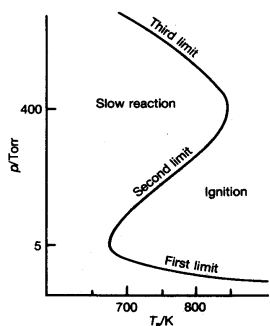


## Caos, complexidade

[A Química afastada do equilíbrio: termodinâmica, ordem e caos in Nina Hall, Neoquímica, Bookman, 2004, cap. 16](#)  
[David Ruelle, Acaso e Caos, Edunesp 1993](#)  
[James Gleick, Caos, Campus 1990](#)  
<http://classes.yale.edu/fractals/>

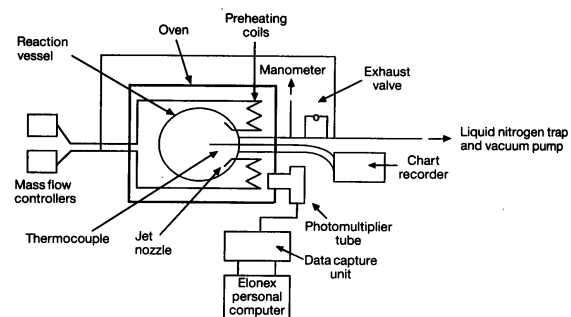
## Relação com a Cinética Química

- Reações oscilantes <http://www.youtube.com/watch?v=f30kdQsluwU&NR=1>
- <http://www.youtube.com/watch?v=QdscFBvdTLg&feature=related>
- Instabilidades, mudanças inesperadas de comportamento
  - Em processos químicos
  - Na armazenagem de produtos químicos
- Formação de estruturas durante as transformações espontâneas de um sistema
  - Evolução das espécies em um universo cuja entropia só aumenta?

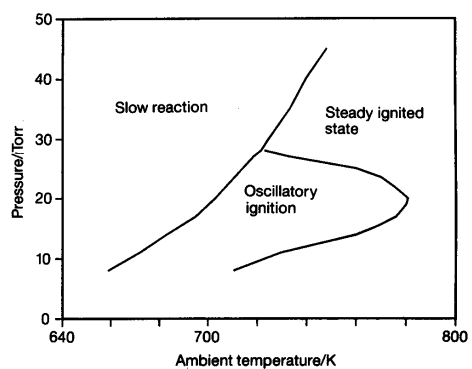


$\text{H}_2 + \text{O}_2$   
 uma reação simples, pode provocar explosões. Essencial em uma “economia do hidrogênio”.

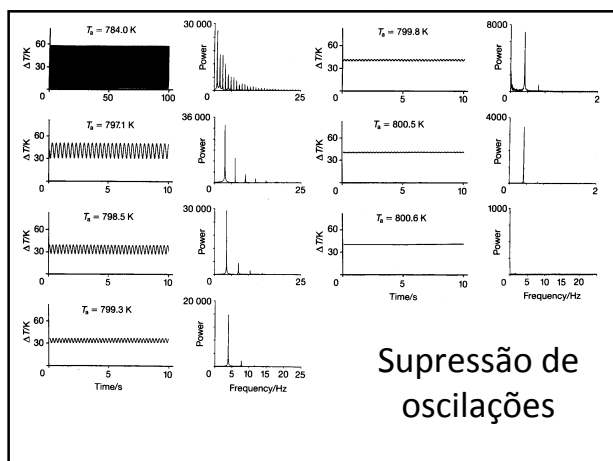
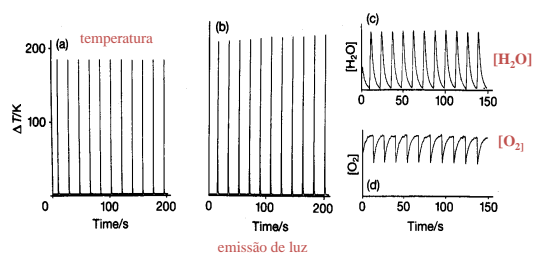
## Um reator apropriado: contínuo, com mistura eficiente e controle de temperatura



## A região do segundo limite, ampliada

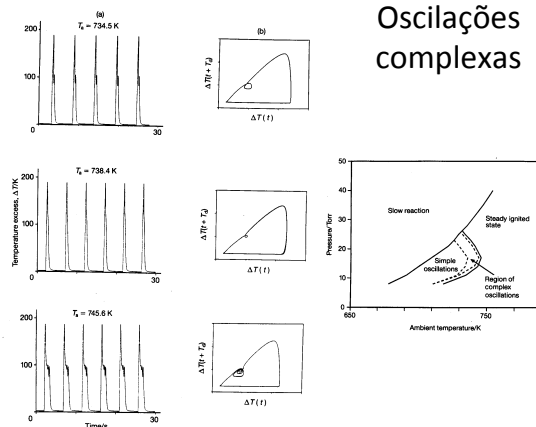


## Séries temporais: concentrações, emissão de luz, calor



Supressão de  
oscilações

## Oscilações complexas

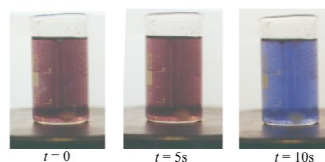


Você também pode observar isto...

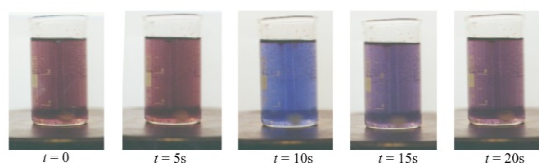
- ...na queima de madeira ou carvão, em uma churrasqueira, como pontos de chama intermitente



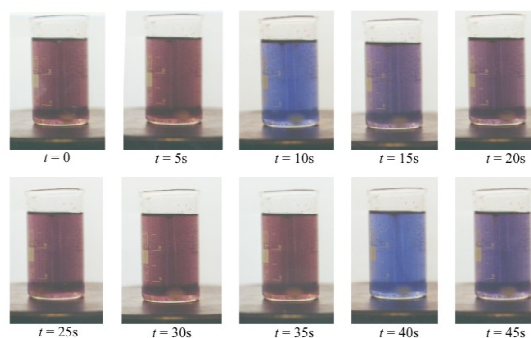
## Reação de Belousov-Zhabotinskii



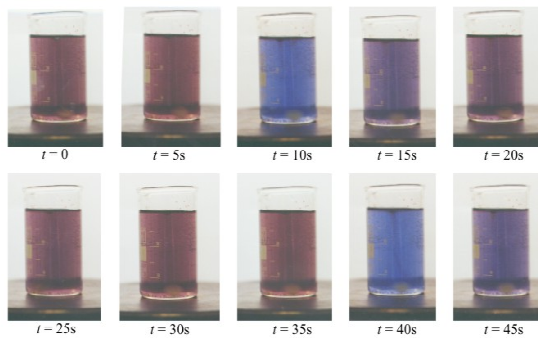
## Reação de Belousov-Zhabotinskii



## Reação oscilante de Belousov-Zhabotinskii



Reação oscilante: Belousov-Zhabotinskii  
bromato de potássio, sulfato de cério (IV), ácido propanodióico e ácido cítrico em solução diluída de ácido sulfúrico; a relação entre as concentrações de íons  $\text{Ce(IV)}$  e  $\text{Ce(III)}$  oscila. Indicador: ferroína.



## Paradigmas da Ciência

- Reduccionismo
  - Hierarquia positivista: Matemática, Física, Química, Biologia, Psicologia, Sociologia.
- Critérios de validação
  - Reprodutibilidade
  - Compatibilidade com primeiros princípios
  - Modelos com capacidade de predição
    - Hipóteses verificáveis

## Alguns velhos problemas

- Quanto mede a fronteira entre Brasil e Uruguai?
- Vai chover amanhã? E daqui a uma semana?
- Qual é o maior tamanho possível da população humana?
- Dejetos humanos são absorvidos pelo meio ambiente, como fertilizantes, há muito milhares de anos. Quando eles se transformam em poluição?
- Qual será a importância das epidemias de gripe, em 2010?
- Quando eu terei um câncer, de que tipo?

## Novos caminhos para obter respostas

- Complexidade
  - Muitas situações concretas têm características de imprevisibilidade, embora todos os fenômenos fundamentais sejam bem conhecidos.
  - Muitas moléculas juntas apresentam características que não são predizíveis a partir das propriedades das moléculas isoladas.
  - Fenômenos muito diferentes seguem padrões semelhantes (universalidade).

## A equação logística

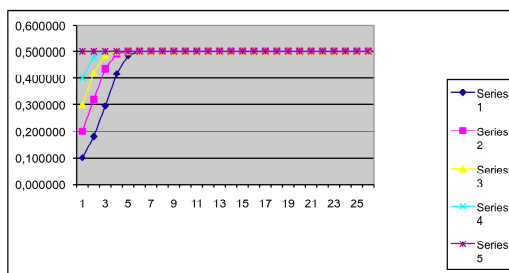
- $y = a * x * (1 - x)$ 
  - $a \geq 0$
  - $x$  varia entre 0 e 1.
- A equação pode ser aplicada iterativamente. Por exemplo, começando com  $a=2$  e  $x=0,1$

iteração	x	y
1 $x_1, y_1$	0,1	0,18000
2 $x_2, y_2$	0,18000	0,295200
3 $x_3, y_3$	0,295200	0,416114
4 $x_4, y_4$	0,416114	0,485926

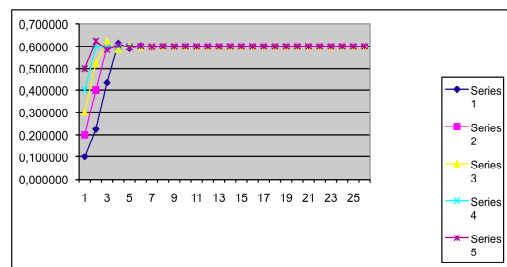
## Dez primeiras iterações: $a=2$

	0	0,100000	0,200000	0,300000	0,400000	0,500000
0	0	0,180000	0,320000	0,420000	0,480000	0,500000
0	0	0,295200	0,435200	0,487200	0,499200	0,500000
0	0	0,416114	0,491602	0,499672	0,499999	0,500000
0	0	0,485926	0,499859	0,500000	0,500000	0,500000
0	0	0,499604	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000
0	0	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000
0	0	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000
0	0	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000
0	0	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000	0,500000

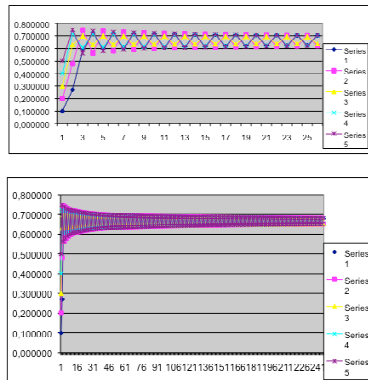
## Equação logística, $a=2$



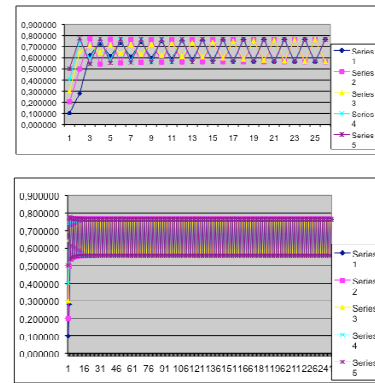
## Equação logística, $a=2,5$



### Equação logística, $a=3$



### Equação logística, $a=3,1$



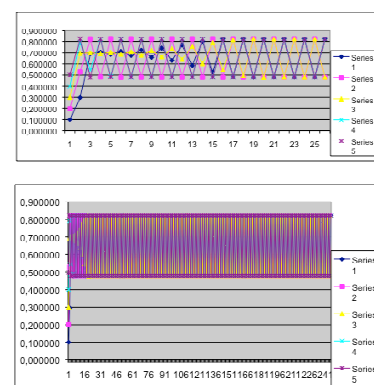
### Iterações 245 a 250, $a=3$ e $a=3,1$

0,651558	0,681265	0,680280	0,651698	0,651424	0,651558
0,681090	0,651429	0,652497	0,680963	0,681212	0,681090
0,651619	0,681208	0,680234	0,651757	0,651487	0,651619
0,681035	0,651491	0,652547	0,680909	0,681155	0,681035
0,651679	0,681151	0,680188	0,651816	0,651548	0,651679

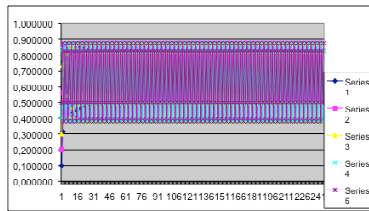
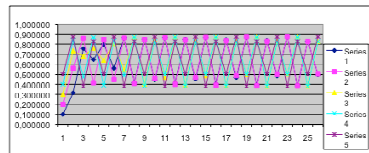
  

0,558014	0,764567	0,764567	0,558014	0,558014	0,558014
0,764567	0,558014	0,558014	0,764567	0,764567	0,764567
0,558014	0,764567	0,764567	0,558014	0,558014	0,558014
0,764567	0,558014	0,558014	0,764567	0,764567	0,764567
0,558014	0,764567	0,764567	0,558014	0,558014	0,558014

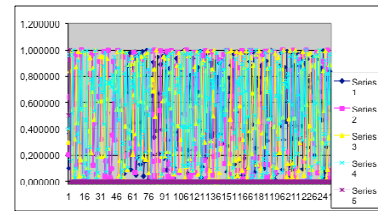
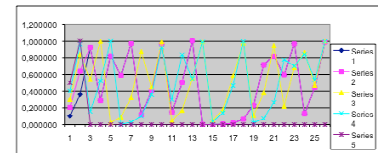
### $a=3,3$



a= 3,5



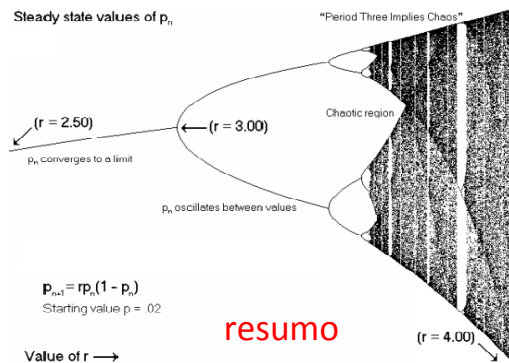
a= 4,0



$$p_n = r * p_{n-1} * (1 - p_{n-1})$$

Steady state values of  $p_n$

"Period Three Implies Chaos"



$$p_{n+1} = r p_n (1 - p_n)$$

Starting value  $p = .02$

resumo

## Por que a equação logística?

- Porque é muito simples e evidencia muito bem comportamentos complexos.
- Qualquer equação do segundo grau e muitas outras equações não-lineares apresentam o mesmo tipo de comportamento.
- Por isso, distinguimos entre comportamento "linear" e "não-linear".
- Estamos acostumados a raciocinar "linearmente". Podemos adquirir novos padrões de raciocínio.

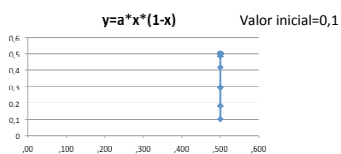
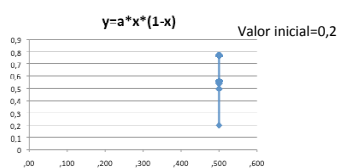
## Atratores

- Representam pares de valores possíveis para um sistema.
- Podem se referir a valores em um dado momento, em função de valores em uma leitura anterior, ou cinco leituras antes, etc.
- Mostram qual é a faixa possível que valores de uma série temporal podem mostrar, conhecido um valor anterior.
- "Vai chover amanhã?"
- "O reator está a 70 graus C; há dois minutos, estava a 60 graus C. Qual será a temperatura daqui a mais dois minutos?"

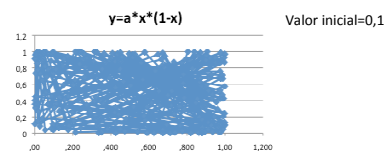
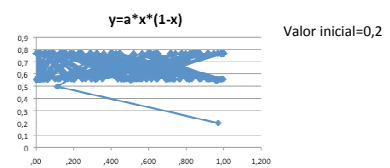
## Obtendo atratores

0,100000			0,200000	
0,360000			0,64	
0,921600			0,9216	
0,289014			0,289014	
0,821939			0,821939	
0,585421			0,585421	
0,970813	0,100000	0,585421	0,970813	0,2
0,113339	0,360000	0,970813	0,113339	0,496
0,401974	0,921600	0,113339	0,401974	0,77495
0,961583	0,289014	0,401974	0,961583	0,540647
0,147837	0,821939	0,961583	0,147837	0,769878
0,503924	0,585421	0,147837	0,503924	0,549214
0,999938	0,970813	0,503924	0,999938	0,767492
0,000246	0,113339	0,999938	0,000246	0,553189
0,000985	0,401974	0,000246	0,000985	0,76623
0,003936	0,961583	0,000985	0,003936	0,555277

$a=2$



$a=4$





## Algumas lições

- Séries temporais (tal como a temperatura de uma reação química, ou concentrações de reagentes e produtos) podem mostrar comportamentos muito diferentes, desde a estabilidade até um comportamento caótico, imprevisível.
- Observa-se bi-estabilidade e comportamentos oscilatórios mais complexos.
  - Comportamentos intermediários entre a estabilidade e o caos.

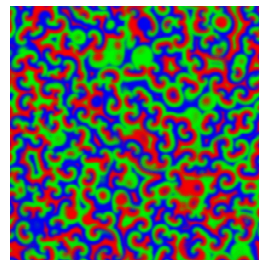
## Séries temporais são fontes importantes de informação

- Permitem modelar um fenômeno, mesmo que os seus detalhes mecanísticos sejam desconhecidos.
- Os métodos de análise são aplicáveis a muitos problemas completamente independentes:
  - Meteorologia e previsão do tempo
  - Reações químicas
  - Variações de preços de mercadorias e de títulos em bolsa
  - Populações de predadores e presas
  - Epidemias
  - Episódios de poluição ("maré vermelha")
  - Loterias

## No espaço e no tempo

- |  |                         |
|--|-------------------------|
| • Variação no espaço   | • Variação no tempo     |
| • Linha suave, reta, curva euclidiana  | • Estabilidade          |
| • Variação periódica   | • Bi-estabilidade...    |
| • Rugosidade <ul style="list-style-type: none"><li>– Superfície de carvão ativo, catalisadores e absorventes</li><li>– Fronteiras entre países</li></ul> | • Comportamento caótico |

## Simulação da reação em uma placa de Petri



[http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/d/d9/The\\_Belousov-Zhabotinsky\\_Reaction.gif](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/d/d9/The_Belousov-Zhabotinsky_Reaction.gif)