

Caos, complexidade

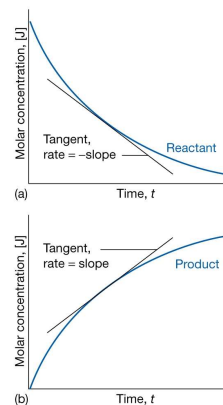
[A Química afastada do equilíbrio: termodinâmica, ordem e caos in Nina Hall, Neoquímica, Bookman, 2004, cap. 16](#)
[David Ruelle, Acaso e Caos, Edunesp 1993](#)
[James Gleick, Caos, Campus 1990](#)
<http://classes.yale.edu/fractals/>

Velocidades de reação:

Consumo de reagente:
 $-d[R]/dt$

Formação de produto:
 $d[P]/dt$

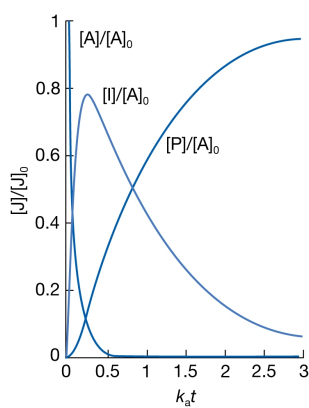
Velocidade da reação= $d[\xi]/dt$



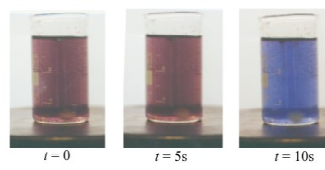
Reações consecutivas



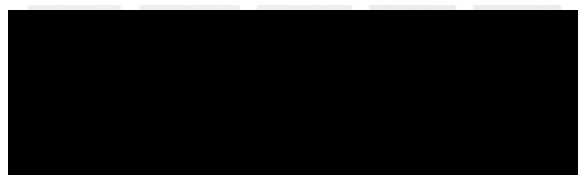
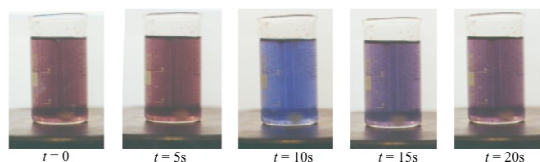
Aplicação: determinação de tempo ótimo de reação.



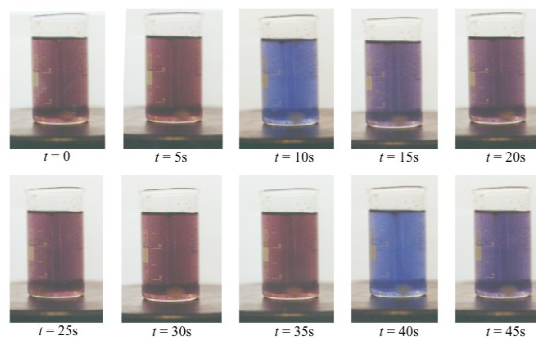
Reação de Belousov-Zhabotinskii



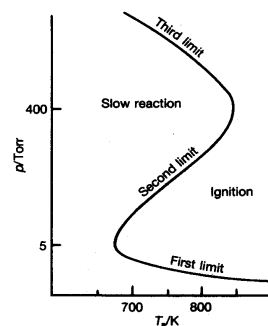
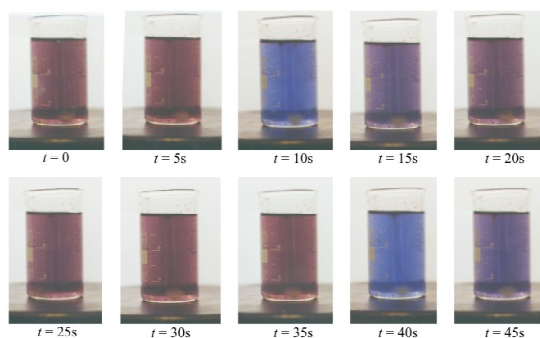
Reação de Belousov-Zhabotinskii



Reação oscilante de Belousov-Zhabotinskii

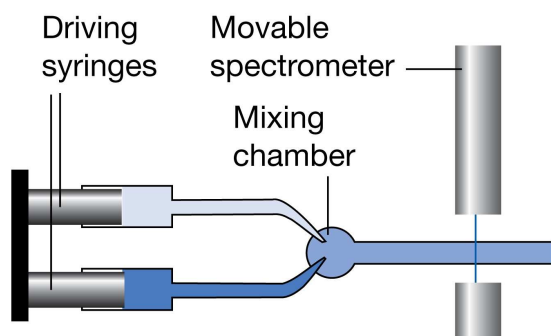


Reação oscilante: Belousov-Zhabotinskii
bromato de potássio, sulfato de cério (IV),
ácido propanodióico e ácido cítrico em solução diluída de ácido sulfúrico: a relação
entre as concentrações de íons Ce(IV) e Ce(III) oscila. Indicador: ferroína.

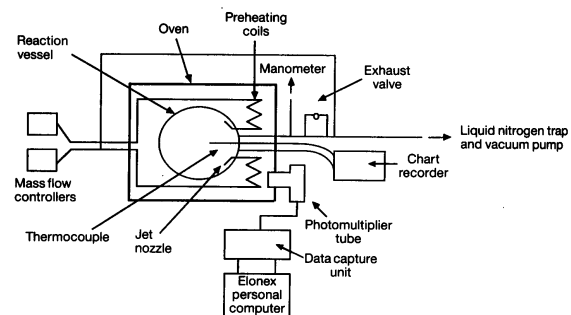


$\text{H}_2 + \text{O}_2$
uma reação
simples, pode
provocar
explosões.
Essencial em
uma "economia
do hidrogênio".

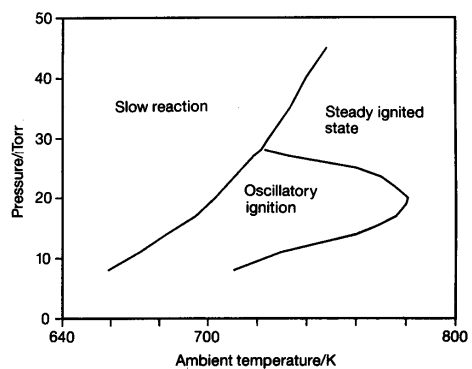
Escoamento



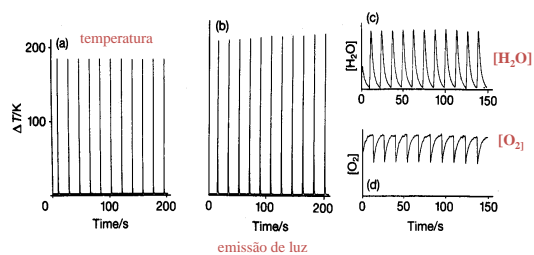
Um reator apropriado: contínuo, com mistura eficiente e controle de temperatura

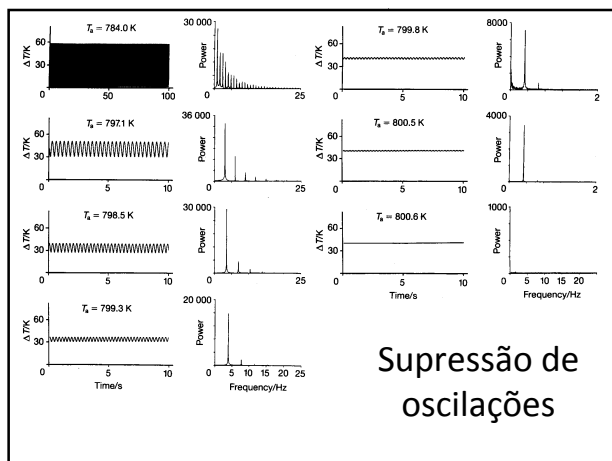


A região do segundo limite, ampliada



Séries temporais: concentrações, emissão de luz, calor





Você também pode observar isto...

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



- Rheochaos can be defined as the occurrence of macroscopic chaos in a viscoelastic material at a negligible Reynolds number. With the neglect of inertia that this implies, the nonlinearity must come not from the advection of momentum as in the Navier-Stokes turbulence but from the constitutive behavior of the material, which may include strong memory effects. Likewise, for the chaos to be macroscopically observable for example in time series data on the stress measured at a fixed strain rate, or vice versa, in a bulk sample a mechanism must be present...

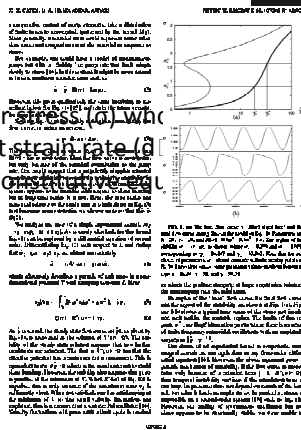
- Strong candidates for rheochaos include micellar materials, dense lamellar phases, and also dense suspensions where erratic stress response at fixed strain rate or vice-versa is widespread but poorly documented.

- M. E. Cates, D. A. Head, and A. Ajdari
- PHYSICAL REVIEW E 66, 025202R (2002)
- Rheological chaos in a scalar shear-thickening model

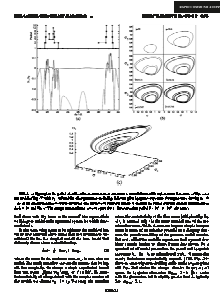
...the shear stress (σ) which is a function of the constant strain rate ($\dot{\epsilon}$) and the time (t) of the simple compressive deformation at a given temperature (T) and pressure (P) is given by the equation:

$$\sigma = B \dot{\epsilon}^m \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \exp\left(-\frac{V_m P}{RT}\right) \quad (1)$$

where B is a material constant, m is the stress sensitivity parameter, Q is the activation energy, R is the gas constant, T is the absolute temperature, and V_m is the molar volume.



ution at
rned by a



ParadigmasdaCiência

- Reduccionismo
 - Hierarquias 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

- Quantomedea a fronteira entre Brasil e Uruguai?
- Vão chegar 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 previsíveis 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

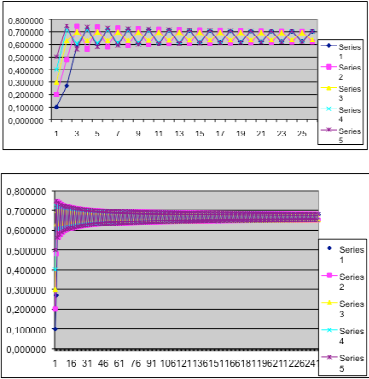
Dez primeiras iterações: $a=2$

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

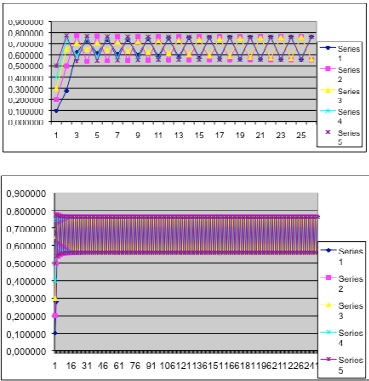
Equação logística, $a=2$

Equaçãologística, a=2,5

Equaçãologística, a=3



Equaçãol
ogística,
a=3,1

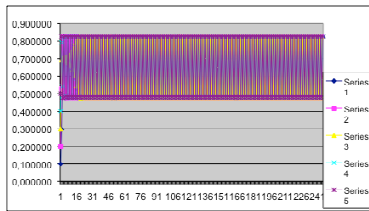
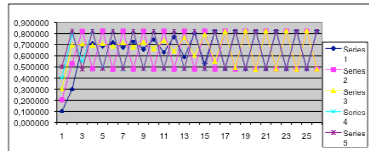


Iterações 245 a 250, a=3 e a=3,1

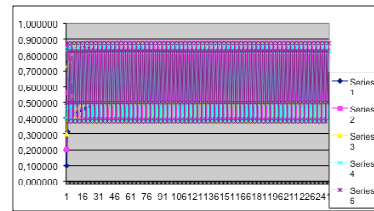
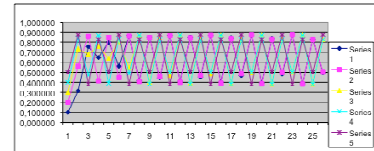
0,651558	0,681265	0,680280	0,651698	0,651424	0,651558
0,681090	0,651429	0,652497	0,680963	0,681212	0,681090
0,651619	0,681208	0,680234	0,651757	0,651487	0,651619
0,681035	0,651491	0,652547	0,680909	0,681155	0,681035
0,651679	0,681151	0,680188	0,651816	0,651548	0,651679

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

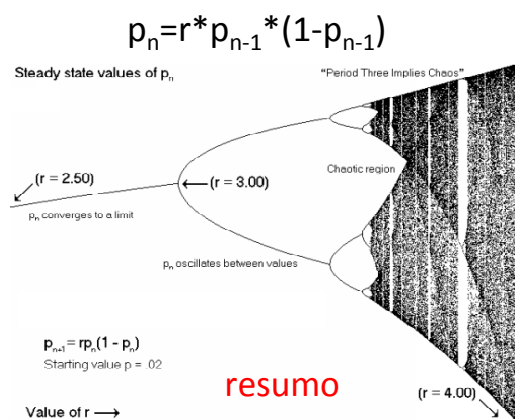
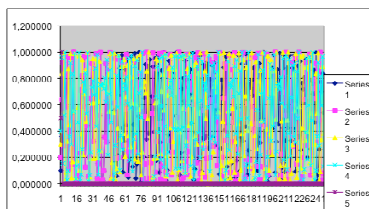
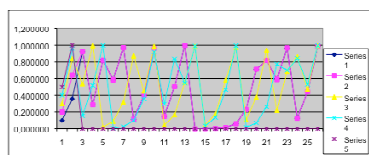
a= 3,3



a= 3,5



a= 4,0



Porque a equação logística?

- Porque é muito simples e evidencia muito bem comportamentos complexos.
- Qualquer equação do segundo grau em muitas outras equações não-lineares apresenta 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.

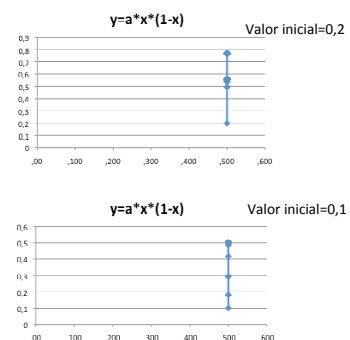
Atratores

- 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 em 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?"

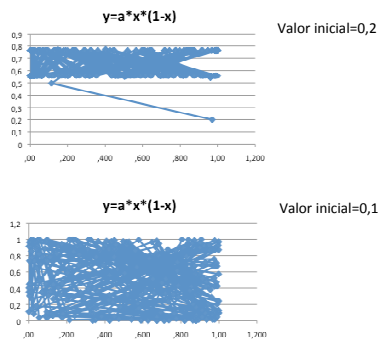
Obtendo atratores

0,105036			0,200000	
0,295036			0,64	
0,021636			0,0216	
0,295014			0,295014	
0,521000			0,821930	
0,595421			0,595421	
0,075813	0,105036	0,685421	0,070813	0,2
0,115351	0,295036	0,070813	0,113338	0,496
0,401014	0,021636	0,113338	0,401974	0,77495
0,091535	0,295014	0,401974	0,081563	0,540847
0,147837	0,521000	0,081563	0,147837	0,769878
0,503024	0,595421	0,147837	0,503924	0,548214
0,075036	0,075813	0,503924	0,099938	0,767492
0,070246	0,115351	0,099938	0,090246	0,553180
0,070036	0,401014	0,090246	0,090988	0,76623
0,093036	0,091535	0,090988	0,093936	0,556277

$$a=2$$



$a=4$



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.

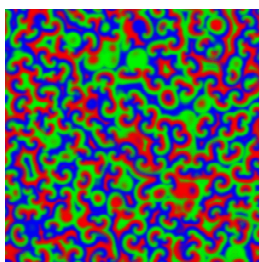
Séries temporais são fontes importantes de informação

- Permite modelar um fenómeno, mesmo que os seus detalhes mecânicos sejam desconhecidos.
- Os métodos de análise são aplicáveis a muitos problemas completamente independentes:
 - Meteorologia e previsão do tempo
 - Reações químicas
 - Variações de preços de mercado e de títulos e 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"> – Superfície de carvão ativo, catalisadores e adsorventes – Fronteiras entre países | • Comportamento caótico |

Simulação da reação em uma placa de Petri



http://upload.wikimedia.org/wikipedia/en/d/d9/The_Belousov-Zhabotinsky_Reaction.gif