# Redes sem escala

---

## *Resiliência*

- Capacidade de se recobrar facilmente ou se adaptar à má sorte ou às mudanças.
- Propriedade dos corpos de retornarem à forma original após serem deformados.

# Redes sem escala

---

*As 4 propriedades principais*

- Um número relativamente pequeno de nós com muitas conexões.
- Os graus de conexões dos nós são muito variados.
- Auto-similaridade
- Estrutura de mundo pequeno = resiliência

# Exemplos de Redes do Mundo Real

---

- O cérebro (*small-world network*)
  - ▶ Resiliência
  - ▶ Presença de *hubs*
  - ▶ Sincronização (vários neurônios disparam em conjunto)
- Redes genéticas reguladoras
  - ▶ Genes que controlam a expressão e outros genes.
- Redes metabólicas
- Epidemiologia
- Ecologia e cadeia alimentar

# Efeito cascata nas redes

---

## *Efeito dominó*

- É um comportamento oposto à resiliência de uma rede.
- O mal funcionamento de um nó da rede pode sobrecarregar outros nós que por sua vez acabam falhando e causando o “desligamento” de grande parte da rede.

# Diferenças entre as redes reais e os modelos de redes

---

*No mundo real, cada nó é diferente do outro*

- Cada pessoa de uma rede social é única.
- Cada neurônio do cérebro é diferente do outro.
- Cada espécie de uma cadeia alimentar é diferente das outras espécies.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## *Comportamento coletivo complexo*

- São grandes redes de componentes individuais, que seguem regras simples, sem um controle central ou um líder.
- A ação coletiva de um número muito grande de componentes é que dá origem ao comportamento complexo.
- O comportamento global é difícil de prever, além do que ocorrem mudanças no padrão de comportamento.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## *Sinalização e processamento de informação*

- Os sistemas complexos produzem e usam informações e sinais.
- As informações e sinalizações provêm dos seus componentes internos, mas também do ambiente externo.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## Adaptação

- Os sistemas complexos podem ter ou não capacidade de adaptação.
- Aqueles que apresentam capacidade de adaptação, modificam o seu comportamento através de aprendizagem ou de um processo evolutivo.
- Esta capacidade de adaptação aumenta as chances de sucesso ou sobrevivência.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## *Sistemas complexos sem capacidade de adaptação*

- Comportamento turbulento no escoamento de fluidos, como num rio com corredeiras.
- Furacões e tornados.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## Auto-organização

- Os sistemas complexos podem apresentar comportamento de auto-organização, sem que exista um controle interno ou externo ou um líder.
- São chamados de *sistemas auto-organizados*.
- Exemplo: ciclones, furacões e tornados.

# Propriedades dos Sistemas Complexos

---

## *Propriedades emergentes*

- Ao comportamento macroscópico dos sistemas complexos chama-se de *propriedades emergentes*.
- São exemplos
  - ▶ a auto-organização dos ciclones e furacões.
  - ▶ o comportamento periódico das reações oscilantes.
  - ▶ o comportamento caótico do mercado financeiro.

# Definição de Sistemas Complexos

---

## *Do ponto de vista da adaptação*

- Sistema complexo é aquele formado por uma grande rede de componentes que seguem regras simples, sem um controle central, e que possui um comportamento coletivo complexo baseado num processamento sofisticado da informação e capaz de se adaptar através de aprendizagem ou evolução.

# Definição de Sistemas Complexos

---

*Do ponto de vista do comportamento emergente e da auto-organização*

- Sistema complexo é aquele que exibe comportamento emergente não-trivial e auto-organização.

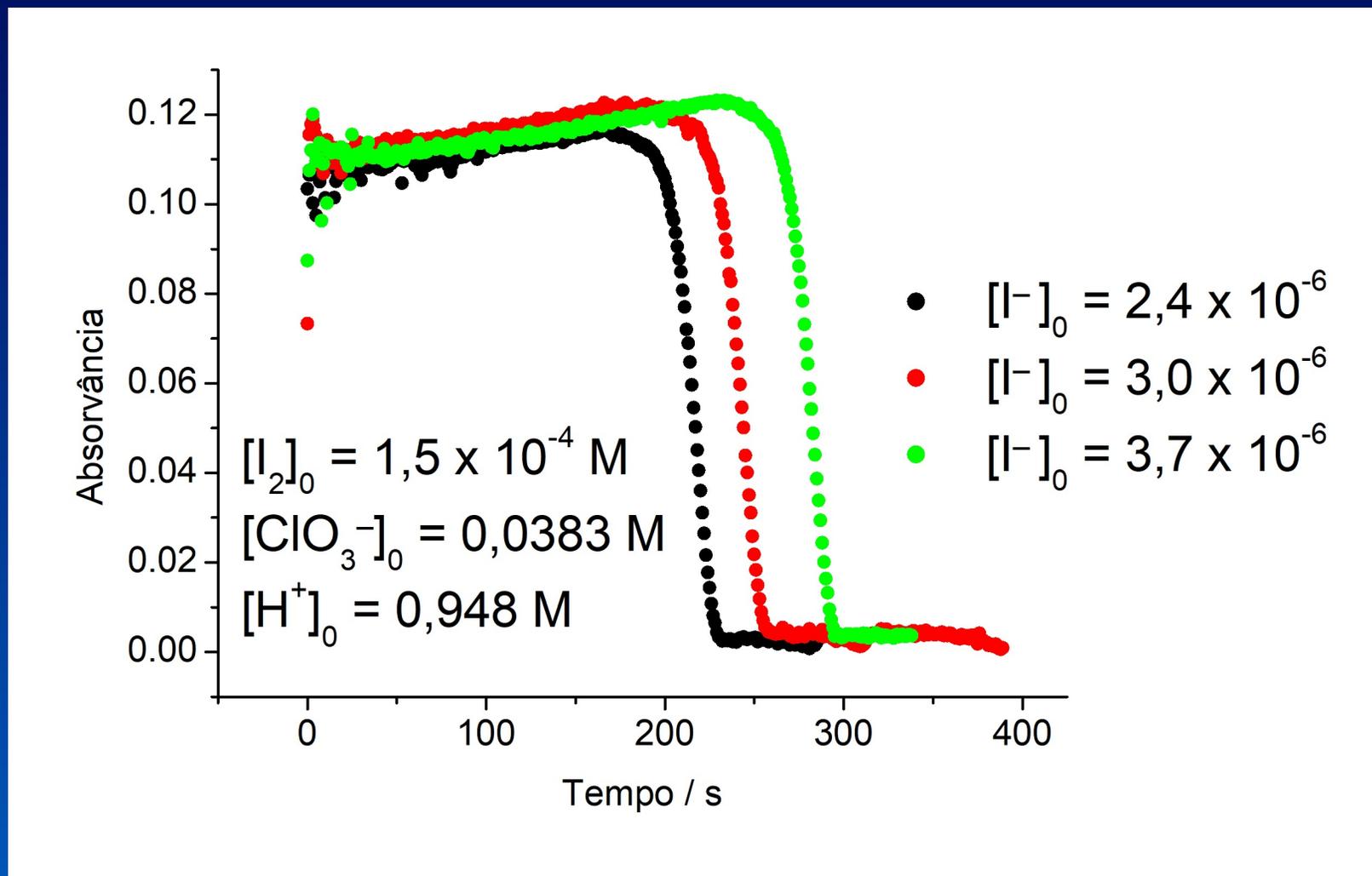
# Sistemas Complexos na Química

---

- Reações relógio
- Reações oscilantes em batelada
- Reações oscilantes em fluxo
- Propagação de ondas químicas
- Estruturas de Turing

# Reação Clorato-Iodo

## Efeito da concentração de iodeto



# Reação Oscilante Briggs-Raucher

---

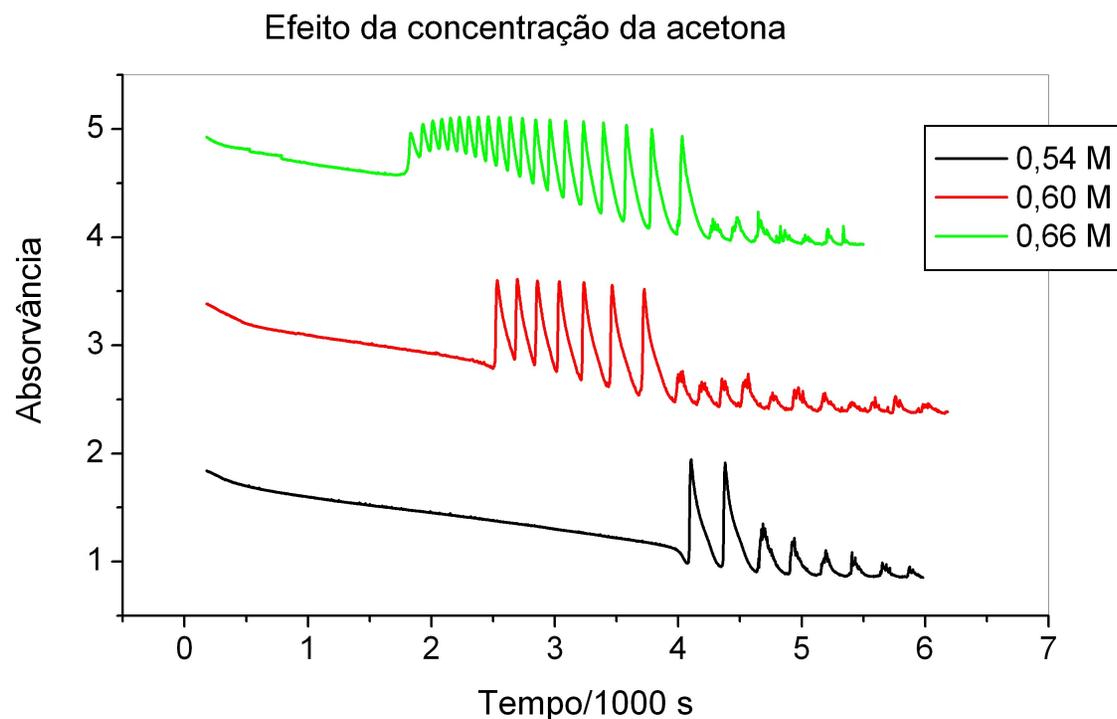
T. S. Briggs, W. C. Rauscher *J. Chem. Educ.* **1973**, *50*, 496.

- Solução A
  - ▶  $\text{NaIO}_3$  0,14 M
- Solução B
  - ▶  $\text{H}_2\text{O}_2$  3,2 M
  - ▶  $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,17 M
- Solução C
  - ▶ Ácido malônico 0,15 M
  - ▶  $\text{MnSO}_4$  0,024 M
  - ▶ Amido solúvel 10 g/L

Tim Nguyen e Adam Bridgman, Universidade de Sidney, Austrália  
<http://www.youtube.com/watch?v=eCc7BhYT2j4&feature=related>

# Reação oscilante bromato-ácido oxálico-acetona-Mn(II)

Em batelada

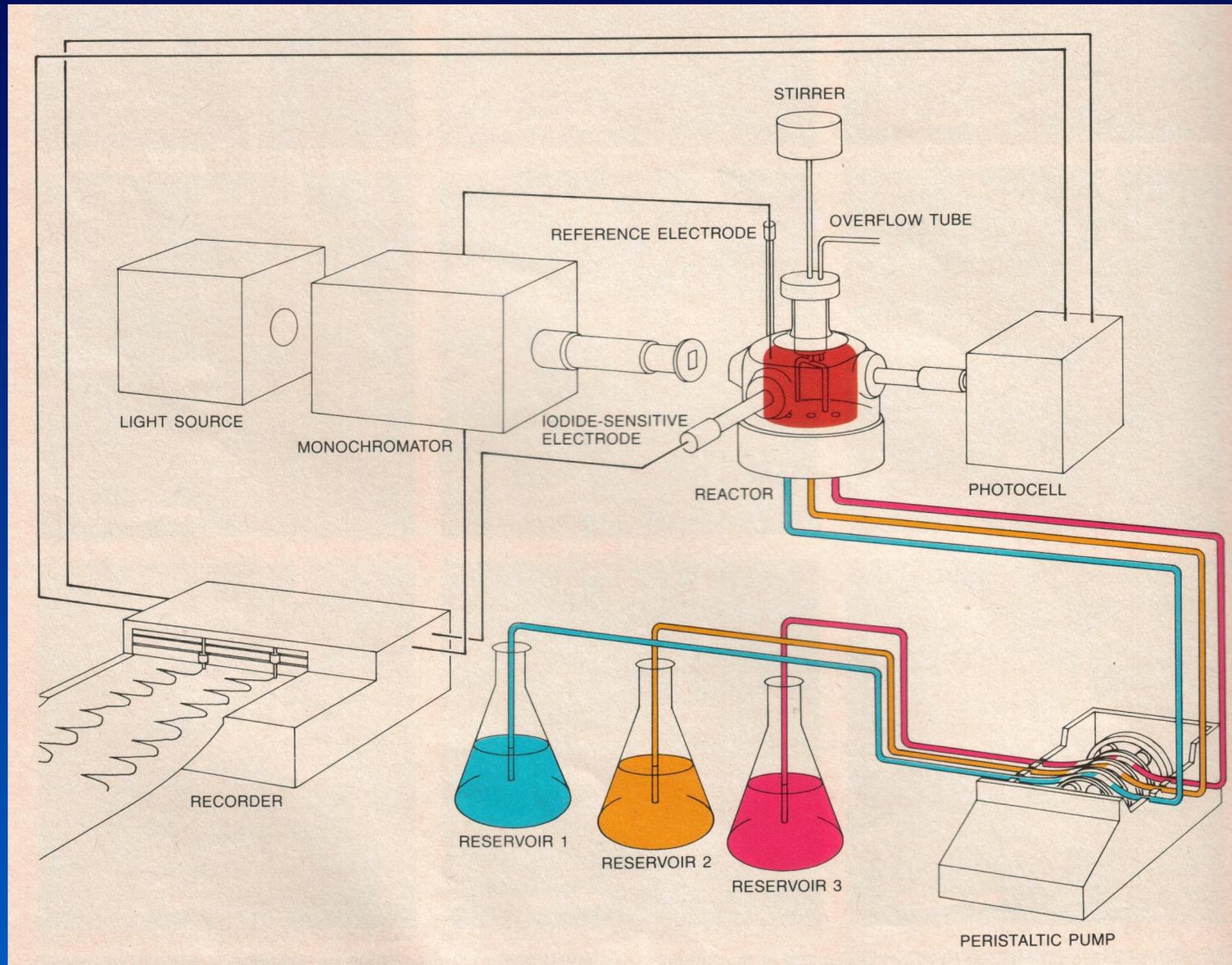


$[\text{BrO}_3^-] = 0,14$ ;  $[\text{ac. oxálico}] = 0,0625 \text{ M}$ ;  $[\text{Mn}^{2+}] = 0,0013 \text{ M}$   
 $[\text{H}_2\text{SO}_4] = 0,625 \text{ M}$ ;  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ ;  $310 \text{ nm}$

# Reações oscilantes em fluxo

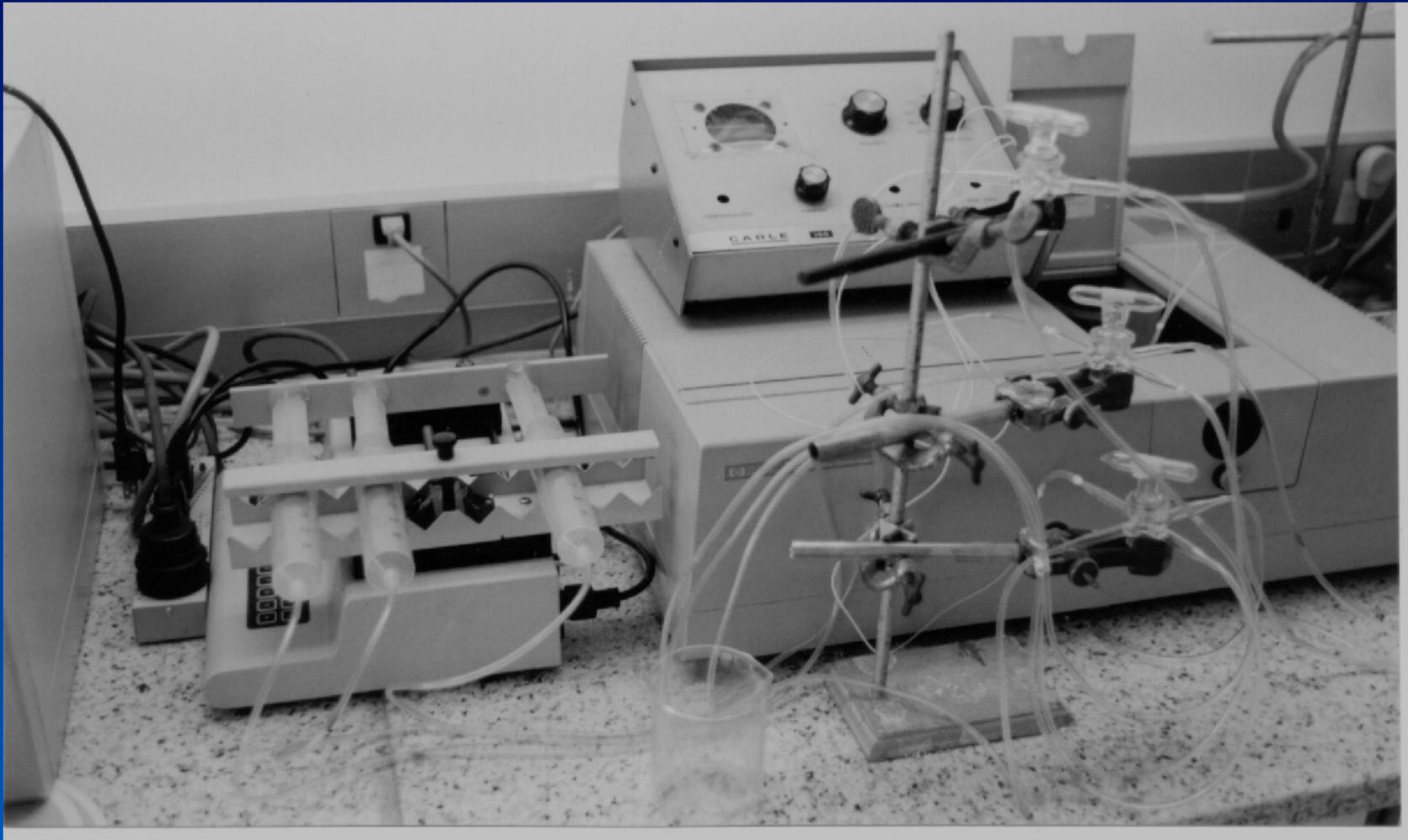
---

# Arranjo experimental para o estudo de reações oscilantes em fluxo



# Arranjo experimental para o estudo de reações oscilantes em fluxo

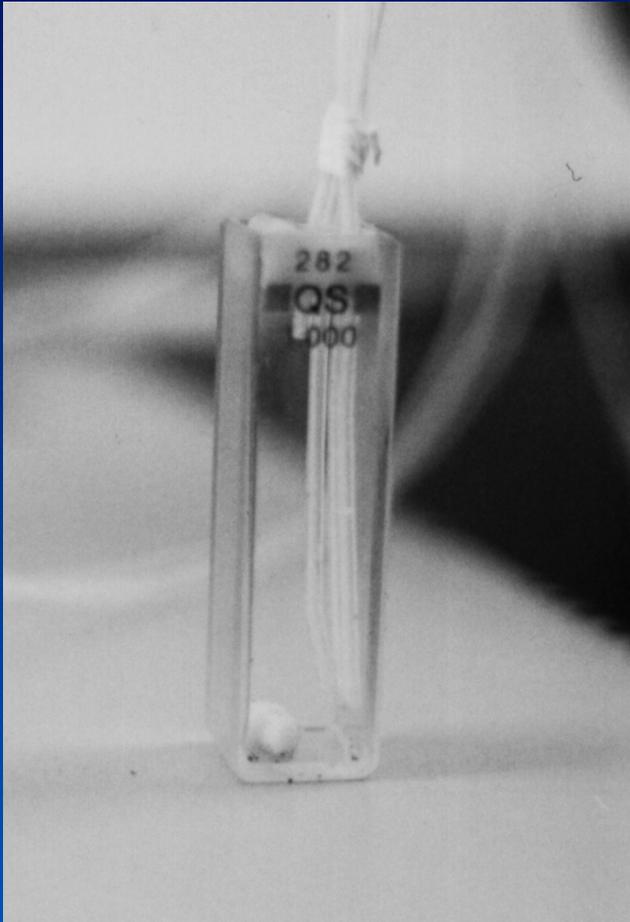
---



# Reator em fluxo (CSTR)

---

Cubeta de Quartzo  
Caminho óptico 10 mm



Observe:

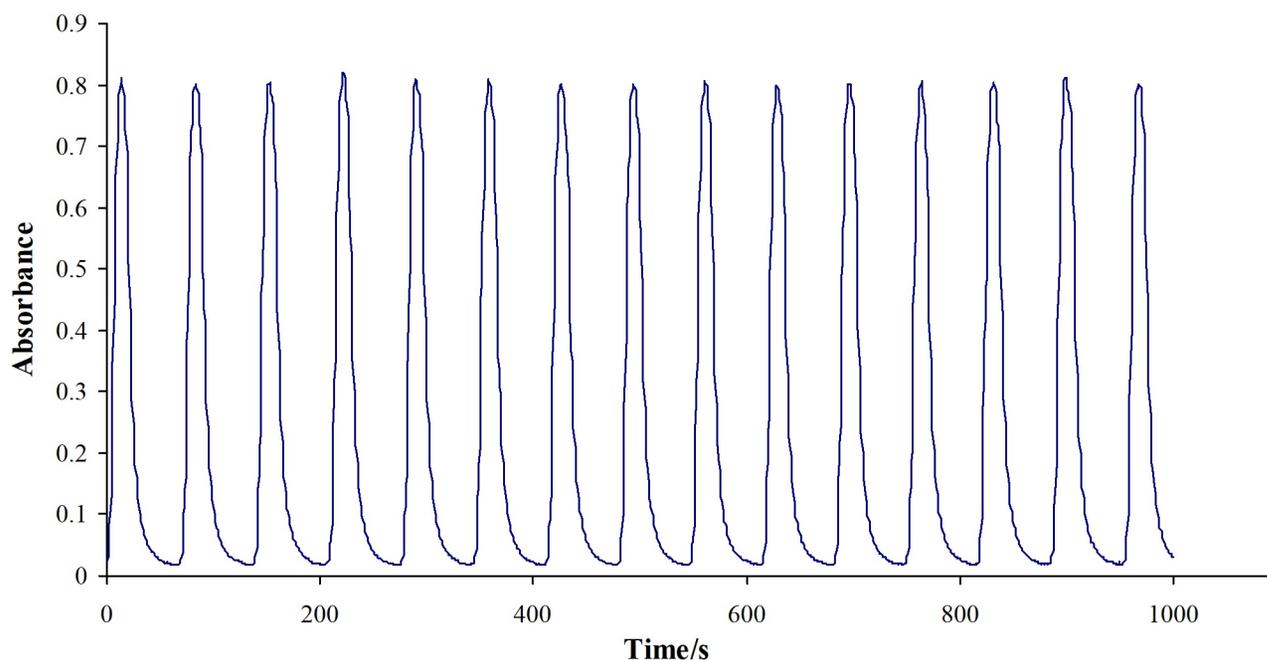
3 tubos de alimentação até o fundo

1 tubo saindo da tona

“peixinho” no fundo

# Reação oscilante bromato-ácido oxálico-acetona-Ce(IV)

Em fluxo

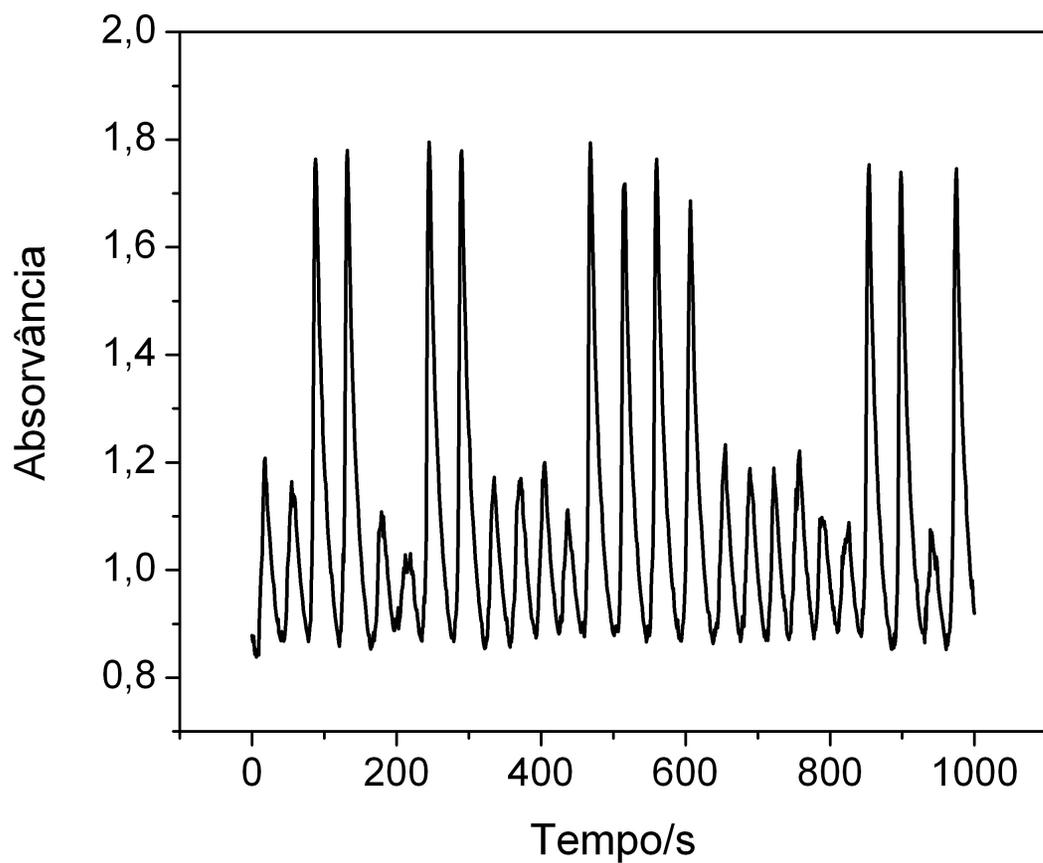


Fast stirring rate in a CSTR.

$[\text{BrO}_3^-]_0 = 0.01 \text{ M}$ ;  $[\text{Ce}^{4+}]_0 = 0.001 \text{ M}$ ;  $[\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4]_0 = 0.025 \text{ M}$ ;  $[\text{CH}_3\text{COCH}_3]_0 = \mathbf{0.112 \text{ M}}$

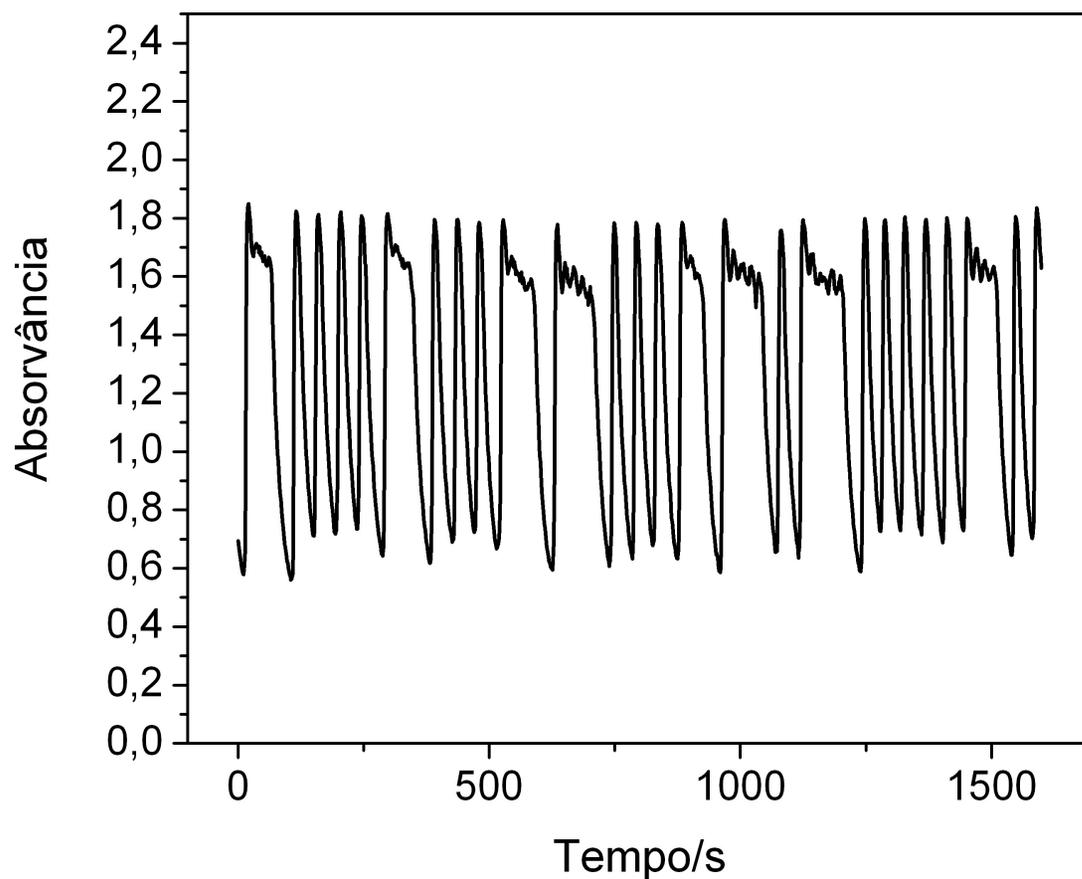
$[\text{H}_2\text{SO}_4]_0 = 1.42 \text{ M}$ ;  $k_0 = 2.61 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ ;  $T = 25.4^\circ\text{C}$ ; 340 nm.

# Reação oscilante bromato- ácido oxálico-acetona-Mn(II)



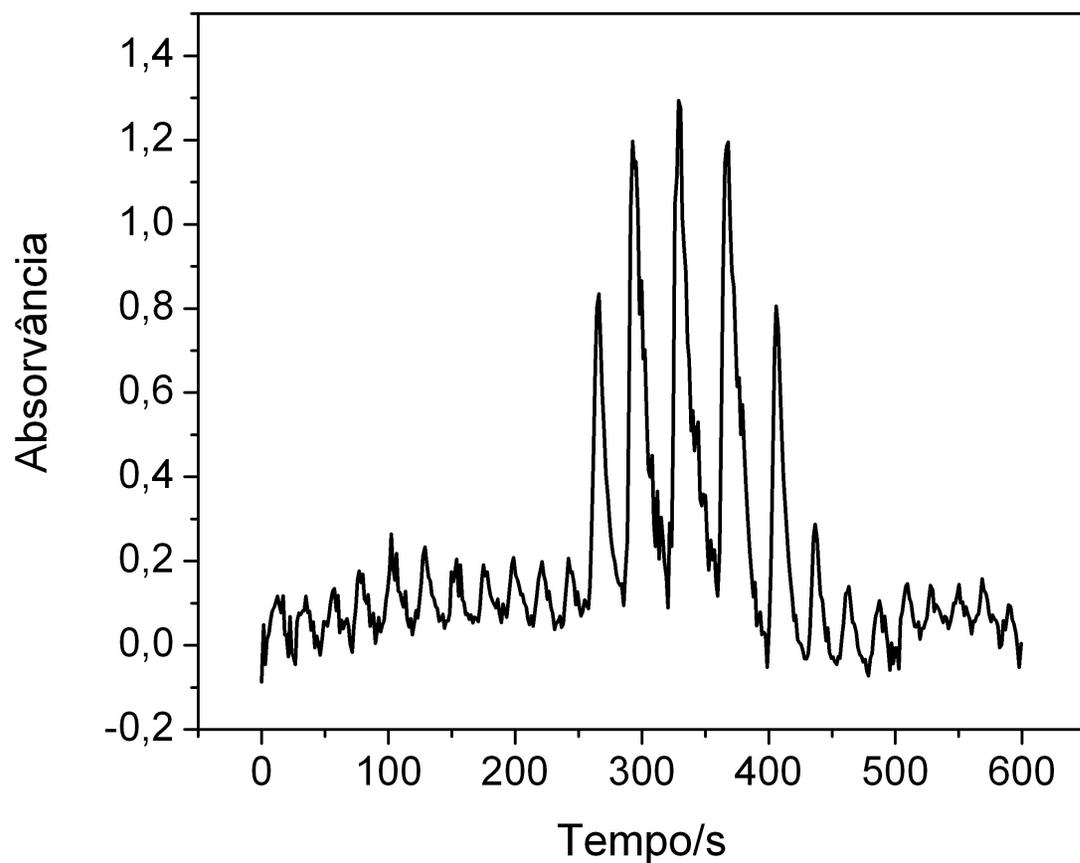
Oscilações  
mistas em  
regime de  
fluxo

# Reação oscilante bromato-ácido oxálico-acetona-Mn(II)



Oscilações mistas em regime de fluxo

# Reação oscilante bromato-ácido oxálico-acetona-Mn(II)



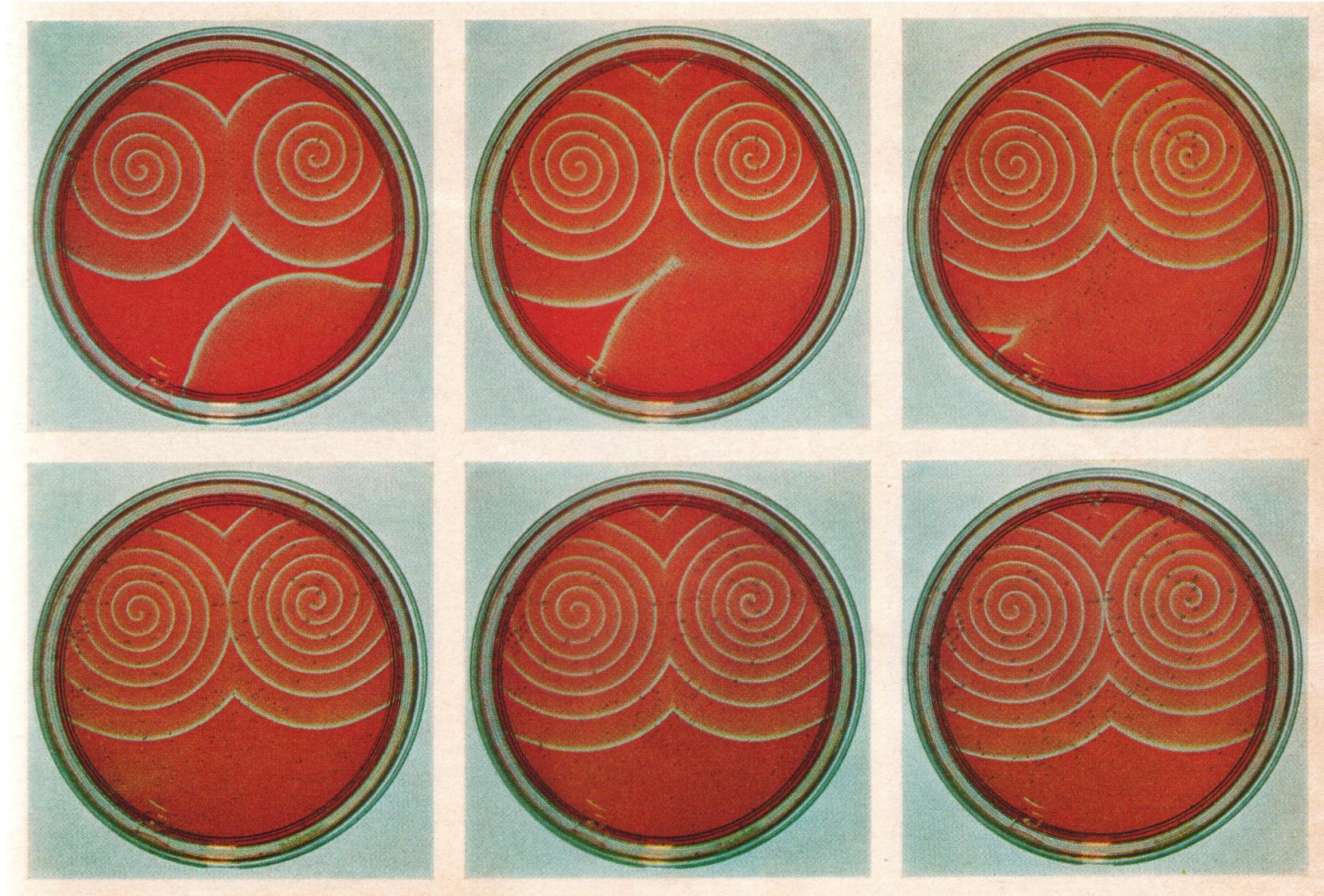
Espasmos  
(*burst*) em  
regime de  
fluxo

# Ondas químicas no sistema Belousov-Zhabotinsky

---



# Ondas químicas no sistema Belousov-Zhabotinsky



# Ondas Químicas na reação Belousov- Zhabotinsky

---

14 mL de A + 7 mL de B + 2 mL de C + 1 mL de D

- Solução A
  - ▶ NaBrO<sub>3</sub> 0,6 M
  - ▶ H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 0,6 M
- Solução B
  - ▶ Ácido malônico 0,48 M
- Solução C
  - ▶ NaBr 1 g/10 mL
- Solução D
  - ▶ Ferroína, [Fe(fen)<sub>3</sub>]SO<sub>4</sub>, 0,025 M

Michael Rogers e Stephen Morris

<http://www.youtube.com/watch?v=3JAqrRnKFHo&feature=fvw>

# Ondas Químicas + convecção na Reação de Briggs-Raucher

---

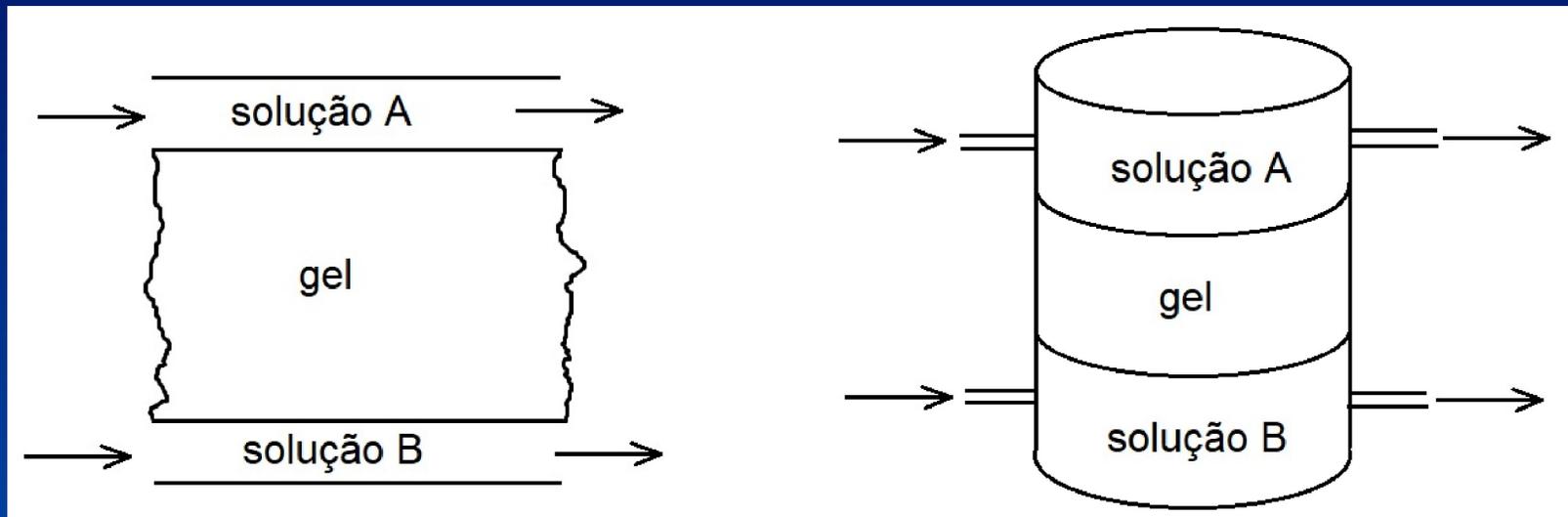
Li, Yuan, Liu, Cheng, Zheng, Epstein, Gao *J. Chem. Educ.* **2021**, *98*, 665.

- $\text{NaIO}_3$  0,150 M (5 mL)
- $\text{H}_2\text{O}_2$  3,579 M (10 mL)
- $\text{H}_2\text{SO}_4$  0,200 M (5 mL)
- Ácido malônico 0,030 M (5 mL)
- $\text{MnSO}_4$  0,005 M (5 mL)
- Amido solúvel 5 g/L (2 mL)

Vídeos: espessura 2 mm até 5 mm

# Estruturas de Turing

São estruturas tridimensionais formadas, em um gel, por processos de difusão.

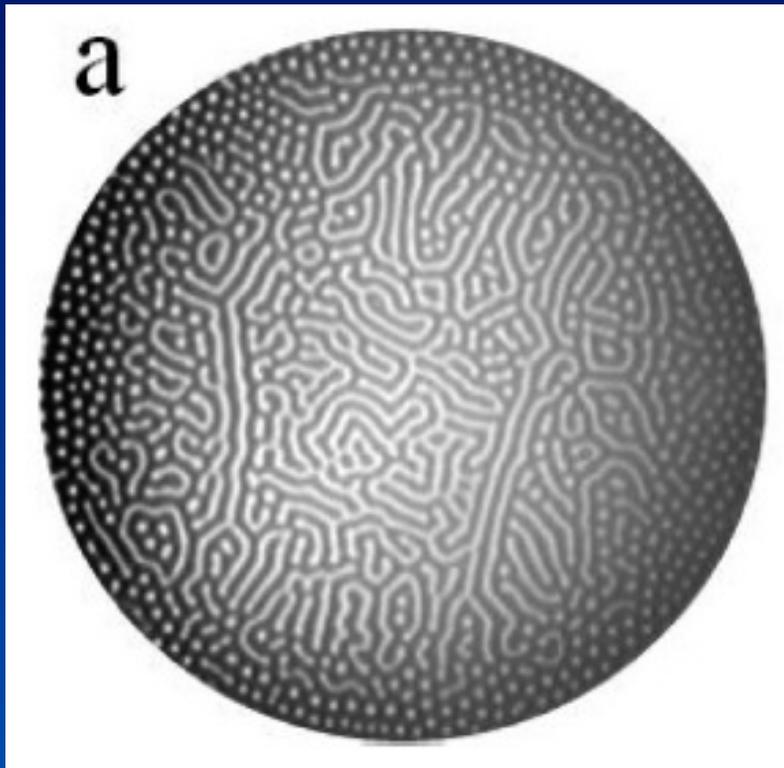


*continuously fed unstirred reactor (CFUR)*

# Estruturas de Turing

---

São estruturas tridimensionais formadas, em um gel, por processos de difusão.



CDIMA (dióxido de cloro-iodo-ácido malônico)

# Estruturas de Turing

---

São estruturas tridimensionais formadas, em um gel, por processos de difusão.

Video Milos Turing 110715\_1341\_8\_C.mpg

**O que é a complexidade?  
Como medir a complexidade de  
um sistema?**

---

# Perguntas mais objetivas:

---

- O nosso cérebro é mais complexo que o de um:
  - ▶ piolho
  - ▶ pombo
  - ▶ jacaré
  - ▶ macaco

# Perguntas mais objetivas:

---

- O cérebro de um homem adulto é mais complexo que o de uma criança de 2 anos?
- A complexidade dos seres vivos aumentou ao longo dos 4 bilhões de anos de evolução?
- A complexidade das sociedades humanas vem aumentando desde o surgimento das primeiras civilizações (egípcia, maia, indu, etc.)

**A resposta parece ser intuitiva!**

---

É possível que tenhamos várias e diferentes  
“ciências da complexidade”

que se baseiam em diferentes noções do que  
é complexidade.

# Talvez tenhamos as complexidades:

---

- Químicas
- Físicas
- Biológicas
- Matemáticas
- Geométricas
- Dinâmicas
- Genéticas
- Sociais
- Redes

Apesar das suas aparentes diferenças específicas, todas acabam reunidas segundo a conceituação globalizante da complexidade, embora não exista uma maneira única e bem estabelecida de se definir “complexidade” !

# A ciência muitas vezes avança inventando novos termos para fenômenos ainda pouco compreendidos

---

- O conceito de força na mecânica newtoniana
- O conceito de gene na genética
- O conceito de matéria escura na cosmologia
- Os conceitos de ego e superego na psicologia

# Pode-se considerar que a complexidade é:

---

- Uma nova ciência
- Uma nova área de pesquisa
- Um ramo da matemática
- Uma superciência que engloba tudo, da qual as ciências tradicionais são subdivisões

**Mesmo sem uma definição clara e objetiva de “complexidade”, podemos tentar medir o grau de complexidade de um sistema.**

---

# Seth Lloyd (2001)

---

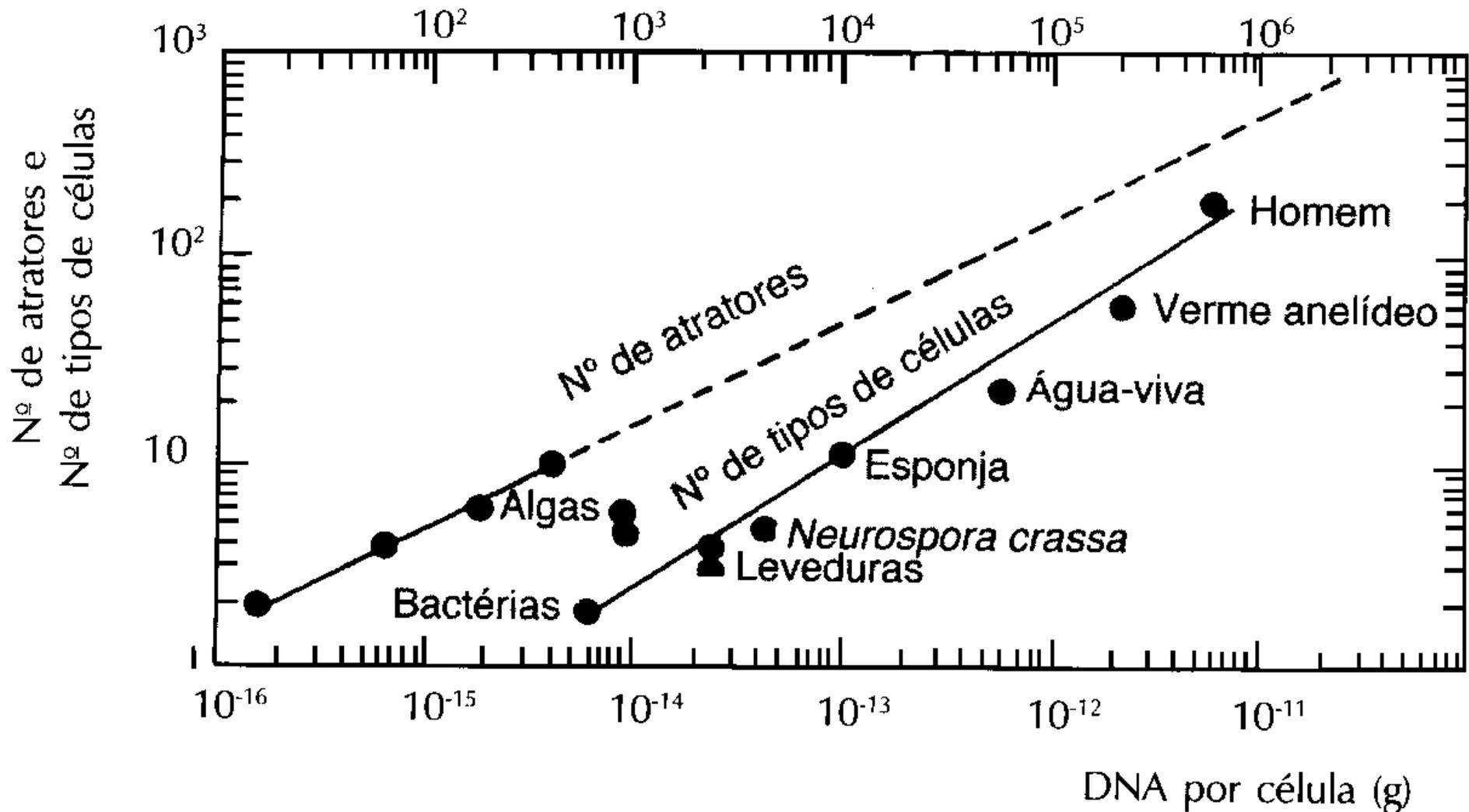
- A complexidade de um sistema é função:
  - ▶ da dificuldade em descrevê-lo
  - ▶ da dificuldade de criá-lo
  - ▶ do seu grau de organização

# Tentativas de se medir a complexidade

---

- Pelo tamanho
- Pela entropia
- Pelo conteúdo de informação algorítmica
- Pela profundidade lógica
- Pela profundidade termodinâmica
- Pela complexidade estatística
- Pela dimensão fractal
- Pelo grau de hierarquia

# Complexidade em função do tamanho



# Complexidade em função do tamanho

---

- Genoma humano:
  - ▶  $3 \times 10^9$  pares de bases, A = adenina, C = citosina, G = guanina, T = timina)
  - ▶  $2,5 \times 10^4$  gens
- Genoma de leveduras:
  - ▶  $1,2 \times 10^7$  pares de bases
  - ▶  $6 \times 10^3$  genes
- Pelos pares de bases o homem é 250 vezes mais complexo que uma levedura.
- Pelo número de genes somos apenas 4,2 vezes mais complexo que uma levedura.

# Complexidade em função da entropia de informação

---

Se baseia na Teoria da Informação de Shannon

- O quanto de informação é transmitida por uma fonte que envia uma mensagem para um receptor?
- O “quanto de informação” se relaciona com a entropia da mensagem.
- Entropia da mensagem é a quantidade de surpresa (entropia de Shannon) que o receptor experimenta ao receber a mensagem.
  - ▶ AAAAAA, tem entropia zero.
  - ▶ ATCTCTAAG, pode ser simplesmente uma sequência aleatória, com entropia muito alta, mas sem significado prático (!?)

# Complexidade como profundidade lógica

---

Conceito introduzido na década de 1980 por Charles Bennett

- É uma medida da dificuldade de se construir um sistema.
- Para construir as sequências de DNA abaixo:
  - ▶ AAAAAA... é fácil
  - ▶ Uma sequência aleatória das bases A, C, G, T é mais difícil.
  - ▶ Uma sequência que resulte num organismo viável, é mais difícil.

# Complexidade como profundidade termodinâmica

---

Conceito introduzido na década de 1980 por Lloyd e Pagels

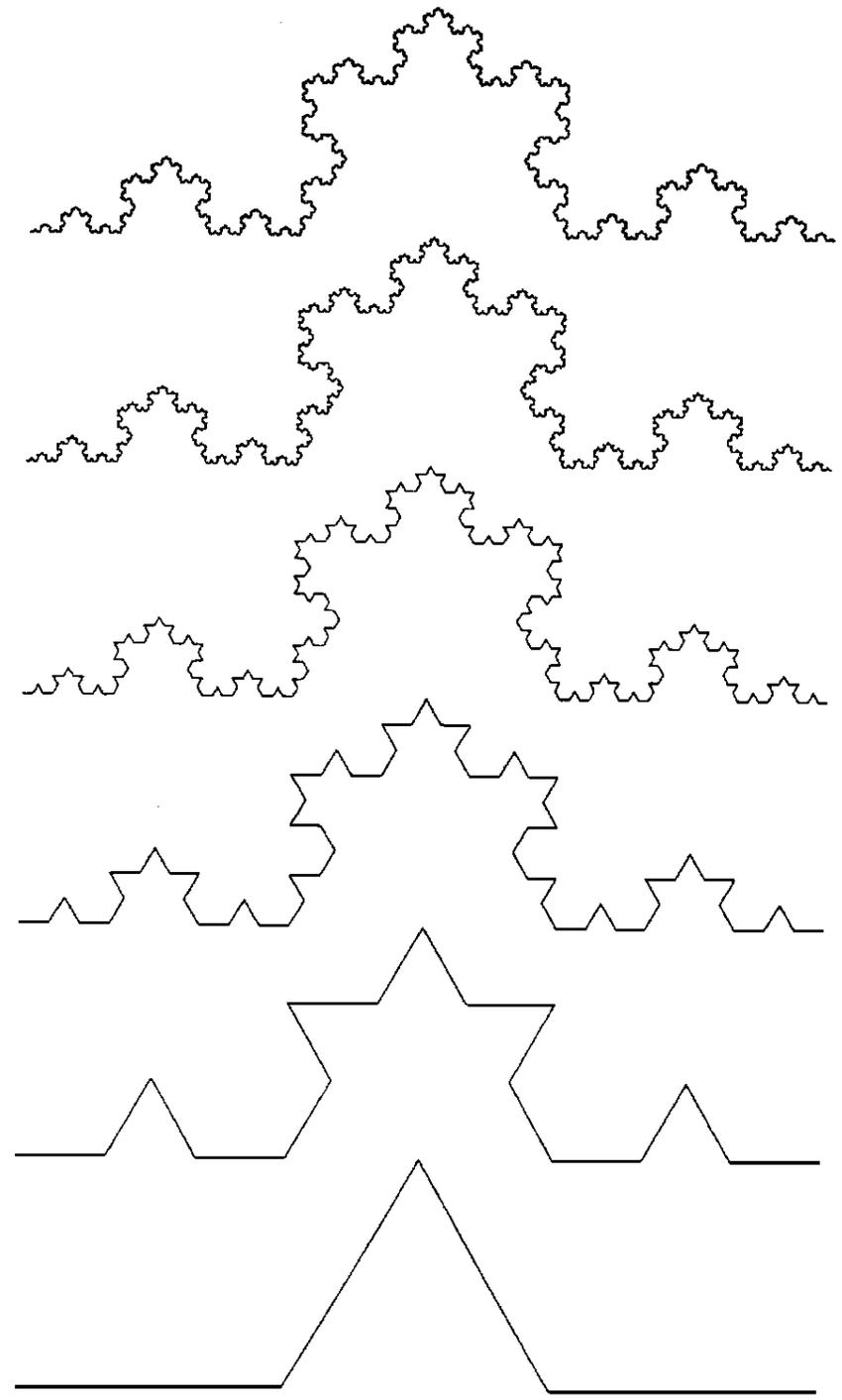
- É semelhante à profundidade lógica de Bennett.
- Para um ser humano, é o número de eventos genéticos evolucionários que ocorreram a partir do primeiro ser vivo.
  - ▶ Como os seres humanos surgiram bilhões de anos depois das amebas, nós temos uma profundidade termodinâmica muito maior.
- Entretanto, é difícil listar todos os eventos que levaram a um ser em particular.

# A dimensão fractal como medida da complexidade

---

Se aplica a estruturas estáticas

- Um “fractal” é uma estrutura com “rugosidades” que apresentam “auto-similaridade” em diferentes escalas e dimensão fracionária.



# Conjunto de Koch

---

# Ilha Esmeralda, Irlanda

---



Jeff Schmaltz, MODIS Rapid Response Team, NASA/GSFC

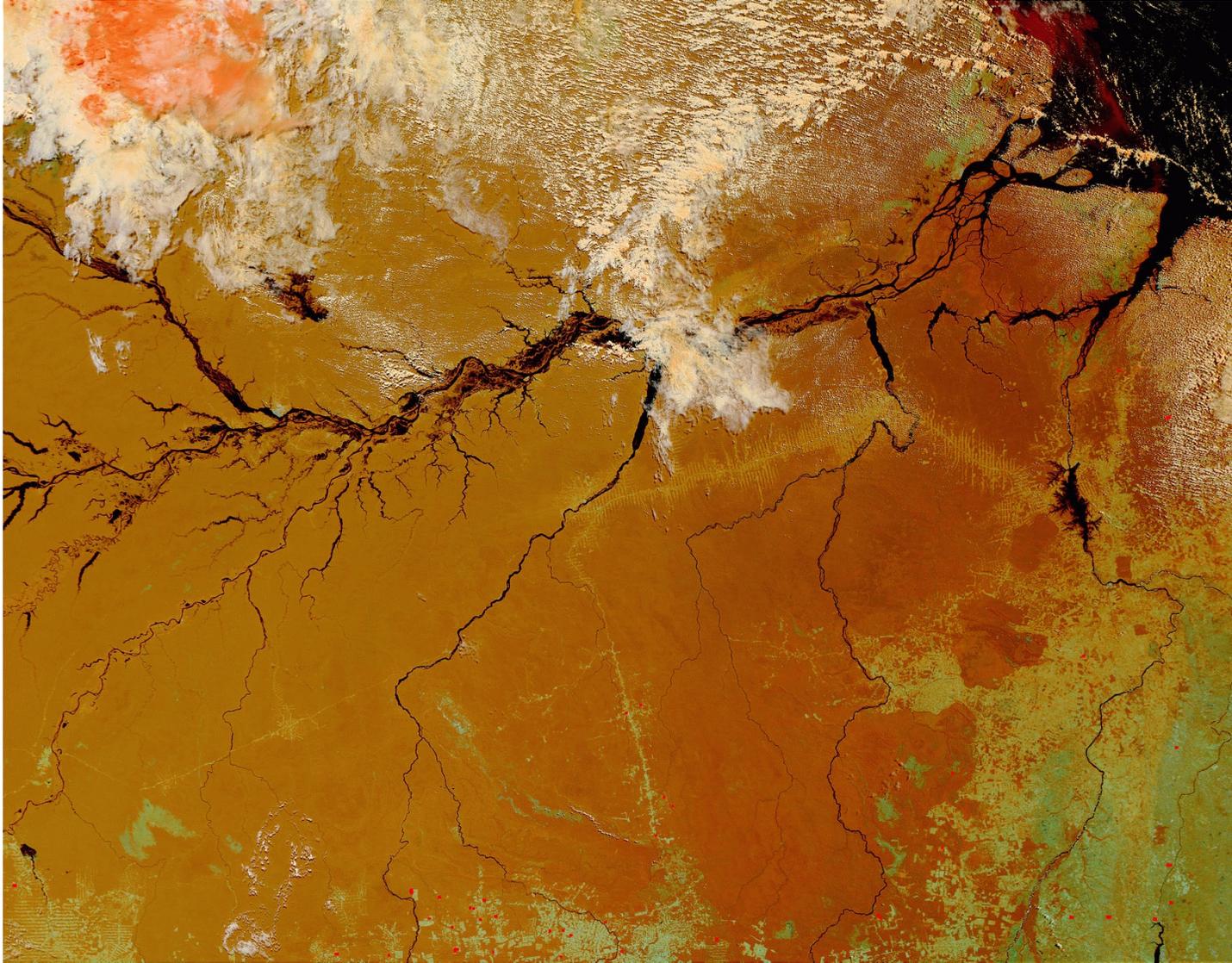
# Península Iveragh, Irlanda

---



# Rio Amazonas

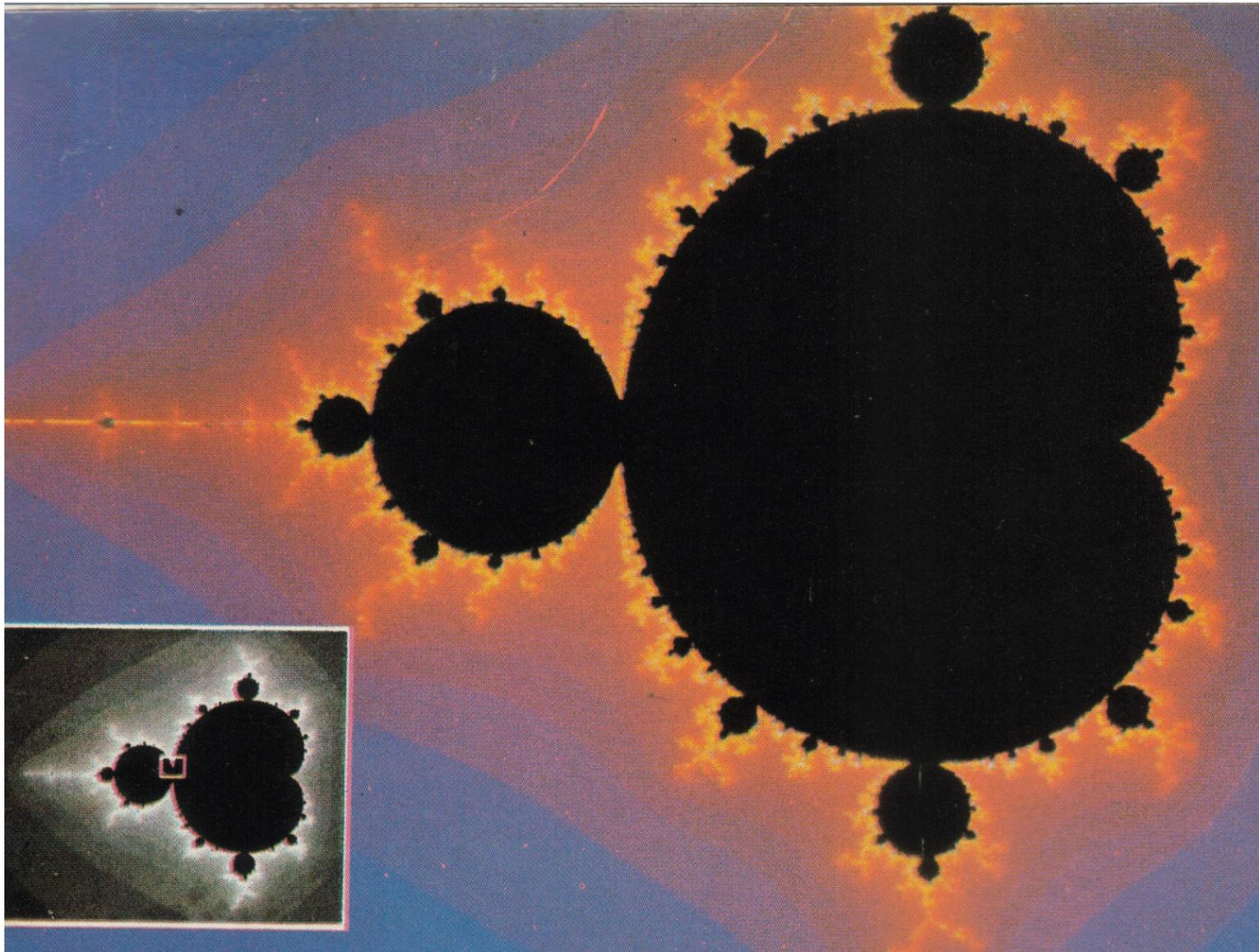
---



Jeff Schmaltz, MODIS Rapid Response Team, NASA/GSFC

# Conjunto de Mandelbrot

---



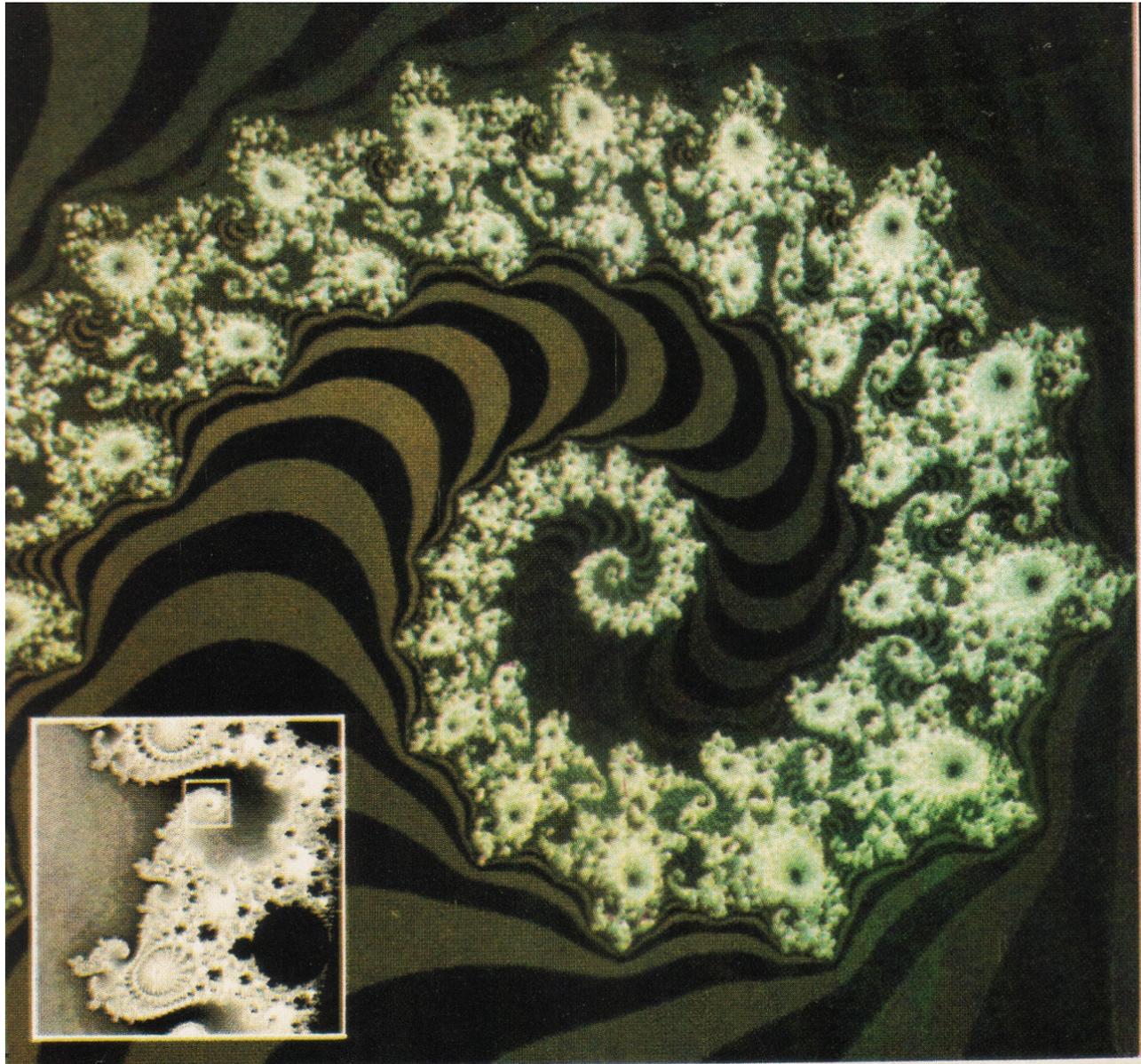
# Conjunto de Mandelbrot

---



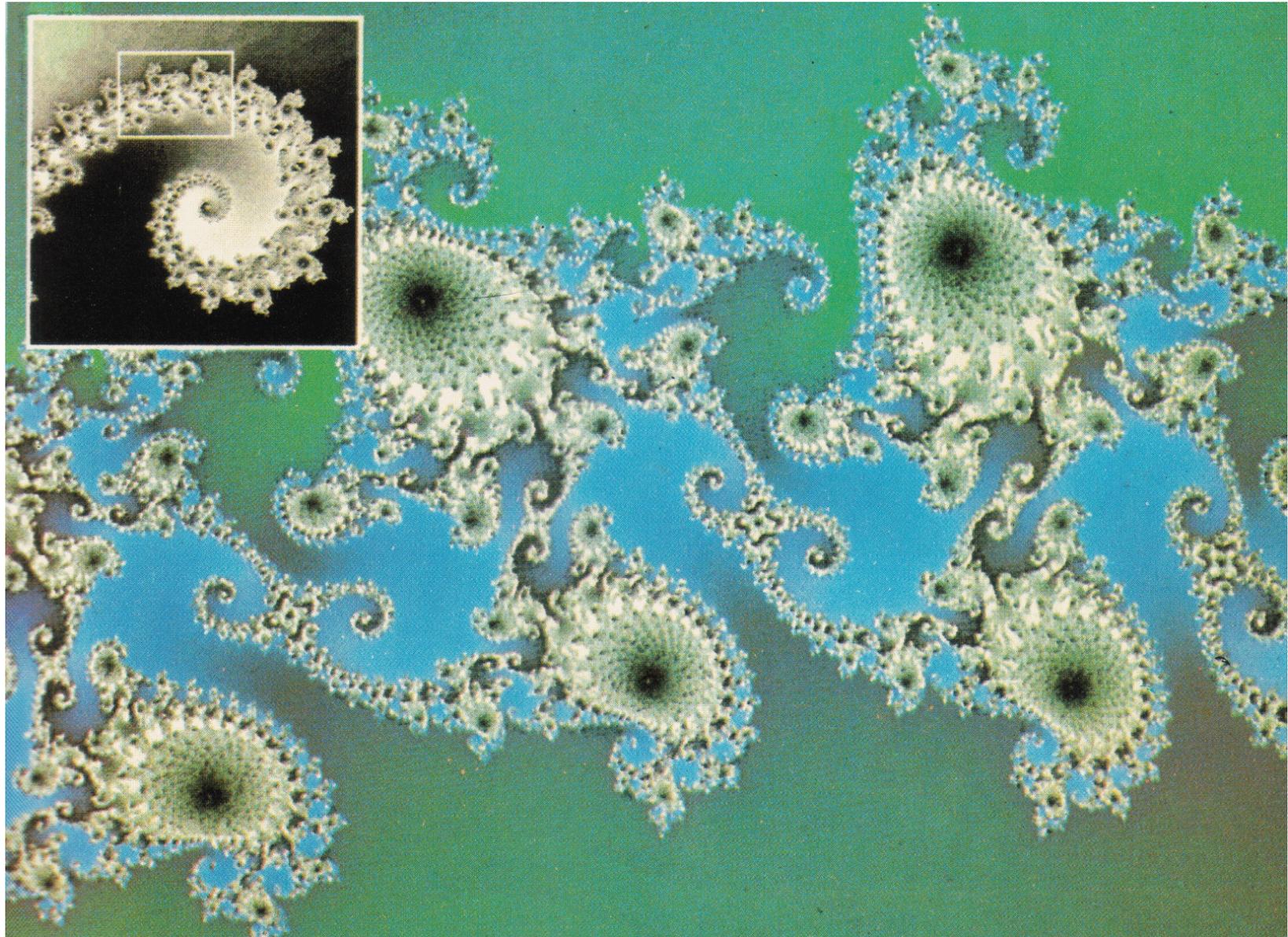
# Conjunto de Mandelbrot

---



# Conjunto de Mandelbrot

---



# Complexidade como grau de hierarquia

---

Se baseia na Teoria da Hierarquia de Herbert Simon (1962)

- Um sistema complexo é composto de subsistemas, que por sua vez possuem seus próprios subsistemas, e assim por diante.
- De uma certa forma se assemelha ao conceito de auto-similaridade dos fractais.
- Dentro de cada subsistema, o número de interações entre as suas partes internas é muito maior que entre o subsistema e os outros subsistemas de mesmo nível hierárquico.

# Complexidade como grau de hierarquia

---

Se baseia na Teoria da Hierarquia de Herbert Simon (1962)

- Esta visão permite organizar os sistemas biológicos em graus crescentes de hierarquia (complexidade).
  1. Células procarióticas (sem núcleo)
  2. Células eucariontes (com núcleo) - entende-se que são estruturas que englobaram as estruturas das células procarióticas em uma região determinada, o núcleo.
  3. Organismos multicelulares.
  4. Colônias de insetos.

# Sistemas químicos complexos

---

- São sistemas **dinâmicos** - estamos no âmbito da **cinética** e não do equilíbrio
- O comportamento cinético é dominado pela existência de catálise, em especial da **autocatálise**
- São sistemas que apresentam efeito de memória (**histerese**)

# Cinética Química

---

- Cinética de primeira ordem
- Cinética de segunda ordem
- Autocatálise - processos em batelada
- Autocatálise - processos em fluxo

No editor de texto