UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

Algoritmos de Otimização e Criticalidade Auto-Organizada

Paulo Alexandre de Castro

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física
de São Carlos, Universidade de São Paulo,
para obtenção do Título de Mestre em Ciên-
cias: Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody*

SÃO CARLOS

2002

Castro, Paulo Alexandre de

Modelo de Relógio Quiral/Paulo Alexandre de Castro.

- - São Carlos, 2001

119 p.

Tese (Mestrado) - - Instituto de Física de São Carlos, 2001.

Orientador: Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

1. Mecânica Estatística. 2. Algoritmos de Otimização e Criticalidade Auto-Organizada.

I. Título.

Aos meus pais, Amadeu e Geni,
e a minha irmã Cláudia e meu irmão Alex.

Agradecimentos

- À minha querida e amada Marli.
- Ao prestativo e sempre disposto a trabalhar Prof. Onody pela orientação, paciência, dedicação e amizade nesses 2 anos que estivemos trabalhando juntos, que para ele deve ter sido uma eternidade devido a minha inércia em aprender algo novo e pelas minhas constantes falhas.
- Ao meu maninho e amigo de todas as horas Perseu.
- Ao Luiz Roberto Evangelista, Antonio José Palangana, Mauro Luciano Baesso, Antonio Carlos Bento, Rênio dos Santos Mendes, Luís Carlos Malacarne e Paulo Roberto Borba Pedreira, todos da Universidade Estadual de Maringá, por terem sido meus amigos além de meus professores.
- Aos estimados amigos, Daniel, Matheus Lobo, João Vítor, Reginaldo Zara, Carlos Alberto, Cristiane Barbieri, Maria do Rosário, Maria Suzana, Ednalva Vidotto, Leonardo Castelano, Célio e Bonk pelas agradáveis horas que suas companhias me proporcionaram.
- A todos os colegas de trabalho, e agradecimentos especiais se fazem necessário para a Ana Tereza e Nazareno (o casal 30), ao Matheus Lazo e Helena (o casal 20), Cláudia Bonardi, Henrique, Alexandre Colato, Leonardo Maia, Alexandre Rosas e Antonio Carlos pelo companheirismo sempre constantes e pelos incontáveis auxílios que me prestaram.
- Agradeço muito ao Nelson, autor da dissertação de mestrado que inspirou o trabalho do meu mestrado, pela presteza, gentileza e paciência em nossas conversas.
- Às funcionárias da bibliotecas pela presteza e gentileza no atendimento.

- Quero agradecer a Wladerez, secretária da pós-graduação, que sempre durante todo o meu mestrado foi muito gentil, paciente, um verdadeiro anjo.
- Quero ainda agradecer de coração a minha grande amiga Adriana Fontes pelas conversas de incentivo e pela ajuda financeira imprescindível para que eu viesse fazer o mestrado em São Carlos.
- Para concluir, eu gostaria de agradecer a todos que direta ou indiretamente contribuíram para que eu me sentisse tão bem longe de casa.

Resumo

As teorias científicas surgiram da necessidade do homem entender o funcionamento das coisas. Novos métodos e técnicas são então criados com o objetivo não só de melhor compreender, mas também de desenvolver essas próprias teorias. Nesta dissertação, vamos estudar várias dessas técnicas (aqui chamadas de algoritmos) com o objetivo de obter estados fundamentais em sistemas de *spin* e de revelar suas possíveis propriedades de auto-organização crítica.

No segundo capítulo desta dissertação, apresentamos os algoritmos de otimização: *simulated annealing*, algoritmo genético, otimização extrema (EO) e evolutivo de Bak-Sneppen (BS).

No terceiro capítulo apresentamos o conceito de criticalidade auto-organizada (SOC), usando como exemplo o modelo da pilha de areia. Para uma melhor compreensão da importância da criticalidade auto-organizada, apresentamos vários outros exemplos de onde o fenômeno é observado.

No quarto capítulo apresentamos o modelo de relógio quiral de p -estados que será nosso sistema de testes. No caso unidimensional, determinamos a matriz de transferência e utilizamos o teorema de *Perron-Frobenius* para provar a inexistência de transição de fase a temperaturas finitas a temperaturas finitas. Esboçamos os diagramas de fases dos estados fundamentais que obtivemos de maneira analítica e numérica para os casos de $p = 2, 3, 4, 5$ e 6 , no caso numérico fazendo uso do algoritmo de Bak-Sneppen com sorteio (BSS). Apresentamos ainda um breve estudo do número de mínimos locais para o modelo de relógio quiral de p -estados, para os casos de $p = 3$ e 4 .

Por último, no quinto capítulo, propomos uma dinâmica Bak-Sneppen com ruído (BSR) como uma nova técnica de otimização para tratar sistemas discretos. O ruído é introduzido diretamente no espaço de configuração de *spins*. Conseqüentemente, o *fitness* (adaptabilidade) passa a assumir valores contínuos, num pequeno intervalo em torno do seu valor original (discreto). Os resultados dessa dinâmica indicam a presença de criticalidade auto-organizada, evidenciada pelo decaimento em leis de potências das correlações espacial e temporal. Também estudamos o método EO e obtivemos uma confirmação numérica de que sua dinâmica exibe um comportamento não crítico com alcance espacial infinito e decaimento exponencial das avalanches. Finalmente, para o modelo de relógio quiral, comparamos a eficiência das três dinâmicas (EO, BSS e BSR) no que tange às suas habilidades de encontrar o estado fundamental do sistema.

Abstract

In order to understand how things work, man has formulated scientific theories. New methods and techniques have been created not only to increase our understanding on the subject but also to develop and even expand those theories. In this thesis, we study several techniques (here called algorithms) designed with the objective to get the ground states of some spin systems and eventually to reveal possible properties of critical self-organization.

In the second chapter, we introduce four fundamental optimization algorithms: simulated annealing, genetics algorithms, extremal optimization (EO) and Bak-Sneppen (BS).

In the third chapter we present the concept of self-organized criticality (SOC), using as an example the sandpile model. To understand the importance of the self-organized criticality, we show many other situations where the phenomenon can be observed.

In the fourth chapter, we introduce the p -states chiral clock model. This will be our test or toy system. For the one-dimensional case, we first determined the corresponding transfer-matrix and then proved the nonexistence of phase transitions by using the *Perron-Frobenius* theorem. We calculate the ground state phase diagrams both analytically and numerically in the cases of $p = 2, 3, 4, 5$, and 6 . We also present a brief study of the number of local minima for the cases $p = 3$ and 4 of the chiral clock model.

Finally, in the fifth chapter, we propose a Bak-Sneppen dynamics with noise (BSN) as a new technique of optimization to treat discrete systems. The noise is directly introduced into the spin configuration space. Consequently, the fitness now take values in a continuum but small interval around its original value (discrete). The results of this dynamics indicate the presence of self-organized criticality, which becomes evident with the power law scaling of the spacial and temporal correlations. We also study the EO algorithm and found a numerical confirmation that it does not show a critical behavior since it has an infinite space range and an exponential decay of the avalanches. At the end, we compare the efficiency of the three dynamics (EO, BSD and BSN) for the chiral clock model, concerning their abilities to find the system's ground state.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Algoritmos de Otimização	5
2.1	Introdução	5
2.2	Configuração, Perturbação e Vizinhança	6
2.3	Heurísticas e Meta-Heurísticas	10
2.4	Algoritmos Genéticos	11
2.4.1	Histórico do Algoritmo Genético	11
2.4.2	Definição da Meta-Heurística dos Algoritmos Genéticos	12
2.5	<i>Simulated Annealing</i>	20
2.5.1	Um breve histórico do <i>Simulated Annealing</i>	20
2.5.2	Definição da Meta-Heurística <i>Simulated Annealing</i>	21
2.6	Otimização Extrema	24
2.6.1	Definição da Meta-Heurística Otimização Extrema	24
2.7	Bak-Sneppen	29
2.7.1	Definição da Meta-heurística de Bak-Sneppen	30
3	Criticalidade Auto-Organizada	32
3.1	Introdução	32
3.2	Definição de Criticalidade Auto-Organizada	42
3.3	Modelo da Pilha de Areia	43
3.4	Modelo Evolutivo de Bak-Sneppen	43
4	Modelo de Relógio Quiral de p-estados	46
4.1	Introdução	46
4.2	Modelo de Relógio Quiral de p -estados	47

4.3	Teorema de <i>Perron-Frobenius</i>	48
4.4	Modelo de Bak-Sneppen com sorteio	48
4.5	Diagramas de fases	51
4.5.1	Fronteiras Numéricas	51
4.5.2	Fronteiras Analíticas	55
4.6	Número de Mínimos Locais	56
4.6.1	Definição da Heurística do Número de Mínimos Locais	56
5	Otimização, Ruído e Criticalidade Auto-Organizada	60
5.1	Introdução	60
5.2	Dinâmicas Bak-Sneppen	60
6	Conclusões e Perspectivas	68
	Apêndice	70
	A Técnica do Potencial Efetivo	70
	B Cálculo das Fronteiras Analíticas	73
B.1	Cálculos das Fronteiras para o MRQ3	73
B.2	Cálculos das Fronteiras para o MRQ4	78
	Bibliografia	85

Lista de Figuras

2.1	Representação do circuito de seqüência $5 \rightarrow 8 \rightarrow 1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 7 \rightarrow 6$.	8
2.2	Representação do circuito de seqüência $5 \rightarrow 8 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 7 \rightarrow 6$.	9
2.3	Representação da “caminhada” de uma heurística (linha tracejada) e uma meta-heurística (linha contínua), no espaço de configurações para o caso de um problema de minimização.	10
2.4	Roleta viciada para a fase de reprodução num algoritmo genético	15
2.5	Formas de cruzamento nos AGs	17
2.6	Mecanismos de mutação	18
3.1	Pilha de areia. A inspiração para o conceito da criticalidade auto-organizada.	34
3.2	Distribuição de distâncias entre sucessivas mutações.	44
3.3	Distribuição de avalanches no estado crítico.	45
4.1	Visão frontal de uma rede de <i>spins</i> , do modelo de relógio quirral, para o caso $p = 3$	47
4.2	Esboço de uma rede, do modelo de relógio quirral, na presença de um campo magnético.	51
4.3	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p=2$. . .	52
4.4	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p=3$. . .	53
4.5	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p=4$. . .	53
4.6	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p=5$. . .	54
4.7	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p=6$. . .	54
4.8	Diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso de $p = 3$, obtido analiticamente.	55

4.9	Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p = 4$, obtido analiticamente.	56
4.10	Tempo de busca do estado fundamental <i>vs.</i> número de sítios, para o caso $p = 3$, fase 3A e valores de $\Delta = 0,35$ e $h = 0,8$	57
4.11	Energia por <i>spin vs.</i> número de sítios, para o caso $p = 3$, fase 3A e valores de $\Delta = 0,35$ e $h = 0,8$	58
4.12	Tempo de busca do estado fundamental <i>vs.</i> número de sítios, para o caso $p=4$, fase 4A e valores de $\Delta = 0,26$ e $h = 0,4$	58
4.13	Energia por <i>spin vs.</i> número de sítios, para o caso $p = 4$, fase 4A e valores de $\Delta = 0,26$ e $h = 0,4$	59
5.1	Diagrama de fases do modelo de relógio quiral para o caso de $p=3$	61
5.2	Histograma da energia por <i>spin</i> do modelo EO, tipo BS com sorteio e tipo BS com ruído.	64
5.3	Probabilidade de distribuição $D(x)$ <i>vs.</i> distância x	65
5.4	Probabilidade de distribuição de avalanches $P(A)$ <i>vs.</i> tamanho de avalanche A .(a) algoritmo tipo BS com ruído, (b) algoritmo EO e (c) tipo BS com sorteio.	67
A.1	Potenciais $U(u)$ e $V(u')$	71
A.2	Esboço mostrando as redes referentes aos potenciais efetivos: (a) $R(u)$, (b) $S(u)$ e (c) $F(u)$	72
B.1	Diagrama de fases do modelo de relógio quiral de p -estados, para o caso de $p = 3$, obtido analiticamente.	78
B.2	Diagrama de fases do modelo de relógio quiral de p -estados, para o caso de $p = 4$, obtido analiticamente.	84

Lista de Tabelas

2.1	Cálculo de probabilidades para fase de reprodução num problema de maximização	15
2.2	Cálculo de probabilidades para fase de reprodução num problema de minimização	16

Capítulo 1

Introdução

“Há quem passe pelo bosque
e só veja lenha para a fogueira.”

Tolstói

O homem sempre desejou entender o mundo à sua volta. As imposições da sobrevivência assim o determinaram. Rodeada de elementos materiais, a primeira necessidade da humanidade foi conquistar o domínio de seu meio ambiente. A segurança contra predadores e fenômenos naturais, a busca da alimentação, a organização social dos núcleos humanos etc., despertaram os primeiros questionamentos do homem, privilegiando a ação sobre o concreto. Na medida em que as necessidades do espírito humano foram se tornando mais complexas, cresceram as carências por aperfeiçoar o processo de compreensão do mundo. Na impossibilidade de lidar diretamente com a complexidade do mundo, o homem tem se mostrado cada vez mais hábil na criação de metáforas para a representação e solução de sua relação com esse mesmo mundo.

Esse processo de busca de uma visão bem estruturada da *realidade* (esclarecimento) é fundamentalmente um fenômeno de modelagem. A palavra modelo pode ter diversos significados. Modelo como representação substitutiva da realidade, distingue-se do verbo modelar. O verbo introduz a idéia de simulação da realidade, que é mais ampla que a simples representação.

Um modelo é *um veículo para uma visão bem estruturada da realidade*. Um modelo também pode ser visto, com os devidos cuidados, *como uma representação substitutiva da realidade*.

Todos nós já lidamos com modelos, mesmo em ocasiões onde não possuíamos a mínima consciência disso. Quando explicamos algo a uma pessoa usando fotografias ou gráficos, ou quando representamos planos ou sólidos através de equações matemáticas, nada mais estamos fazendo do que transmitir e interpretar a estranha realidade através de metáforas de substituição ou *modelos*.

A Geometria Euclidiana é um modelo que satisfaz a um conjunto de axiomas¹, ou um modelo de contexto axiomático. De forma semelhante, nessa linha podemos identificar outros modelos que vão desde as transformadas de Laplace e as leis de Newton até a Teoria Quântica e o átomo de Bohr. Obviamente não existem somente modelos axiomáticos. O contexto epistemológico² é um exemplo disso. Lidando com o concreto ou abordando o imaginário, a mente do homem trabalha com estruturas de “substituição” que visam facilitar o raciocínio, estruturas que denominamos genericamente de modelos.

Os modelos, para serem implementáveis, devem ser livres de pequenos detalhes onerosos. Nessa abordagem a importância do equilíbrio simplificação *vs.* validade é fundamental. Com o objetivo de estudar modelos dos mais variados apresentamos no Capítulo 2 os seguintes algoritmos de otimização: Algoritmos Genéticos [14, 18], *Simulated Annealing* [9, 11], Otimização Extrema [21, 22] e o Bak-Sneppen [28, 32, 33]. Ainda no Capítulo 2 apresentamos alguns problemas de otimização, dentre eles o problema do caixeiro viajante e o grafo bipartido.

Em 1987, Per Bak, Chao Tang e Kurt Wiesenfeld [1] propuseram o conceito de criticalidade auto-organizada, usando o modelo da pilha de areia. O modelo consiste em adicionar grãos de areia num plano até a formação de um monte. Feito isso, foi possível constatar que a pilha de areia exibe o comportamento de equilíbrio pontuado, onde períodos de *quiescência* são interrompidos por intermitentes deslizamentos dos grãos de areia. Os deslizamentos dos grãos, ou avalanches, são causados por uma reação em cadeia, no qual um simples grão de areia impulsiona um ou mais grãos. As grandes avalanches, e não uma mudança gradual, fazem a ligação entre o comportamento quantitativo e qualitativo, e formam a base para fenômenos emergentes.

¹axioma, do latim *axioma*, opinião, dogma. Proposição evidente, proposição que não carece de demonstração, máxima, sentença.

²epistemológico vem da palavra grega *epistême*, ciência + *lógos*. Estudo crítico das várias ciências; gnosiologia, teoria do conhecimento.

Sistemas críticos auto-organizados evoluem para um estado complexo crítico sem a interferência de qualquer agente externo. O processo de auto-organização acontece depois de um período muito longo de transiente. Comportamentos complexos, seja na geofísica ou na biologia, são sempre criados por um longo processo de evolução. Sendo assim, não podemos querer entender um determinado sistema, olhando para um único quadro temporal, pois esse tempo é muito curto quando comparado com o processo evolucionário. Dito isso, a frase “não podemos entender o presente sem antes entender o passado” ganha um significado mais preciso e profundo. No Capítulo 3, é feita uma apresentação mais detalhada sobre a história e conceito de criticalidade auto-organizada, onde apresentamos também o modelo evolutivo de Bak-Sneppen.

Stellan Ostlund [2] e David Huse [3], em 1981, introduziram o modelo de relógio quiral de p -estados, no qual o *spin* do tipo Ising é substituído por uma variável relógio que pode assumir qualquer uma das $p \geq 3$ orientações igualmente espaçadas num espaço bidimensional. No Capítulo 4 apresentamos o modelo de relógio quiral de p -estados unidimensional, que adotamos como nosso sistema de testes, bem como a demonstração da não existência de transição de fase para esse modelo. Fazendo uso da dinâmica Bak-Sneppen obtivemos numericamente os diagramas de fases dos estados fundamentais para os casos de $p = 3, 4, 5$ e 6 . E ainda no Capítulo 4, apresentamos os diagramas de fases dos estados fundamentais obtidos analiticamente, bem como o estudo do número de mínimos locais para o modelo de relógio quiral de p -estados.

A natureza é composta de seres vivos e matéria inerte que evoluem *fora do equilíbrio*. Isto pode ser evidenciado por medidas de evolução da natureza com as escalas de espaço e tempo apropriadas. Em particular, a dinâmica dos seres vivos é basicamente governada pela teoria da seleção natural, que foi primeiro proposta por Charles Darwin [4]. Com certeza, esta teoria foi uma das grandes realizações do século XIX. Em resumo, a teoria da seleção natural diz que a evolução não se dá expressamente pela procriação das espécies melhores adaptadas ao seu meio, mas sim pela extinção das espécies menos adaptadas. Este mecanismo leva à emergência de estruturas altamente especializadas. Se nós também considerarmos a espantosa variabilidade das espécies, podemos dizer que a natureza é um sistema complexo. De fato, pelo que nós sabemos, a natureza opera num estado crítico auto-organizado [5]. No Capítulo 5 apresentamos uma dinâmica Bak-Sneppen com sorteio (BSS), que será usada no Capítulo 4 para obter

o diagrama de fases para os estados fundamentais, onde os sítios que possuem os estados de pior valor de *fitness* são colocados em uma lista, e desta lista é escolhido por sorteio o sítio que terá o estado alterado. Apresentamos ainda, uma dinâmica Bak-Sneppen com ruído (BSR), como uma proposta de otimização para tratar sistemas discretos, onde o ruído é introduzido diretamente no espaço de configuração de *spins* do modelo de relógio quiral, permitindo que a variável *fitness* assuma valores contínuos. O método conhecido por *otimização extrema* (EO) também é estudado e aplicado ao modelo de relógio quiral.

Ainda no Capítulo 5 é feita uma comparação da eficiência dos algoritmos BSS, BSR e EO. Concluimos que o EO, com o valor de $\tau = 1, 2$ (onde τ é parametro), dos três algoritmos citados, é o que apresenta a melhor performance no que concerne a encontrar o estado fundamental do modelo de relógio quiral de p -estados. No estudo de criticalidade auto-organizada descobrimos que somente o algoritmo BSR apresenta distribuições de avalanches temporais e espaciais que seguem leis de potências. Os expoentes encontrados na dinâmica BSR, coincidem com os valores obtidos por Per Bak e Kim Sneppen no contexto do modelo evolutivo de espécies.

Capítulo 2

Algoritmos de Otimização

“Para entender um problema, temos que tentar ao menos algumas das soluções mais óbvias e descobrir que elas falham; então, redescobrimos que existe uma dificuldade - um problema.”

Karl R. Popper

2.1 Introdução

Os algoritmos apresentados neste capítulo também são conhecidos por “Algoritmos Iterativos de Melhoramento” (*Iterative Improvement Algorithms*). Mas melhoramento de quê? E em que sentido? Estes algoritmos partem de uma configuração, candidata à solução do problema, e dispendo de um critério para medir sua “qualidade”, fazem alterações nessa configuração de tal modo que, ao fim de um certo número de iterações, a qualidade da solução seja ótima. Trata-se, portanto, de um problema de otimização e para tal é necessário definir: quais são as possíveis soluções e como elas são descritas, ou seja, qual a sua representação; como se mede a “qualidade” dessas soluções, ou seja, qual a sua função de otimização, e o que se entende, para o problema específico, por “pequenas alterações”, ou seja, qual a vizinhança de uma possível solução.

É importante dizer que tais algoritmos não garantem, em geral, que um ótimo global seja encontrado. No entanto, em muitos casos, podem obter rapidamente soluções de boa qualidade, mesmo para um problema de grande dificuldade, como o problema do caixeiro viajante.

O problema do caixeiro viajante [6] (PCV) é um dos mais tradicionais e conhecidos problemas de otimização. A formulação mais geral do PCV é a seguinte: um caixeiro viajante tem a tarefa de visitar n cidades diferentes, iniciando e encerrando sua viagem na primeira cidade. Não importa a ordem com que as cidades são visitadas, e de cada uma delas pode-se ir diretamente a qualquer outra. O problema do caixeiro viajante consiste em descobrir a rota que torna mínima a distância percorrida.

Em meados do século XIX problemas relacionados ao PCV foram tratados pela primeira vez, nos trabalhos do matemático britânico Thomas Penyngton Kirkman e pelo irlandês Sir William Rowan Hamilton. Contudo, o primeiro a propor o problema formalmente foi o francês Gaspard Monge [7]. Em 1857, Sir William Rowan Hamilton propôs um jogo que denominou de *Around the World*. O jogo era realizado sobre um dodecaedro em que cada vértice estava associado a uma cidade. O desafio consistia em encontrar uma rota através dos vértices do dodecaedro que iniciasse e terminasse em uma mesma cidade sem nunca repetir uma visita. Uma solução do jogo, em sua homenagem, passou a se denominar um ciclo hamiltoniano. Foi o jogo de Hamilton, o *Around the World*, que melhor divulgou o PCV. Uma das primeiras menções ao problema do caixeiro viajante, no século XX, que se tem conhecimento, é atribuído ao matemático americano Hassler Whitney no ano de 1934.

Na próxima seção, iremos tratar da formalização desse e de outros problemas de otimização, começando com a apresentação do conceito de configuração, perturbação e vizinhança.

2.2 Configuração, Perturbação e Vizinhança

Um problema de otimização consiste em:

Dados: Uma configuração:
 $S = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$
 Uma função:
 $C : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

Obter: O conjunto $S^* \in \Omega$, satisfazendo a condição:
 $C(S^*) \geq C(S), \forall S \in \Omega$ (problema de maximização) ou
 $C(S^*) \leq C(S), \forall S \in \Omega$ (problema de minimização)
 sujeito a possíveis restrições.

onde: S é uma configuração qualquer;

$x_1, x_2, \dots, x_n$ são variáveis dinâmicas;

S^* é a “melhor” configuração dentre todas;

Ω é o espaço de configurações;

C é a função objetivo ou função custo.

Uma *configuração* equivale a um dos arranjos possíveis, dentro do espaço de configurações Ω , que satisfaz as propriedades impostas por possíveis restrições. Um procedimento que transforma uma configuração S_i em uma outra S_j , com S_i e $S_j \in \Omega$, é chamado de *perturbação* e, na prática, é aplicável nos casos em que S_j é uma configuração “ligeiramente” modificada de S_i .

O conjunto de novas configurações, que pode ser obtido, a partir de uma configuração específica S , a partir de perturbações define a *vizinhaça* $N(S)$, e obviamente sua dimensão depende do procedimento de perturbação utilizado.

Assim sendo, vemos que, além da escolha acertada dos valores dos parâmetros específicos de cada algoritmo, a escolha da vizinhaça e da função de otimização constituem os aspectos centrais da aplicação destes algoritmos a problemas concretos. A seguir, analisamos estes aspectos para o caso do problema do caixeiro viajante.

Se temos N cidades, qualquer volta pelas N cidades pode ser representada como uma permutação dos números de 1 a N . Isto corresponde fisicamente a um circuito ligando as cidades pela ordem indicada pela permutação e considerando que existe uma ligação entre a última cidade e a primeira. Por exemplo, a permutação (3, 2, 1, 4, 5) corresponde ao circuito $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 3$.

O conjunto de permutações das N cidades contém todas as soluções possíveis, e sua cardinalidade é $N!$. Observe, no entanto, que uma permutação circular

de qualquer seqüência de números representa o mesmo circuito. Então, podemos fixar qualquer cidade como a de partida, obtendo assim uma cardinalidade $(N - 1)!$. Além disso, deve ser observado que se a distância entre duas cidades for independente do sentido (distância simétrica), o número de circuitos diferentes é então $(N - 1)!/2$. Uma vizinhança- k de um circuito é definida pelo conjunto de todos os circuitos que se obtêm removendo k ligações e substituindo-as por k outras ligações, de tal modo que se mantenha um circuito válido. Para $k > 3$, existem diferentes maneiras de, depois de removidas as k ligações, voltar a conectar o circuito. Para $k = 2$, existe apenas uma maneira de conectar: se as ligações (i, j) e (i', j') forem retiradas, onde i, j, i', j' são rótulos das cidades, então a única maneira admissível de criar um outro circuito é ligando as cidades de modo a formarem os pares (i, i') e (j, j') .

Figura 2.1: Representação do circuito de seqüência $5 \rightarrow 8 \rightarrow 1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 7 \rightarrow 6$.

Considere, por exemplo, o circuito mostrado na figura 2.1, que corresponde à representação $(5, 8, 1, 3, 4, 2, 7, 6)$. Se as ligações $(1, 3)$ e $(2, 7)$ forem removidas, então as únicas ligações possíveis, de modo a manter-se um circuito, são $(1, 2)$ e $(3, 7)$, desde que se inverta a direção da ligação entre 2 e 4, e também da ligação entre 3 e 4. O novo circuito assim obtido, como mostra a figura 2.2, é representado pela seqüência $(5, 8, 1, 2, 4, 3, 7, 6)$.

Deste modo, cada par de valores (i, j) representa uma conexão entre vizinho. A dimensão da vizinhança é o número de combinações de N dois a dois, ou seja, $N(N - 1)/2$. Assim, dada uma seqüência, um vizinho é obtido pela troca de lugar de dois números nessa seqüência. Além disso, qualquer circuito pode ser obtido pela aplicação de uma ou mais vezes (número finito) desta operação a partir de outro circuito qualquer. Em outras palavras, é possível atingir qualquer ponto do espaço de

Figura 2.2: Representação do circuito de seqüência $5 \rightarrow 8 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 7 \rightarrow 6$.

configurações a partir de qualquer outro pela permutação sucessiva da vizinhaça. Esta estrutura de vizinhaça é fácil de ser implementada pois consiste apenas na troca de valores entre duas posições, as quais podem ser escolhidas aleatoriamente entre 1 e N .

A função a ser otimizada no caso do problema do caixeiro viajante é a soma das distâncias entre as cidades visitadas. A dinâmica de otimização consistirá em saber apenas qual foi a variação na qualidade da solução. É possível calcular essa variação (representada por ∂), da seguinte forma:

$$\partial = d(i, j) + d(i', j') - d(i, i') - d(j, j')$$

onde $d(i, j)$, $d(i', j')$, $d(i, i')$ e $d(j, j')$ são as distâncias entre os pares vizinhos das respectivas cidades.

O ponto inicial, cidade de onde o caixeiro começa a viagem, pode ser obtido facilmente, gerando aleatoriamente uma solução aceitável. Além da maneira aleatória, também pode-se fazer uso de heurísticas¹ para gerar uma solução de forma construtiva (por exemplo: escolher sempre a mais próxima sucessivamente).

Na próxima seção faremos a apresentação de dois tipos de algoritmos, os heurísticos e os meta-heurísticos. Será apresentado também uma breve discussão da dinâmica desse algoritmos.

¹heurística vem da palavra grega *heuriskein* que significa descobrir. Um célebre episódio atribuído a Arquimedes refere-se a um pedido do rei Hieron II para que descobrisse se sua coroa era, de fato, de ouro puro. Arquimedes concluiu que o ourives do rei o enganava e ainda descobriu um dos princípios básicos da hidrostática, a força de empuxo. Nesse dia ele teria saído nu de uma casa de banho, gritando “Eureka, eureka!” (“Descobri, descobri!”) pelas ruas da cidade.

2.3 Heurísticas e Meta-Heurísticas

Heurística é qualquer método ou técnica criada, ou desenvolvida, para resolver um determinado tipo de problema. Meta-heurísticas são consideradas heurísticas de uso geral ou uma heurística das heurísticas.

Para termos uma noção melhor do que é heurística e meta-heurística, observemos a figura 2.3, que mostra a evolução das duas dinâmicas, para um problema hipotético de minimização no espaço de configurações.

Figura 2.3: Representação da “caminhada” de uma heurística (linha tracejada) e uma meta-heurística (linha contínua), no espaço de configurações para o caso de um problema de minimização.

Podemos notar que a heurística faz uma busca intensificando a escolha da melhor configuração em cada passo, de forma que, dada uma configuração S_i aceita S_{i+1} somente se $f(S_i) > f(S_{i+1})$, onde $f(S_i)$ é a função custo a ser minimizada. A figura 2.3 mostra que a partir de uma configuração inicial aleatória S_0 , com $f(S_0) = 28$, seria obtido em dois passos um mínimo local S_2 , para valores de $f(S)$ na ordem: $28 - 12 - 10$.

Quando utilizamos uma meta-heurística qualquer, que explora o espaço de configurações alternando os procedimentos de intensificação e diversificação, com

a intenção de não ficar armadilhado em algum mínimo local, obtemos a sequência: $28 - 12 - 32 - 8 - 4$, convergindo para o mínimo global desejado.

As meta-heurísticas evoluem de maneira probabilística. Veremos nas próximas seções exemplos do uso de probabilidade pelas meta-heurísticas Algoritmos Genéticos e *Simulated Annealing*. Vale lembrar que, para as meta-heurísticas nem sempre é garantida a obtenção de um mesmo resultado para determinadas solicitações de um problema, justamente pelo uso de probabilidade, o que não ocorre com as heurísticas.

2.4 Algoritmos Genéticos

2.4.1 Histórico do Algoritmo Genético

Os algoritmos genéticos (AGs) constituem métodos de busca baseados em mecanismos de seleção e evolução natural. Os primeiros trabalhos nessa linha são originários de John Holland [12, 13], datam de 1962, e objetivavam reproduzir os processos utilizados pelos sistemas auto-adaptativos em um contexto computacional. Obviamente, nem todos os mecanismos de evolução e adaptação dos sistemas biológicos estão sequer modelados, contudo, vários aspectos já são bem conhecidos. Um dos pontos bem aceitos é o de que o processo de adaptação depende de uma forte interação entre uma certa configuração genética portada pelo indivíduo e os aspectos ambientais. Jean-Baptiste Lamarck, em 1809, formulou a primeira hipótese sistematizada sobre evolução, afirmando que os seres vivos evoluíam sem saltos ou cataclismos e de forma lenta e segura, introduzindo o conceito de caracteres adquiridos. Charles Darwin desenvolveu uma teoria completa explicando como o meio ambiente atuaria sobre os indivíduos, forçando uma seleção dos mais aptos. Johann Gregor Mendel, em 1866, apresenta uma nova teoria para explicar como ocorreriam os fenômenos hereditários, o que viria a se transformar no que hoje conhecemos como genética.

Em meados do século *XIX*, os cientistas observaram, no núcleo das células que podiam ser observadas pelos primeiros microscópios, filamentos enrolados denominados cromossomos. O nome foi originário da facilidade com que eram marcados por corantes. Thomas Hunt Morgan descobriu que esses filamentos eram constituídos por subgrupos que foram denominados genes, e que eles controlavam, dentre outras coisas,

a cor de certas moscas. Ele demonstrou que esses grupos eram divididos e recompostos formando um fenômeno chamado de cruzamento ou reprodução sexuada.

Partindo do modelo do cromossomo para representar o processo evolutivo, Holland [14, 15] utilizou uma lista de símbolos binários (0, 1) para representar as cadeias de ácido nucléico. O objetivo do trabalho de Holland era fundamentar uma teoria geral de sistemas de adaptação robusta. Contudo, ele foi capaz de encontrar um caminho de grande e imediata aplicação prática na determinação de máximos e mínimos de funções matemáticas. E foi essa característica dos Algoritmos Genéticos que fez com que eles fossem muito bem aceitos no meio acadêmico. Diversos autores contribuíram para a consolidação do trabalho de Holland, como Grefenstette [16], Goldberg [17], De Jong [19], entre outros.

2.4.2 Definição da Meta-Heurística dos Algoritmos Genéticos

Podemos entender os AGs como sendo uma parte da computação evolucionária que encontrou a possibilidade de aplicação geral e que possui as seguintes características gerais:

- Operam em um conjunto de indivíduos (denominado população) e não em indivíduos isolados.
- Trabalham com uma codificação do conjunto de parâmetros e não diretamente com os parâmetros.
- Necessitam como informação somente o valor da função objetivo.
- Utilizam somente regras probabilísticas e não determinísticas.

Os termos que se seguem são usados pelos Algoritmos Genéticos:

- População: conjunto de indivíduos.
- Cromossomo: um indivíduo na população.
- *Fitness*: medida de qualidade ou adaptabilidade de um indivíduo, *i.e.*, normalmente associado ao valor da função objetivo para uma dada solução.

- Gene: uma componente do cromossomo.
- Alelo: valor da função objetivo.
- Operadores genéticos: são regras que permitem a manipulação dos cromossomos. Basicamente, são representados pelos operadores:
 - Reprodução: permite que indivíduos de uma mesma espécie se multipliquem.
 - Cruzamento (*crossover*): permite a obtenção de descendentes (filhos) a partir da combinação (cruzamento) dos cromossomos do pais.
 - Mutação: permite a produção de um novo indivíduo por meio de alterações nos cromossomos dos filhos.
- Fenótipo: denota o cromossomo decodificado.
- Genótipo: representa a estrutura do cromossomo codificado.
- *Schema*: é um modelo de representação para uma família de cromossomos. Normalmente é representado pelo símbolo $*$.

Para uma melhor compreensão do conceito de *schema*, ou máscara, podemos dizer que *schema* é um modelo de representação dos cromossomos que guardam uma certa semelhança. Um *schema* é construído com a inclusão de um símbolo especial ($*$) no alfabeto dos genes. Por exemplo, para cromossomos representados por genes binários (0 ou 1) o *schema* $(*10*1)$ representa quatro configurações: $(\underline{0}1\underline{0}\underline{0}1)$, $(\underline{0}10\underline{1}1)$, $(\underline{1}1\underline{0}\underline{0}1)$ e $(\underline{1}10\underline{1}1)$. *Schemas* sem a presença do símbolo ($*$) são permitidos e correspondem a um cromossomo específico (por exemplo: 10101). Por outro lado, aqueles que só contêm este símbolo (por exemplo: $* * * * *$) representam todos os 2^n cromossomos possíveis, onde “ n ” é o total de genes no cromossomo.

Um *schema* é útil para incluir restrições impostas pelo problema, determinar a ocorrência, ou não, de cruzamentos e mutações, detectar o fenótipo de uma população, onde diferentes *schemas* implicam em diferentes características, podendo ser usado também para testar a convergência do problema.

Definem-se: *ordem* de um *schema*, como o número de elementos (genes) diferentes de ($*$), e *tamanho*, como a distância entre a primeira e a última posição fixa,

ou seja, diferente de (*). Por exemplo, para: $S_1 = (1**0***1*1)$ e $S_2 = (*011*0*11*)$, temos: ordem (S_1) = 4, ordem (S_2) = 6, tamanho (S_1) = 9 e tamanho (S_2) = 7. A ordem de um *schema* é usada para calcular a probabilidade de se realizar uma mutação, ou um cruzamento.

Dos termos citados anteriormente os mais usados são: cromossomo, gene, alelo, genótipo e fenótipo. Para um melhor entendimento do que significam os termos utilizados pelos AGs, apresentamos a seguir alguns dos termos usados na resolução do problema do caixeiro viajante (PCV) para um número de cidades $n = 10$, e o significado dos respectivos termos:

$S_i = 3 - 4 - 8 - 2 - 7 - 1 - 9 - 5 - 10 - 6$	(cromossomo)
$g_3 = 8$ e $g_7 = 9$	(genes)
$f(S_i) = x$	(alelo)
$S_j = g_1 - g_2 - g_3 - g_4 - g_5 - g_6 - g_7 - g_8 - g_9 - g_{10}$	(genótipo)
$S = * - 4 - 8 - 2 - * - 1 - 9 - 5 - * - 6$	(fenótipo)

onde a representação do fenótipo para o caso do PCV necessita de uma observação. O PCV deve obedecer a condição de não passar duas vezes por uma mesma cidade, sendo assim o *schema* pode ser usado, desde que obedeça a esta condição.

Passos necessários para construir um Algoritmo Genético:

- i) Escolha da forma de representação dos cromossomos, geralmente utilizam-se vetores.
- ii) Geração da população inicial: aleatoriamente, $\mathbf{p}$ configurações ($S_1, S_2, \dots, S_p$) devem ser geradas, onde “ p ” é o tamanho da população, que corresponde a um pequeno subconjunto do espaço de configurações.
- iii) Avaliação da função objetivo: para cada indivíduo da população, obter $f_i = f(S_i)$, $\forall i = 1, \dots, p$.
- iv) Utilização dos operadores genéticos, na seguinte ordem:

1º) *Reprodução* dos melhores indivíduos (seleção). Com base nos valores de f_i , as melhores seqüências (indivíduos considerados mais aptos) são selecionadas e duplicadas em substituição às piores (indivíduos menos aptos). Para realizar esta

Figura 2.4: Roleta viciada para a fase de reprodução num algoritmo genético

operação, é utilizada uma “roleta” viciada (*roulette wheel*), de forma que cada sequência seja copiada um número de vezes proporcional ao valor da função objetivo.

Por exemplo, suponhamos um problema de *maximização* com os valores contidos na tabela 2.1 onde foi utilizada a representação binária dos elementos.

Tabela 2.1: Cálculo de probabilidades para fase de reprodução num problema de maximização

População		Função Objetivo	Probabilidade de Seleção	Probabilidade Acumulada
S_i	Seqüência	$f_i = f(S_i)$	p_i	q_i
S_1	01100	15,84	7,8%	7,8%
S_2	10101	88,20	43,5%	51,3%
S_3	01101	12,10	6,0%	57,3%
S_4	01111	31,50	15,5%	72,8%
S_5	10010	55,08	27,2%	100,0%
$p = 5$	$Schema=*****$	$\sum_{i=1}^5 f_i = 202,72$	$p_i = f_i / \sum_{i=1}^5 f_i$	$q_j = \sum_{i=1}^j p_i$

A figura 2.4 contém a disposição dos indivíduos da população em função de suas probabilidades de seleção. Uma “roleta” viciada é girada cinco vezes, que é o tamanho da população, sendo mais provável gerar cópias do elemento S_2 do que dos demais; e sendo pouco provável que alguma cópia do elemento S_3 seja gerada, com isso tendo grande possibilidade de ser eliminado.

Tabela 2.2: Cálculo de probabilidades para fase de reprodução num problema de minimização

População		Função Objetivo	Probabilidade de Seleção	Probabilidade Acumulada
S_i	Seqüência	$1/f_i$	p_i	q_i
S_1	01100	0,06313	30,5%	30,5%
S_2	10101	0,01134	5,5%	36,0%
S_3	01101	0,08264	39,9%	75,9%
S_4	01111	0,03175	15,3%	91,2%
S_5	10010	0,01816	8,8%	100,0%
$p = 5$	$Schema=*****$	$\sum_{i=1}^5 f_i = 0,20702$	$p_i = f_i / \sum_{i=1}^5 f_i$	$q_j = \sum_{i=1}^j p_i$

Se o problema fosse de *minimização* a única alteração na tabela abaixo seria na função objetivo que passaria a $(1/f)$. Assim o conteúdo da tabela seria o apresentado na tabela 2.2.

Um mecanismo semelhante ao funcionamento da roleta seria gerar um número aleatório “ r ” no intervalo $[0, 1]$ e comparar seu valor com o da probabilidade acumulada q_i , considerando $q_0 = 0$. Assim, se $q_{i-1} < r \leq q_i$, devemos selecionar o indivíduo S_i . No exemplo da tabela 2.2 suponhamos que foram gerados os seguintes valores para “ r ”: ($r_1 = 0,5083$, $r_2 = 0,7712$, $r_3 = 0,2792$, $r_4 = 0,6913$ e $r_5 = 0,0053$). Neste caso a nova população, cujo *schema* é “011**”, seria:

$$\begin{array}{llll}
S'_1 = S_3 = 01101 & q_2 = 0,360 & < r_1 \leq & 0,759 = q_3 \\
S'_2 = S_4 = 01111 & q_3 = 0,759 & < r_2 \leq & 0,912 = q_4 \\
S'_3 = S_1 = 01100 & q_0 = 0 & < r_3 \leq & 0,305 = q_1 \\
S'_4 = S_3 = 01101 & q_2 = 0,360 & < r_4 \leq & 0,759 = q_3 \\
S'_5 = S_1 = 01100 & q_0 = 0 & < r_5 \leq & 0,305 = q_1
\end{array}$$

2º) *Cruzamento (crossover)* é a operação que possibilita a recombinação das estruturas genéticas da população. Permite uma diversificação no espaço de configurações ao gerar estruturas diferentes das atuais. O operador *crossover* escolhe aleatoriamente dois pais, $P1$ e $P2$ e troca as partes de código genético.

Após a escolha aleatória de um ponto de quebra do cromossomo, ou cadeia, são gerados dois filhos, sendo eles $F1$ e $F2$ que substituirão $P1$ e $P2$. Uma variação desta operação pode fazer uso de dois pontos de quebra conforme podemos ver na figura

2.5.

Figura 2.5: Formas de cruzamento nos AGs

3º) *Mutação* é uma operação que corresponde a uma pequena modificação, numa configuração que tem por objetivo tentar regenerar algum indivíduo que, devido a lei de probabilidade (quando do uso da roleta), foi eliminado de forma inesperada. Vale lembrar que existem dois tipos de mutação, a deletéria —que causa degradação dos genes e a benéfica —que proporciona a melhoria dos genes contidos nos cromossomos.

Características Gerais dos AGs

Os AGs são algoritmos de busca probabilística inteligente, com as seguintes características:

- *Os indivíduos são representados por cromossomos e competem por recursos e possibilidade de reprodução.* Os cromossomos, normalmente, estão associados a soluções dos problemas modelados. Uma população inicial é formada, em princípio, através de algum mecanismo de avaliação de performance. Quando esse mecanismo não é ainda conhecido, a população pode ser formada de modo aleatório. Os indivíduos, em geral, são codificados como uma sequência finita em um alfabeto binário (0, 1). Cada componente da sequência é dito um gene. É natural supor que um gene esteja associado a uma variável do problema. A partir da solução inicial, o mecanismo de reprodução será aplicado.
- *Os indivíduos que tiverem mais sucesso nas competições terão maior probabilidade de reprodução do que aqueles de menor performance.* O mecanismo de reprodução é constituído por uma função de avaliação que classifica os indivíduos por

sua performance e por regras que permitirão que esses melhores indivíduos se perpetuem e reproduzam. Observamos a importância da função *fitness* ou de avaliação de performance. O chamado método da “roleta” viciada escolhe o indivíduo para ser um genitor com uma probabilidade igual a sua adequação normalizada, ou seja, o resultado de sua adequação absoluta dividida pela adequação média da população avaliada. É importante perceber a natureza probabilística do processo, objetivando manter a diversidade da população.

- *Os genes dos indivíduos avaliados como bons se propagam através das populações, de modo que possam ser aperfeiçoadas e gerem descendentes cada vez mais aptos.* Os indivíduos selecionados serão transformados por operadores genéticos em novos indivíduos. Existem operadores associados à reprodução com a utilização de um ou mais indivíduos. O operador primário da reprodução utiliza dois indivíduos, sendo denominado *crossover* ou cruzamento. Existem vários modos de realizar um cruzamento entre os indivíduos representados por cromossomos. O objetivo do cruzamento é formar novos indivíduos a partir da troca de genes entre os indivíduos pais.

Completada a reprodução por cruzamento, a população pode ser submetida (não obrigatoriamente) a um processo de mutação. Essa alternativa de geração de novos indivíduos pode ser feita diretamente de um outro indivíduo. A figura 2.6 mostra dois tipos possíveis de mutação.

Figura 2.6: Mecanismos de mutação

A própria concepção do modelo genético o fez flexível e abstrato. O significado das cadeias de cromossomos é completamente livre. O que está em foco no modelo é uma concepção generalista de um processo adaptativo, por isso cabe a denominação de meta-heurística. A cada situação cabe ao modelador concretizar o processo adaptativo

e de seleção natural preconizado na estratégia. A representação de uma solução dentro de uma estrutura cromossômica pode não ser uma tarefa trivial. A própria sequência binária proposta por Holland pode ser inadequada para muitos dos problemas de programação linear inteira, impondo-se a consideração de números inteiros, por exemplo. Um algoritmo genético exige:

- Uma representação genética das soluções viáveis do problema combinatório.
- A determinação de uma população inicial de cromossomos.
- A definição de uma função de avaliação dos cromossomos.
- A definição dos operadores que vão permitir a produção de novos indivíduos e seus parâmetros tais como: distribuições de probabilidade de posição da quebra do cromossomo e o tipo de mutação.
- A definição de vários parâmetros como: regras de parada, tamanho de população e esquema de garantia de diversidade.

A idéia básica consiste em que, de forma similar à teoria biológica dos sistemas naturais, os “melhores” indivíduos sobrevivam e gerem descendentes com suas características hereditárias. Estes elementos, que comporão as novas gerações, tenderão a ter a mesma aparência, ou fenótipo, que seus antecessores. Assim, de forma análoga, um algoritmo genético parte de uma população de indivíduos gerados aleatoriamente (configurações iniciais de um problema), faz a avaliação de cada um (aplicação da função objetivo), seleciona os “melhores” (escolha daqueles cuja função custo tenham os maiores valores, se for um problema de maximização, ou menores, no caso de minimização) e promove manipulações genéticas, como cruzamento e mutação (correspondentes às perturbações) a fim de criar uma nova população.

Podemos, então, descrever genericamente um algoritmo genético da seguinte forma:

*Algoritmo Genético***Início**

1º - Gerar uma população inicial

2º - Avaliar o *fitness* dos indivíduos da população

3º - Repetir

Início

Selecionar um conjunto de pais na população **Cruzar** os pais de modo que se reproduzam **Mudar** gene(s) dos filhos ao serem gerados **Avaliar** o *fitness* dos filhos gerados **Atualizar** a população

Fim

Até que o critério de parada seja atendido**Fim**

2.5 *Simulated Annealing*

2.5.1 Um breve histórico do *Simulated Annealing*

O termo *simulated annealing* pode ser traduzido como “recozimento simulado”, correspondendo a uma simulação algorítmica do processo físico de recozimento de certos materiais, que consiste em submetê-los inicialmente a altas temperaturas e reduzi-las gradualmente até atingirem, com aumentos e reduções da energia, o equilíbrio térmico, levando assim, esses materiais para configurações de mínima energia, ou seja, o estado fundamental.

Metropolis, et al. [8] tratam de processos físicos de resfriamento na área de mecânica estatística dos materiais sólidos. Em 1983, Kirkpatrick, et al. [9] propuseram a técnica do *Simulated Annealing* (SA). A partir destes trabalhos o SA vem sendo utilizado, de forma eficiente, para resolver problemas genéricos de otimização combinatória. O enfoque dado aqui será em problemas de minimização que, como sabemos, podem se adequar a problemas de maximização através de uma pequena alteração na função de otimização, também conhecida por função objetivo, ou ainda função custo.

2.5.2 Definição da Meta-Heurística *Simulated Annealing*

A fundamentação do SA baseia-se nas simulações da evolução para o equilíbrio térmico dos materiais, propostas por Metropolis, et al. as quais utilizam o Método Monte Carlo [10] para gerar seqüências de estados do material caracterizados pelas posições de suas partículas, de forma que, sob altas temperaturas, estas estão totalmente “desorganizadas”, correspondendo a uma configuração aleatória de um problema de otimização (geralmente distante da configuração ótima desejada). Uma pequena alteração (perturbação) nas posições de algumas destas partículas resulta numa variação de energia (para mais ou para menos), o que equivale a uma alteração no valor da função de otimização no mesmo sentido.

Considerando dois estados sucessivos de energia, E_i e E_{i+1} , e tomando a diferença, $\Delta E = E_{i+1} - E_i$, temos as seguintes situações:

- i) $\Delta E < 0$: Nesse caso houve redução de energia; o novo estado é aceito e o processo continua (analogamente, a função custo foi reduzida, ou seja, a configuração E_{i+1} é “melhor” que E_i , no sentido de que desejamos minimizá-la).
- ii) $\Delta E = 0$: Caso de estabilidade, ou equilíbrio, não havendo alteração de energia, ou seja, $E_{i+1} = E_i$. Equivale a uma configuração permanecer inalterada, ou por uma coincidência pouco provável de acontecer na prática termos duas configurações distintas e vizinhas com o mesmo custo.
- iii) $\Delta E > 0$: Caso em que houve um aumento de energia que no processo físico é útil para permitir uma futura “acomodação” das partículas (analogamente, isto evita a convergência da função objetivo para mínimos locais indesejáveis).

A probabilidade de aceitar uma mudança dessa forma é chamada de “critério de Metropolis”, estabelecido a partir do fator de Boltzman [11] que é dado por $\exp(-\Delta E/T)$, onde T é a temperatura no momento que ocorreu a mudança. Uma análise da $\exp(-\Delta E/T)$ mostra que para um mesmo patamar de temperatura (T constante), pequenos acréscimos de energia são mais prováveis de serem aceitos que grandes acréscimos e que à medida que T se aproxima de zero (estado fundamental), mais mudanças indesejáveis são rejeitadas. No começo do processo é necessário atribuímos

uma temperatura inicial alta para evitar o “bloqueio” dos cálculos das soluções em configurações com ótimo mínimo local.

O uso do algoritmo SA implica na sua adaptação ao problema concreto, com isso se faz necessário trabalhar com:

- Função probabilidade de aceitação, em geral na forma $P(\Delta F) = \exp(-\Delta F/T)$, onde F faz o papel da grandeza que se deseja otimizar;
- Temperatura inicial, T_0 ;
- Número de iterações a uma mesma temperatura;
- Função de decaimento da temperatura, em geral na forma $T_k = f(T_{k-1})$;
- Critério de parada.

Embora não seja possível um método geral para estas decisões, existem algumas recomendações úteis, que discriminamos a seguir.

Determinação da temperatura inicial

Se o objetivo é que a solução final seja o mais independente possível do configuração inicial, então a temperatura inicial deve ser suficientemente alta para que qualquer vizinho seja aceito.

Em alguns casos é possível estimar um valor de T_0 para esse efeito. Se o ΔF_{max} , onde ΔF_{max} é a variação máxima de F , entre quaisquer dois vizinhos for conhecido, então podemos regular o valor de T_0 de modo que a probabilidade de aceitar esse valor de ΔF_{max} seja grande. Por exemplo, no caso do caixeiro viajante, quando se obtém um vizinho eliminando duas ligações e substituindo-as por duas outras, o ΔF_{max} ocorre quando se retiram as duas menores distâncias e se juntam as duas maiores distâncias.

Quando não se dispõe de tal informação, é comum iniciar o sistema com uma temperatura não muito alta, e ir subindo a temperatura (em geral rapidamente) até que a proporção do número de vizinhos aceitos seja suficientemente grande, e só então se inicia o processo de arrefecimento.

Procedimento de arrefecimento

Este depende do número de repetições em cada temperatura e do ritmo de decaimento da temperatura. Dois esquemas de arrefecimento são freqüentes na literatura e representam extremos opostos:

- ◇ Redução geométrica: $T_k = \alpha T_{k-1}$, com $\alpha < 1$. Na prática valores altos de α têm se revelado eficazes (entre 0.8 e 0.99). Quanto mais alto o valor de α , mais lento é o arrefecimento. O número de iterações (n_{iter}) em cada temperatura está, em geral, relacionado com a dimensão da vizinhança, ou por vezes com a dimensão do espaço de configurações. Além disso, o valor de n_{iter} pode variar com a temperatura (maior número de iterações a baixas temperaturas). Por exemplo, a cada vez que se muda de temperatura, multiplica-se n_{iter} por uma constante um pouco maior que 1 (variação geométrica de n_{iter}), ou adiciona-se um certo número fixo de iterações (variação aritmética de n_{iter}). Outra forma de controlar o n_{iter} é impor um número máximo de iterações por temperatura, mas autorizar a mudança de temperatura desde que um certo número de vizinhos tenham sido aceitos.
- ◇ Outro procedimento de arrefecimento consiste em executar apenas uma iteração a cada temperatura, mas reduzir a temperatura de forma muito gradual de acordo com a fórmula: $T_k = T_{k-1}/(1 + \beta T_{k-1})$ onde β é um número adequadamente pequeno.

Critério de parada

O critério de parada pode ser expresso em termos da “rigidez” do sistema, isto é, com base no número de movimentos aceitos. Para $T \rightarrow 0$, a probabilidade $P(\Delta F)$ de um movimento, ser aceito tende a zero. Fazendo uso desse fato, podemos parar o processo quando o número de movimentos aceitos chegar num valor mínimo estabelecido. Uma forma ainda mais simples de implementar, contudo muito dependente do problema e, em particular, da sua dimensão e dos parâmetros, é parar ao fim de um certo número de iterações.

Guardar sempre a configuração de maior qualidade

No caso de altas temperaturas, a probabilidade do SA sair de uma configuração ótima e ir para uma outra qualquer de menor qualidade não é desprezível, pois

a configuração encontrada a cada iteração não necessariamente é a melhor de todas as que já foram visitadas. Por essa razão, é conveniente sempre guardar um registro da melhor configuração encontrada durante a pesquisa.

2.6 Otimização Extrema

O método *extremal optimization* (EO), que traduzimos como otimização extrema, foi criado por Stefan Boettcher e Allon G. Percus [21, 22], e tem sua dinâmica inspirada na criticalidade auto-organizada, um conceito introduzido para descrever complexidade emergente em sistemas físicos, onde uma estrutura com adaptação otimizada emerge naturalmente, pela simples seleção contra o extremamente ruim. O método EO, assim como o *simulated annealing* (SA) e o algoritmo genético (AG), são inspirados em observação de sistemas na natureza.

2.6.1 Definição da Meta-Heurística Otimização Extrema

O método EO consiste em, tendo o sistema a ser estudado numa determinada configuração, encontrar quais variáveis deste sistema possuem os piores valores, e em seguida as variáveis de piores valores são substituídas por outras. Vale lembrar que os novos valores das variáveis, que foram atualizados, não são necessariamente os melhores valores.

O algoritmo básico do método EO é dado da seguinte forma:

1. Atribuir uma variável de ligação entre dois sítios consecutivos;
2. Iniciar uma configuração $S = \{x_1, \dots, x_n\} \in \Omega$, onde x_n é a variável dinâmica do sistema, e fazer $S_{best} := S$, onde S_{best} é a melhor configuração a cada passo do algoritmo;
3. Para a configuração atual;
 - a) Calcular λ_i para cada sítio i , onde λ_i é o valor do *fitness* do sítio i ;

- b) Encontrar j que satisfaça $\lambda_j \leq \lambda_i$ para todo i , isto é, encontrar o sítio j de pior *fitness* λ_j ;
 - c) Escolher aleatoriamente uma configuração $S' \in N(S)$, onde $N(S)$ é o espaço de configuração do sistema, requerendo que a pior variável x_j tenha seu estado alterado;
 - d) Aceitar $S := S'$ (incondicionalmente);
 - e) Se $C(S) < C(S_{best})$, onde $C(S)$ é a função a ser otimizada, então fazer $S_{best} := S$, caso contrário manter a configuração atual e procurar pelo novo pior valor de λ_i na configuração S ;
4. Repetir o passo 3 o quanto for necessário (teste de convergência);
 5. Apresentar S_{best} e $C(S_{best})$.

Para poder exemplificar o método EO, tomemos o sistema físico *spin glass* (vidro de *spin*). Uma versão simples de um sistema *spin glass* consiste de uma rede hipercúbica d -dimensional de comprimento L , com uma variável *spin* do tipo Ising $x_i \in \{-1, 1\}$ em cada sítio i , $1 \leq i \leq n (= L^d)$. Trataremos aqui o sistema *spin glass* unidimensional, onde o *spin* é conectado a cada um de seus vizinhos mais próximos j por meio de uma variável de ligação $J_{ij} \in \{-1, 1\}$ determinada aleatoriamente. O espaço de configurações Ω consiste de todas as configurações $S = (x_1, \dots, x_n) \in \Omega$ onde $|\Omega| = 2^n$.

O objetivo aqui é minimizar a função custo, ou hamiltoniana

$$C(S) = H(x) = -\frac{1}{2} \sum J_{ij} x_i x_j. \quad (2.0)$$

Para encontrar a configuração de menor energia, o método EO atribui um *fitness* λ_i (adaptabilidade ou qualidade) para cada variável de *spin* x_i

$$\lambda_i = x_i \left(\frac{1}{2} \sum_j J_{ij} x_j \right), \quad (2.0)$$

fazendo uso da equação (2.6.1) e reescrevendo a equação (2.6.1), temos que

$$C(S) = - \sum_{i=1}^n \lambda_i. \quad (2.0)$$

Diferente da dinâmica dos algoritmos genéticos, no método EO, o *fitness* não caracteriza uma configuração inteira. No caso do sistema *spin glass* o *fitness* é caracterizado por x_{i-1} , x_i e x_{i+1} , que são três variáveis da configuração.

Semelhante ao modelo evolutivo de Bak-Sneppen, que será apresentado na seção 2.7, o método EO evolui no espaço de configurações mudando o estado da variável que possui o pior *fitness* em cada atualização (passo). A vizinhança mais simples $N(S)$ para uma atualização consiste de todas as configurações $S' \in N(S)$ que podem ser obtidas de S através da inversão de um único *spin*. Depois de cada atualização, o ajuste da variável que foi mudada e de todos os seus vizinhos serão recalculados pela equação (2.6.1).

O método EO tem se mostrado bastante eficiente na busca de soluções de problemas de otimização [21, 22], ou seja, quando o método EO tem a liberdade de escolher aleatoriamente entre muitas configurações. O que não é o caso do sistema *spin glass*, que possui uma variável dinâmica que pode assumir apenas dois estados (*spin up* ou *spin down*), em que o método EO promove a inversão de um único *spin*, e em seguida localiza o pior *fitness*. A consequência disso é que as chances do sistema ficar “preso” numa configuração que não minimize a energia do sistema é muito grande, e nesse caso a dinâmica do método EO precisa sofrer uma modificação.

Para evitar que a dinâmica do método EO fique armadilhada, é introduzido um parâmetro τ no algoritmo do método EO. Antes de se fazer uso de τ , é necessário ordenarmos todas as variáveis x_i em uma lista de acordo com o *fitness*, ou seja, é preciso encontrar uma permutação Π das variáveis de rótulo i com

$$\lambda_{\Pi(1)} \leq \lambda_{\Pi(2)} \leq \dots \lambda_{\Pi(n)}, \quad (2.0)$$

de tal modo que, no final do ordenamento teremos a pior variável x_j na posição 1 da lista, $j = \Pi(1)$, e a melhor variável na posição n da lista. E considerando uma distribuição de probabilidade

$$P_k \propto k^{-\tau}, \quad 1 \leq k \leq n, \quad (2.0)$$

para um dado valor do parâmetro τ . A cada atualização, é selecionada uma posição k na lista de acordo com o P_k . Então, escolhemos uma nova configuração (S'), de modo

que a variável x_i com $i = \Pi(k)$ mude seu estado.

O algoritmo EO modificado (com τ), para o caso do sistema *spin glass*, pode ser escrito da seguinte forma:

1. Sortear a variável de ligação $J_{ij} \in \{-1, 1\}$ entre dois sítios consecutivos e então fixar este valor;
2. Iniciar uma configuração $S = \{x_1, \dots, x_n\} \in \Omega$ onde $|\Omega| = 2^n$, atribuir um valor para τ , e fazer $S_{best} := S$;
3. Para a configuração atual;
 - a) Calcular λ_i para cada sítio i ;
 - b) Classificar as variáveis x_i de acordo com o valor (ordem de grandeza) de λ_i , isto é, encontrar uma permutação Π das variáveis de rótulo i com $\lambda_{\Pi(1)} \leq \lambda_{\Pi(2)} \leq \dots \leq \lambda_{\Pi(n)}$.
 - c) De posse das variáveis dinâmicas ordenadas, calcular a distribuição de probabilidade para cada variável de rótulo k .
 - e) Modificar a x_i indicada pela distribuição de probabilidade P_k .
 - f) Aceitar $S := S'$ (incondicionalmente);
 - g) Testar se $C(S) < C(S_{best})$, se a condição for verdadeira, então fazer $S_{best} := S$, caso contrário, manter a atual configuração e procurar o novo pior valor de x_i na configuração S ;
4. Repetir o passo 3 o quanto for necessário (teste de convergência);
5. Apresentar S_{best} e $C(S_{best})$.

Dentre os problemas onde o método EO foi aplicado, podemos citar dois dos mais conhecidos: o problema do grafo bipartido e o do caixeiro viajante.

Problema do grafo bipartido

Um grafo² é dito bipartido quando seu conjunto de vértices, N , pode ser dividido em dois conjuntos N_1 e N_2 , tal que $N_1 \cap N_2 = \emptyset$ e $N_1 \cup N_2 = N$, e que existam somente arestas no grafo ligando algum vértice de N_1 com algum vértice de N_2 e vice-versa. A condição de ligação entre os vértices é a de que dois sítios quaisquer separados por uma distância menor que d estarão sempre ligados.

O problema consiste em encontrar um modo de particionar o conjunto N em dois subconjuntos, cada um com metade do número de elementos do conjunto N , de tal forma que o número de vértices de N_1 conectados aos vértices de N_2 seja o menor possível.

Um algoritmo geral do método EO para o caso do problema de grafos bipartidos pode ser escrito da seguinte forma:

- i) Tendo o conjunto N , escolhemos uma partição inicial de N em dois subconjuntos.
- ii) Classificamos cada ponto i de N de acordo com o valor do *fitness* λ_i , sendo λ_i definido da seguinte forma: $\lambda_i = g_i/(g_i + b_i)$, onde g_i é o número de “boas” ligações conectando o ponto i com outros do mesmo subconjunto, e b_i é o número de ligações “ruins” conectando o ponto i com os do outro subconjunto.
- iii) Atualizamos o ponto de menor *fitness*. A atualização, nesse caso, é feita tomando o ponto de menor *fitness* e trocando-o, de forma aleatória, por um ponto do outro subconjunto.
- iv) Repetimos o passo ii um determinado número de vezes.

Problema do caixeiro viajante

No problema do caixeiro viajante (PCV), existem N cidades, e cada par de cidades i e j são separados por uma distância d_{ij} . O problema consiste na visita do caixeiro por todas as N cidades, percorrendo o menor circuito fechado, ou seja, iniciando na cidade de rotulo i e concluindo o percurso na cidade i , passando por cada cidade uma única vez.

Para o PCV, o método EO pode ser implementado da seguinte maneira. Considere cada cidade i com um grau de liberdade, com um *fitness* baseado nas suas

²Um grafo é uma estrutura abstrata que representa um conjunto de elementos denominados *vértices* (sítio) e suas *arestas* (ligações).

ligações com as cidades vizinhas. Se considerarmos que, no contínuo, é praticamente impossível que duas cidades estejam exatamente a uma mesma distância de uma terceira, podemos tomar como o *fitness* λ_i

$$\lambda_i = \frac{3}{\alpha_i + \beta_i} \quad (2.0)$$

onde α e β são inteiros representando o α -ésimo e β -ésimo vizinhos da cidade i , com $1 \leq \alpha$ e $\beta \leq N - 1$.

Definir um movimento no método EO é mais difícil no caso do PCV do que no problema de particionamento de grafo, uma vez que encontrar um circuito fechado requer um procedimento de atualização que muda muitas ligações a cada passo. Uma maneira possível de ser realizado um movimento no PCV é a recombinação de um par de cidades não adjacentes em um circuito. Existem da ordem de N^2 pares possíveis para promovermos o movimento. Contudo, muitos desses pares levam a resultados ruins. Para o método EO, não é suficiente selecionar duas cidades distantes que possuam *fitness* pobres para a classificação da lista, pois acabaríamos destruindo mais ligações boas do que estaríamos construindo. Ao invés disso, selecionamos uma cidade i de acordo com a classificação n_i dos *fitness*, usando a distribuição de probabilidade $P(n) \sim n^{-\tau}$. Então, substituímos i pelo vizinho mais próximo usando a mesma função distribuição $P(n)$ utilizada para a classificação da lista de *fitness*, mas usando agora uma classificação dos i -vizinhos, onde o primeiro vizinho vai estar na posição $n = 1$, o segundo vizinho na posição $n = 2$ e assim por diante. Feito isso, obtemos um circuito fechado. Esse movimento nos dá a oportunidade de produzir muitas boas conexões vizinhas, e com isso podemos obter um valor de τ ótimo. O candidato a solução dos problemas propostos é a melhor configuração apresentada pelo algoritmo EO ao final de sua execução. Bastando apenas comparar a configuração corrente, durante a execução do algoritmo, com a melhor configuração que é previamente reservada a cada atualização (passo).

2.7 Bak-Sneppen

Inspirado pela visão do processo de evolução biológica proposta por Sewall Wright [31], que introduziu a idéia de espécies evoluindo acima de um relevo rugoso de

fitness com mutações aleatórias e seleção em busca dos maiores *fitness*, Per Bak e Kim Sneppen [32] propuseram um modelo simples de dinâmica extrema, onde esse modelo é um caso particular do modelo proposto por Sewall Wright. A seguir apresentamos o modelo de evolução biológica de Bak-Sneppen.

2.7.1 Definição da Meta-heurística de Bak-Sneppen

Per Bak e Kim Sneppen propuseram um modelo de evolução biológica, simples e robusto, para simular a dinâmica de espécies co-evolutivas, onde a simplicidade do modelo, começa pelo fato de toda uma espécie ser representada por um simples *fitness*. Aqui *fitness* refere-se à capacidade de uma espécie para se adaptar ao meio onde ele está inserido. O *fitness* de cada espécie é afetado por um de outra espécie que vive no mesmo ecossistema, ou seja, o movimento adaptativo de uma espécie pode mudar o *fitness* e o relevo de *fitness* (cenário) das demais espécies em co-evolução. Em modelos teóricos o relevo pode ser definido em termos do modelo *spin glass*, onde o *fitness* depende da configuração dos *spins* e a simples inversão de um *spin* representa um movimento adaptativo, ou mutação. Aceitando uma nova configuração somente se ela aumentar o *fitness*, as espécies evoluem para um *fitness* máximo local.

A estabilidade de cada espécie é caracterizada pela altura da barreira que separa o *fitness* máximo local de um outro melhor. A altura da barreira é uma medida da qualidade do código genético. Quando a barreira é alta, significa que é difícil encontrar uma configuração melhor, acontecendo isso a configuração atual é relativamente estável. No caso do *fitness* ser baixo, a probabilidade de se encontrar uma configuração melhor que a atual é alta, pois a barreira nesse caso é baixa.

O modelo evolutivo de Bak-Sneppen surgiu com a promessa de representar as principais características de um conjunto de espécies, sendo definido e simulado da seguinte maneira:

- i) N espécies são colocadas em uma cadeia unidimensional com condições periódicas de contorno.
- ii) Uma barreira aleatória, B_i , igualmente distribuída entre 0 e 1, é atribuída para cada espécie.

- iii*) A cada passo, a ecologia (configuração do sistema em questão) é atualizada localizando o sítio com a menor barreira e mudando seu valor da barreira.
- iv*) Uma vez atualizado o valor da menor barreira (pior *fitness*), precisamos agora atualizar o valor da barreira do vizinho à esquerda e à direita do sítio localizado no item (*iii*).

Capítulo 3

Criticalidade Auto-Organizada

“Se houvesse uma única verdade,
não seria possível pintar cem telas com o mesmo tema.”

Pablo Picasso

3.1 Introdução

Eram 11h de uma bela manhã de verão em Sarajevo, 28 de junho de 1914, quando o motorista de um automóvel levando dois passageiros dobrou a esquina errada. O carro não deveria sair da rua principal, mas entrou numa passagem estreita e sem saída. Foi um erro comum naquelas ruas abarrotadas e empoeiradas. Mas esse único erro dilaceraria dezenas de milhões de vidas e alteraria o rumo da história mundial. O veículo parou na frente de um estudante bósnio-sérvio de 19 anos, Gavrilo Princip. Como membro da organização terrorista sérvia Mão Negra, Princip não podia acreditar em sua sorte. Tirou uma pistola do bolso e puxou o gatilho duas vezes. Em 30 minutos, o arquiduque austro-húngaro Francisco Ferdinando e Sofia, sua mulher, estavam mortos. Horas depois o tecido político da Europa havia começado a se esgarçar. A Áustria usou o assassinato como desculpa para começar a planejar uma invasão à Sérvia. A Rússia garantiu proteção aos sérvios, enquanto a Alemanha se ofereceu para interceder a favor da Áustria caso a Rússia se envolvesse. Em 30 dias essa reação em cadeia de ameaças e promessas havia atado Áustria, Rússia, Alemanha, França, Grã-Bretanha e Turquia em um nó mortal. Quando a Primeira Guerra Mundial terminou, quatro anos depois, havia 10 milhões de mortos. A Europa mergulhou numa calma tensa que durou 20 anos

e, então, a Segunda Guerra Mundial matou outros milhões de pessoas. Em apenas três décadas, o mundo sofreu dois devastadores cataclismos. E tudo isso devido ao erro de um chofer?

Sobre as causas da Primeira Guerra Mundial existem muitas explicações. Para A. J. P. Taylor, a guerra foi na verdade a consequência de horários de trem, que trancaram as nações numa série de preparativos militares dos quais não havia como escapar. Outros historiadores apontam a agressão alemã e um desejo nacional de expansão. O número de causas específicas propostas não é muito menor do que o número de historiadores que estudaram o assunto. No entanto, todas essas “explicações” históricas vieram bem depois do fato.

Para os historiadores da época, a Primeira Guerra Mundial irrompeu como uma tempestade aterrorizante e inexplicável num céu sem nuvens. “Todas as criaturas do inferno rugiram à vontade sobre o mundo”, escreveu, depois da guerra, o historiador americano Clarence Alvord. “O belo edifício da história, projetado por meus contemporâneos, desmoronou. O significado que nós, historiadores, havíamos lido na história era falso, cruelmente falso.” Alvord e outros historiadores pensaram ter distinguido padrões no passado e estavam convencidos de que a história no futuro se desdobraria suavemente, ao longo de linhas mais ou menos racionais. No entanto, quando a guerra eclodiu, parecia que o futuro estava nas mãos de forças desconcertantes ou mesmo malignas, que armavam na escuridão catástrofes inimagináveis.

Jogo do Imprevisto

É fácil simpatizar com o historiador H. A. L. Fisher, que em 1835 disse: “Homens mais sábios e cultos que eu discerniam na história uma trama, um ritmo, um padrão predeterminado. Essas harmonias não se revelam a mim. Posso ver apenas uma emergência seguindo a outra —e apenas uma regra segura para o historiador: que ele deve reconhecer no desenvolvimento dos destinos humanos o jogo do contingente e do imprevisto”.

Não há nada de novo em admitir que a história sempre zombou das tentativas de prever seu curso. Mas desenvolvimentos recentes tornam possível, se não prever a história, ao menos enxergar por que a história é como é; por que deve ser pontilhada de distúrbios e porque todos os esforços anteriores para perceber padrões de mudança histórica estiveram fadados ao fracasso.

Curiosamente, as respostas a essas questões não se encontram na história, mas na física teórica.

“Todos os grandes feitos e todas as grandes idéias tiveram origens ridículas”, escreveu Albert Camus. Foi então em 1987 que três físicos começaram a jogar um estranho jogo em um escritório do Laboratório Nacional de Brookhaven, no estado de Nova York. Per Bak, Chao Tang e Kurt Wiesenfeld [27] estavam tentando imaginar o que aconteceria se grãos de areia fossem despejados sobre uma mesa (veja a figura 3.1), um grão de cada vez. Os físicos gostam de fazer perguntas aparentemente triviais que, depois de um certo raciocínio, mostram não serem tão triviais assim. Nesse sentido, o jogo da pilha de areia foi um sucesso.

Figura 3.1: Pilha de areia. A inspiração para o conceito da criticalidade auto-organizada.

Na medida em que os grãos vão sendo empilhados, parece claro que uma montanha de areia deva se erguer lentamente em direção ao céu, mas as coisas obviamente não podem continuar assim. Enquanto o monte cresce, seus lados ficam mais íngremes e isso faz com que o próximo grão a cair no monte tenha grande possibilidade de provocar uma avalanche. A areia então escorregaria morro abaixo para uma região mais plana, diminuindo o tamanho da montanha, em vez de aumentá-lo. A consequência será que o monte deve crescer e encolher alternadamente, com uma silhueta flutuante. Bak e seus colegas queriam entender essas flutuações, ou seja, qual é o ritmo típico do monte de areia que cresce e diminui.

Despejar um grão de cada vez é tarefa trabalhosa. Então os cientistas recorreram ao computador, instruindo-o a derrubar “grãos” numa “mesa”, com regras

simples, ditando como os grãos escorreriam pelo monte enquanto ele se tornava mais íngreme. Não é exatamente igual a um monte de areia verdadeiro, contudo o computador tinha uma vantagem espetacular: o monte crescia em segundos, em vez de dias. Era tão fácil o jogo que os três físicos logo estavam na frente dos monitores de seus computadores, obcecados pelos grãos que caíam e observando os resultados. E começaram a ver algumas coisas curiosas.

A primeira grande surpresa foi a resposta para uma pergunta simples: qual é o tamanho típico de uma avalanche? Ou seja, quão grande se pode esperar que seja a próxima avalanche? Os pesquisadores fizeram muitos testes, contando os grãos de milhões de avalanches em milhares de montes de areia, procurando o número típico. O resultado? Bem, não houve resposta, porque simplesmente não há avalanche “típica”. Algumas das avalanches envolviam um único grão de areia; outras, 12, 100 ou 1024. Outras ainda eram desastres que envolviam vários milhões e faziam quase toda a montanha desmoronar. A qualquer momento, literalmente, qualquer coisa poderia estar prestes a acontecer.

Esse é um tipo de imprevisibilidade bastante dramática e possui uma assinatura matemática muito clara e específica, a chamada “lei de potência”. As pequenas avalanches, é claro, ocorrem com maior frequência do que as grandes, mas os físicos descobriram que o modo como as avalanches se tornam menos frequentes na medida em que o monte aumenta segue um padrão simples: cada vez que se duplica o tamanho de uma avalanche, ela se torna duas vezes mais rara. De forma notável, esse padrão se aplica a avalanches de todos os tipos, desde eventos de um único grão até catástrofes completas.

A forma matemática particular de uma lei de potência tem uma implicação sutil, mas profunda —a de que não existe diferença básica no funcionamento das avalanches maiores ou menores. Isso não é comum na natureza. As galinhas nunca põem ovos grandes como bolas de basquete nem pequenos como uma bola de gude: o *design* de uma galinha lhe dá uma tendência intrínseca, a de produzir ovos próximos ao tamanho normal conhecido. Mas, quando se trata de avalanches, a lei de potência prova que não existe tendência: a física é totalmente democrática em relação ao tamanho e naturalmente adequada a produzir avalanches com uma tremenda variedade de dimensões. O padrão da lei de potência implica que não existe uma avalanche normal ou

típica —e não há motivos para se procurar quaisquer causas especiais para as maiores avalanches.

Para descobrir por que esse fenômeno peculiar acontecia em seu jogo de areia, Bak e seus colegas decidiram “pregar uma peça” em seu computador. Imaginaram estar observando um monte de cima —e colorindo-o. Quanto estava baixo e relativamente estável, pintavam-no de verde; quando estava íngreme e “pronto para desabar”, de vermelho.

Então eles viram que, no início, um monte geralmente parece verde, mas com o tempo, a dispersão de pontos vermelhos “perigosos” aumenta até que um esqueleto de instabilidade percorre o monte. Agora um grão de areia que cai sobre o ponto vermelho pode causar deslizamentos em outros pontos vermelhos próximos, e aqui está uma pista. Se a rede vermelha fosse esparsa, com os pontos problemáticos bem separados, então um único grão teria repercussão limitada. Mas, quando os pontos vermelhos se unem, formando “dedos” mais longos, há a possibilidade de avalanches maiores. Finalmente, Bak e seus colegas descobriram, um monte evolui para uma condição em que fica estriado de dedos vermelhos de todos os comprimentos imagináveis, alguns de apenas alguns grãos, outros se estendendo de um lado a outro do monte de areia. Nesse ponto, as conseqüências do próximo grão tornam-se diabolicamente imprevisíveis —tudo depende de onde ele aterrissar.

O estado de hipersensibilidade, semelhante ao da organização do monte de areia, é conhecido como estado crítico. A noção básica é conhecida dos físicos há mais de um século, no entanto sempre foi considerada uma espécie de maluquice teórica —uma condição instável incomum que surge na natureza apenas sob circunstâncias as mais excepcionais. Por exemplo, os átomos de um pedaço de ferro se desorganizam em estado crítico somente quando aquecidos a temperaturas acima de 770°C . No caso do monte de areia, porém, o estado crítico parecia surgir natural e inevitavelmente por meio do acréscimo aleatório de grãos. Isso levou Bak, Tang e Wiesenfeld a ponderar uma possibilidade instigante: se o estado crítico surge de modo tão fácil e inevitável num simples monte de areia, poderia algo semelhante surgir em outro lugar, digamos, na crosta terrestre, durante um incêndio florestal ou em qualquer outro distúrbio imprevisível?

A cidade de Kobe é uma das pérolas do Japão moderno. Um pacífico

“balneário urbano”, ela cresceu rapidamente depois do grande terremoto Kanto de 1923, porque era considerada um porto seguro contra desastres naturais. Os visitantes jamais adivinhariam que sob seus pés forças invisíveis estavam se preparando para liberar uma violência inimaginável. A não ser que estivessem lá às 5h45min de 17 de janeiro de 1995.

Naquele momento, 20 km ao sudeste de Kobe, algumas rochas no fundo do oceano despencaram subitamente. Em si mesmo, isso é um fato corriqueiro — pequenas acomodações da crosta terrestre acontecem todos os dias, com a fricção entre placas continentais. Mas dessa vez o que começou como uma pequena acomodação terminou de outra maneira. O desmoronamento das primeiras rochas provocou uma reação em cadeia. Em apenas 15 segundos a terra se abriu numa linha de cerca de 50 km de comprimento. O terremoto resultante sacudiu o solo com a energia de cem bombas nucleares, fazendo mais de 100 mil edifícios oscilarem ou desabarem. Por fim, a devastação matou 5 mil pessoas, feriu 30 mil e deixou outras 300 mil desabrigadas. Por que o terremoto ocorreu ali e naquele momento? Ninguém sabe.

No magnífico Parque Nacional de Yellowstone, em Wyoming EUA, relâmpagos provocam várias centenas de incêndios todos os anos. A maioria deles queima menos de meio hectare antes de se extinguir. Até 1988, o maior incêndio registrado, em 1986, havia queimado apenas 10 mil hectares. Por isso, quando um raio provocou um pequeno incêndio perto do limite sul do parque, em junho de 1988, ninguém se alarmou muito: ele simplesmente se apagaria sozinho. Mas em meados de agosto cerca de 90 mil hectares do parque tinham queimado ou estavam queimando. As chamas acabariam consumindo 600 mil hectares.

Por algum motivo, um ou vários raios haviam causado um inferno que fez o pior incêndio anterior em Yellowstone parecer um churrasco no quintal. O que o fez ser tão danoso e por que ninguém previu?

Instabilidade

As origens dos terremotos geralmente são buscadas na geofísica, e as dos incêndios florestais, em padrões climáticos e ecológicos. Mas existe uma semelhança intrigante entre eles. Em ambos os casos, ao que parece, a organização de um sistema —o tecido das florestas ou da crosta terrestre— possibilitou que um pequeno choque provocasse uma reação desproporcional. Ambos os sistemas parecem equilibrados no

fio de uma navalha de instabilidade, simplesmente esperando para serem “detonados”.

Há mais de 50 anos, geofísicos descobriram uma lei de potência dos terremotos. Conhecida como lei de Gutenberg-Richter, ela revelou que, assim como no monte de areia, as forças e tensões no interior da crosta terrestre parecem organizadas de maneira extremamente instável, que se assemelha muito ao estado crítico. Se o terremoto A for duas vezes maior que o terremoto B , ele será quatro vezes menos provável de acontecer e não faz diferença quão grande ou pequeno é o tamanho de A .

Mais recente, os geofísicos Bruce Malamud, Gleb Morein e Donald Turcotte, da Universidade Cornell, estudaram as estatísticas de mais de 4 mil incêndios ocorridos em terras do Serviço de Pescas e Vida Natural dos Estados Unidos entre 1986 e 1995. Medindo o tamanho do incêndio pela área que consumiu, eles descobriram que os incêndios florestais seguem uma lei de potência quase exatamente igual a das avalanches do monte de areia. As estatísticas são claras —não existe um incêndio florestal “típico” e simplesmente não há como ter expectativas razoáveis sobre o tamanho do próximo incêndio.

Uma década de pesquisas por centenas de físicos sugere que a organização peculiar e instável do estado crítico parece ser onipresente em nosso mundo. Pesquisadores descobriram a assinatura típica da lei de potência na disseminação de epidemias, em engarrafamentos de trânsito, na extinção em massa de espécies e mesmo nos padrões de transferência de instruções dos gerentes para os trabalhadores de um escritório.

Esqueça a miríade de detalhes complicados desses ambientes: a questão essencial a ser entendida é que por trás de uma série de coisas aparentemente totalmente diferentes parece haver um simples princípio matemático.

Quatro séculos atrás Sir Isaac Newton deflagrou uma revolução científica ao perceber semelhanças entre coisas que até então pareciam (e eram encaradas como) diferentes. Newton notou que uma maçã cai no solo da mesma forma que a Terra se move ao redor do Sol; que tanto a Terra como a maçã estão na categoria das coisas que se movem sob a força da gravidade. Antes de Newton os acontecimentos na Terra e nos céus eram totalmente incomparáveis entre si. Depois dele, os movimentos de uma maçã, de uma flecha ou da Lua foram considerados instâncias de um processo mais profundo. E nosso modo de ver o mundo se modificou para sempre.

Hoje, algo semelhante pode estar acontecendo, com o estudo do estado

crítico. Uma das demonstrações mais notáveis de como o estado crítico afeta nossas vida está nos mercados financeiros. Em 19 de outubro 1987, a Segunda-Feira Negra, as ações da Bolsa de Valores de Nova York desvalorizaram-se mais de 20% em um dia. Os economistas não entendiam por que isso acontecera. Alguns afirmaram que foi culpa das transações via computador e que, quando o problema fosse resolvido, isso não mais poderia ocorrer. Mas pesquisas matemáticas recentes contam uma história menos reconfortante. Segundo o que foi apurado, os distúrbios repentinos estão longe de ser pouco improváveis. Na verdade eles podem até mesmo ser considerados inevitáveis.

Em 1998, uma equipe de pesquisadores da Universidade de Boston analisou oscilações no índice de 500 ações da Standard & Poor. Com base nos preços das ações de 500 grandes empresas da Bolsa de Nova York, esse índice é um referencial para todo o mercado. Stanley e seus colaboradores estudaram os preços registrados a cada 15 segundos durante 13 anos, de 1984 a 1996 —um incrível volume de 4,5 milhões de pontos de informação.

O que eles descobriram foi um perfeito padrão de lei de potência: as mudanças de preço se tornam aproximadamente 16 vezes menos prováveis a cada vez que se dobra o tamanho. Isso significa que não há motivos para acreditar que as maiores oscilações para cima ou para baixo de alguma maneira não possam se repetir —apenas que são relativamente pouco freqüentes. A idéia de que a Segunda-Feira Negra precisa de uma explicação especial não se mantém. Contrariando nossa intuição, mesmo as fatídicas transações daquele dia foram simplesmente negócios como o de um dia qualquer.

Decisões individuais

Mas como, poderíamos perguntar, esse padrão pode funcionar se o mercado é feito de milhares de pessoas tomando decisões individuais? Certamente é uma surpresa. No entanto, as mesmas pistas matemáticas parecem se encontrar em várias outras áreas de atuação humana.

Considere, por exemplo, o crescimento das cidades. Uma vez que as pessoas se mudam de um lugar para o outro por motivos bastantes pessoais, é tentador desistir de encontrar algum tipo de regularidade matemática na expansão das cidades. Contudo, usando informações das 2400 maiores cidades dos Estados Unidos, pesquisadores recentemente contaram quantas cidades existem com populações de 100 mil, 200

mil, 300 mil e assim por diante, até chegar a Nova York que é a única cidade a ter 9 milhões.

Em outras palavras, eles fizeram com as cidades o mesmo que Gutenberg e Richter com os terremotos. E encontraram um padrão semelhante. Para cada cidade como Atlanta —com 4 milhões de habitantes— existem quatro cidades com a metade dessa população. Cincinnati é uma delas, e para cada Cincinnati existem quatro cidades com a metade desse tamanho, e assim por diante. O padrão geométrico perfeito continua decrescendo até as cidades de apenas 10 mil habitantes aproximadamente.

Assim sendo, talvez haja até mesmo uma lei de potência para as pessoas. Ela não pode dizer, é claro, o que uma pessoa fará, mas talvez possa dizer que tipo de padrões são prováveis entre milhões.

É assim com as guerras. Na década de 20, o físico britânico Lewis Richardson realizou um estudo de 82 guerras que ocorreram entre 1820 e 1929. Para definir o tamanho de uma guerra Richardson escolheu fazer a estatística em cima de uma informação simples e sombria —o número de mortos— e descobriu que as guerras, assim como os terremotos e incêndios florestais, seguem uma lei de potência.

Em 1973, Jack Levy, da Universidade de Kentucky, ampliou a pesquisa de Richardson e incluiu a guerra da Liga de Veneza, em 1495, até a Guerra do Vietnã, em 1975. Como a população mundial varia com o tempo, Levy modificou ligeiramente a prescrição de Richardson e tomou como “tamanho” de uma guerra a porcentagem da população mundial morta. Mais uma vez, descobriu um padrão inconfundível de lei de potência —no qual, para lembrar de onde partimos, a Primeira Guerra Mundial foi uma das maiores.

Ninguém discutiria que as grandes guerras são incomensuravelmente mais terríveis em suas conseqüências do que as pequenas. Mas esses padrões da lei de potência implicam que os maiores conflitos não se diferenciam dos demais em termo das condições que os geraram: eles talvez simplesmente não precisem de condições especiais para começar.

Não existe maneira instrutiva de explicar por que uma guerra é grande, e outra, pequena. Mas o estado crítico explica, sim, como é possível que explosões de violência repentinas surjam aparentemente do nada.

O que torna um monte de areia especialmente interessante para os físicos é

que as forças envolvidas não encontram a liberação imediata. Derrame gotas de água em um balde e cada uma desaparecerá rapidamente no resto da água. Conseqüentemente, nada se ergue e a história da água é realmente enfadonha —na verdade não há história para contar.

No monte de areia, porém, a tensão se acumula lentamente para ser liberada em súbitas avalanches espontâneas. Assim pode-se dizer que na areia a história flui de maneira importante. De uma perspectiva abstrata, um monte de areia insinua, num cenário simples, a essência fundamental do processo histórico —o potencial dos acidentes de ocorrer em um local e assim exercer uma influência permanente sobre o futuro. E, se esse monte é um dos mais simples de todos os processos históricos concebíveis, podemos muito bem esperar descobrir algumas de suas características básicas refletidas em ambientes mais complexos.

Diversos historiadores estão começando a ver que a física pode oferecer um novo vocabulário conceitual adequado à sua tarefa. Como disse recentemente o historiador Niall Ferguson, da Universidade de Oxford, “um grande número de filósofos da história que discutiu no século XX se a história é uma “ciência” parece não ter percebido que sua noção de ciência é uma antiquada relíquia do século XIX... Pois a característica marcante de um grande número de avanços nas ciências naturais é o fato de terem um caráter fundamentalmente histórico”.

A matemática das modificações

Por isso as idéias delineadas aqui podem conter o início de uma abordagem matemática das mudanças culturais e históricas. E então surge a pergunta: “E para que serve isso?”, que muitos de nós já ouviu, se é que já não tenha até mesmo formulado ao menos uma vez.

No mundo antigo, as pessoas geralmente atribuíam grandes eventos à ação dos deuses. Ainda hoje ficamos chocados com as guerras e as revoluções, apesar de as enfrentarmos sem os confortos metafísicos que eram permitidos aos antigos por sua crença nos deuses. Sabemos que a história é feita por indivíduos agindo como indivíduos e que a capacidade tanto para guerra como para a paz vive em cada pessoa e que, de certa forma, no misterioso oceano de atividade individual grandes desastres freqüentemente se erguem e nos assolam.

Ninguém se sentirá mais seguro, muito menos feliz ao saber que esses de-

sastres talvez sejam inevitáveis, mas pelo menos é um passo em direção a uma maior compreensão admitir que o rumo tumultuoso da humanidade não precisa ser o produto de uma profunda loucura humana maligna, mas da natureza humana comum a da simples matemática.

Em “Guerra e Paz”, Tolstói perguntou: “Porque acontecem as guerras e as revoluções?”. Talvez não seja demais supor que o que os cientistas estão aprendendo à sua própria maneira, com sua tendência à supersimplificação e à abstração, um dia talvez permita que os historiadores melhorem sua resposta: “Não sabemos. Só sabemos que para produzir uma ou outra os homens se formam em certas combinações de que todos participamos; e dizemos que essa é a natureza dos homens, que essa é a lei”.

3.2 Definição de Criticalidade Auto-Organizada

O estudo de dinâmicas fora do equilíbrio e sistemas heterogêneos, como o *spin-glass*, tem sido útil na divulgação do conceito de sistemas complexos e da importância de abordagem sistemática, onde sistemas com um grande número de partes interagem mutuamente, trocando energia, matéria ou informação com o meio (vizinhança), auto-organizam suas estruturas internas e dinâmicas com novas e, algumas vezes, surpreendentes propriedades macroscópicas.

A principal propriedade dos sistemas complexos reside na possibilidade de ocorrer um ação coletiva e coerente em grande escala, produzindo estrutura (padrões) interessantes, um exemplo muito curioso são as manchas do leopardo, resultado de repetidas interações não-lineares entre componentes que constituem seu pêlo, levando assim o estudo do sistema como um todo a ser mais interessante do que o estudo de uma ou outra parte em separado.

O termo “*Self-organized criticality*” (SOC) ou criticalidade auto-organizada, como foi traduzido para o português, refere-se à tendência de um sistema dinâmico a organizar-se num estado estacionário, sem qualquer parâmetro externo de ajuste. Outras propriedades importantes do estado crítico auto-organizado são: existência de um longo período transiente, as correlações espacial e temporal exibem escala tipo lei de potência e grandes instabilidades denominadas avalanches. Neste caso, longos períodos de quiescência são seguidos de frenética atividade —a isso chamamos de equilíbrio

entrecortado.

A criticalidade auto-organizada trata grandes eventos, assim como terremotos, furacões, incêndios florestais, como sendo uma organização não-linear natural dos sistemas complexos.

3.3 Modelo da Pilha de Areia

O conceito de criticalidade auto-organizada, como acabamos de ver, foi introduzido por Per Bak et. al. [28] em 1987 usando como exemplo uma pilha de areia “teórica”, com uma distribuição inicial arbitrária, construída adicionando lentamente um grão de areia após o outro sobre uma mesa produzindo uma pilha de areia de forma cônica. No estado de equilíbrio pontuado, a superfície da pilha de areia possui, na média, um ângulo constante com o plano da mesa, conhecido como ângulo de repouso. A adição de cada grão de areia resulta em alguma atividade na superfície da pilha de areia. No regime estacionário, ocorrem avalanches de todos os tamanhos.

Experimentos reais com pilha de areia feitos em laboratório [29, 30] não apresentaram evidências de criticalidade devido a efeito de inércia, ou seja, o grão da areia encontra dificuldade para superar o ângulo de repouso. Contudo, isso pode ser facilmente contornado, bastando que seja utilizado grão de arroz, ao invés de areia, uma vez que grãos de arroz têm uma forma alongada e com isso o efeito de inércia é minimizado.

3.4 Modelo Evolutivo de Bak-Sneppen

Foi com base em sistemas complexos, que Per Bak et. al. [32] demonstraram que um autômato celular simulando uma sociedade de organismos vivos, opera num estado crítico quando conduzido por mutações aleatórias e então as especulações sobre a vida foram inevitáveis, surgindo a questão que estudiosos das mais variadas áreas tem tentado responder: a vida é um estado crítico auto-organizado?

A distância entre a descrição de matéria inerte e a vida biológica parece ser enorme, mas pode não ser. E a razão para isso, talvez resida no fato de que os mesmos

princípios que governam a organização da complexidade na geofísica também governam a evolução da vida. Isso parece ser coerente, uma vez que a natureza não iria inventar de um momento para o outro, um novo princípio organizacional.

Em um outro trabalho, Per Bak e Kim Sneppen [33] estudaram um modelo de evolução biológica de espécies co-evolucionárias. Os resultados obtidos, podem ser observados nas figuras 3.2 e 3.3. A figura 3.2 mostra a medida da distribuição de distâncias $C(X)$, entre sucessivas mutações, onde a distribuição de distâncias obedece a lei de potência, $C(X) = X^{-3,15 \pm 0,05}$, mostrando que o sistema é crítico. Enquanto

Figura 3.2: Distribuição de distâncias entre sucessivas mutações.

a figura 3.3 mostra a medida da distribuição de avalanches $P(S)$, regida pela lei de potência, $P(S) = S^{-0,9 \pm 0,1}$, indicando avalanches de todos os tamanhos, onde avalanche é definida pelo número de atividades sucessivas abaixo do valor de barreira [33] $B = 0,65$.

Figura 3.3: Distribuição de avalanches no estado crítico.

Capítulo 4

Modelo de Relógio Quiral de p -estados

“Não diga às pessoas como fazer as coisas.

Diga-lhes o que deve ser feito e elas
surpreenderão você com sua engenhosidade.”

George Patton

4.1 Introdução

O modelo de relógio quiral de p -estados (MRQ p), no qual o *spin* do tipo Ising é substituído por uma variável relógio que pode assumir qualquer uma das $p \geq 3$ orientações igualmente espaçadas num círculo unitário (veja na figura 4.1 o caso de 3 estados), foi introduzido por Ostlund [2] e Huse [3] em 1981. Esse é um modelo com interação de somente primeiros vizinhos que exhibe fases espacialmente moduladas, fenômeno que é observado em sistemas magnéticos. As fases moduladas no modelo de relógio quiral surgem da competição induzida pela anisotropia da hamiltoniana, produzindo desde simples fases comensuráveis até fases instáveis ou incomensuráveis. E por esse motivo, o modelo de relógio quiral, tem atraído um significativo esforço teórico.

O MRQ p é muito difícil de ser tratado tamanha é a dificuldade que nenhuma técnica de análise foi capaz de revelar completamente o diagrama de fase [23]. Para o modelo de relógio quiral tridimensional, o diagrama de fase já foi construído com o auxílio de numerosas técnicas. Dentre as mais conhecidas estão as técnicas de grupo de

Figura 4.1: Visão frontal de uma rede de *spins*, do modelo de relógio quiral, para o caso $p = 3$.

renormalização [3], teoria de campo médio [24], simulação de Monte Carlo [25]. Porém, as técnicas não concordam sequer no aspecto qualitativo do diagrama de fases.

4.2 Modelo de Relógio Quiral de p -estados

O modelo de relógio quiral de p -estados unidimensional, apresenta competição entre o campo magnético aplicado, que tenta alinhar os *spins*, e a quiralidade, que tenta girar os *spins*, dando origem a um rico diagrama de estados fundamentais no espaço dos parâmetros, onde a hamiltoniana é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta \right) \right\} + h \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_i - 1}{p} \right) \right\} \right] \right] \quad (4.1)$$

onde p é o número de estados do sistema, $S_i = 1, \dots, p$ é a variável *spin* no sítio i , Δ é a quiralidade e h é o campo magnético. Por argumentos de simetria, Δ e h estão restritos aos intervalos $[0, \frac{1}{2}]$ e $[0, \infty]$, respectivamente.

Em sua dissertação de mestrado Nelson [34] fez uso da técnica do potencial efetivo (veja Apêndice A), para obter os diagramas de fases do estado fundamental do modelo de relógio quiral. Fazendo uso da dinâmica de Bak-Sneppen, levemente modificada, reobtivemos os diagramas de fases do modelo.

4.3 Teorema de Perron-Frobenius

Dada uma matriz $A_{n,n}$ ($N < \infty$) com todas as componentes a_{ij} positivos definidos, $a_{ij} > 0$ para todo i, j , existe um autovalor máximo que é:

- 1) real e positivo;
- 2) não-degenerado;
- 3) maior do que qualquer valor absoluto de qualquer outro autovalor.

Tomando a matriz transferência $\mathbf{A}_{3,3}$ do modelo relógio quirral, no caso de $p = 3$. Onde $\mathbf{A}_{3,3}$ tem a seguinte forma:

$$\mathbf{A}_{i,j} = \exp \left[-\beta \left\{ 1 - \cos \left(\frac{2\pi}{3} (i - j - \Delta) \right) \right\} + \frac{h}{2} \left\{ 1 - \cos \left(\frac{2\pi}{3} i \right) \right\} + \frac{h}{2} \left\{ 1 - \cos \left(\frac{2\pi}{3} j \right) \right\} \right]$$

onde i e j estão fazendo o papel da variável de estado, temos que

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a^{-2} c^2 & a b^{-1} c^2 & a b c \\ a b c^2 & a^{-2} c^2 & a b^{-1} c \\ a b^{-1} c & a b c & a^{-2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{onde: } a &= \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \cos \Delta \right\} \\ b &= \exp \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2} \beta \sin \Delta \right\} \\ c &= \exp \left\{ -\frac{3}{4} \beta h \right\} \end{aligned}$$

Para o caso unidimensional do modelo de relógio quirral, a matriz de transferência $\mathbf{A}$ satisfaz as exigências do teorema de *Perron-Frobenius*. Conseqüentemente, podemos afirmar que não existe transição de fase a temperaturas finitas. O que não nos impede de calcular os diagramas de fases para o estado fundamental (em $T = 0$).

4.4 Modelo de Bak-Sneppen com sorteio

Durante um período de intensa revisão bibliográfica sobre o modelo de relógio quirral e dos métodos utilizados para o estudo de suas propriedades, nos deparamos com o artigo do Per Bak e Kim Sneppen [33]. O interesse por esse artigo surgiu inicialmente pelo fato dele apresentar o algoritmo de um método de otimização bastante simples, e a princípio muito eficiente. Sendo assim, depois de estudar o artigo, nos

propusemos a fazer uso da dinâmica apresentada no artigo para estudarmos o modelo de relógio quirral. Nosso primeiro objetivo foi o de escrever um código (usando a linguagem de programação fortran) para “levantar” os diagramas de fases do MRQp, os quais serão apresentados na seção 4.5 deste capítulo. E para isso, o algoritmo original de Bak-Sneppen (BS) foi mudado em dois pontos.

- 1⁰ A primeira mudança no algoritmo BS foi feita no momento em que a dinâmica BS, depois de localizar o sítio i do sistema que possui o menor valor de *fitness*, realiza a atualização da pior variável e seu primeiro vizinho da esquerda e da direita. A mudança consiste em, uma vez encontrado o sítio i que possui o menor (pior) *fitness*, mudarmos o seu estado por um outro que não o mesmo possuído por ele neste momento (passo), enquanto os sítios vizinhos, $i - 1$ e $i + 1$, têm seus estados modificados, mas sem a restrição imposta ao sítio i .
- 2⁰ E a segunda mudança, leva em conta o fato de que no modelo evolutivo de Bak-Sneppen as variáveis eram valores contínuos, entre 0 e 1, enquanto no caso do modelo de relógio quirral as variáveis assumem valores discretos, entre 1 e p , com isso a possibilidade de encontramos *fitness* degenerados é muito grande. A mudança nesse caso consiste em, existindo mais de um sítio que apresente o pior valor de *fitness*, criamos uma lista onde são colocados todos sítios de pior *fitness* e então sortearmos de maneira aleatória o sítio que terá seu estado alterado, assim como o de seus primeiros vizinhos, respeitando é claro o ítem 1⁰.

Antes de passarmos para a apresentação do algoritmo, observamos que o *fitness* usado na obtenção dos diagramas de fases foi o seguinte:

$$\begin{aligned}
 -\lambda_i = & \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[2\pi \left(\frac{S_i - S_{i-1}}{p} - \Delta \right) \right] \right\} + \\
 & \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \left[2\pi \left(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta \right) \right] \right\} + \\
 & h \left\{ 1 - \cos \left[2\pi \left(\frac{S_i - 1}{p} \right) \right] \right\}
 \end{aligned}
 \tag{4.-2}$$

onde, temos que

$$H = - \sum_{i=1}^N \lambda_i \quad (4.-1)$$

As mudanças realizadas na dinâmica BS produziram uma nova dinâmica, a qual batizamos de *Bak-Sneppen com sorteio* (BSS). É importante dizer que, fazemos uso de condição periódica de contorno neste e nos próximos algoritmos apresentados nessa dissertação. Abaixo vemos, o algoritmo da dinâmica BBS que foi usado na tarefa de “levantar” o diagrama de fases do estado fundamental.

Algoritmo de Bak-Sneppen com sorteio (BSS)

- a) Atribuímos um valor inicial para quiralidade (Δ);
- b) Atribuímos um valor inicial campo magnético externo (h);
 - i) Sorteamos para todos os sítios da rede de tamanho N , uma variável $spin S_i$;
 - ii) Calculamos λ_i para cada sítio i e guardamos a configuração corrente S . E a soma dos λ_i guardamos em λ_{total} ;
 - iii) Encontramos qual o menor valor de λ_i . Reservar os λ_i 's degenerados em uma lista;
 - iv) Dada a lista de λ 's degenerados, sortear aleatoriamente um λ_i ;
 - v) Sabendo qual o sítio i que possui o “pior” $fitness$, sorteamos uma nova variável $spin$ para este sítio i , assim como para seu primeiro vizinho da esquerda, sítio $i - 1$ e da direita, sítio $i + 1$;
 - vi) Calculamos novamente a soma dos λ_i 's e guardamos o valor em λ'_{total} ;
 - vii) Comparamos o λ'_{total} com o λ_{total} . Se λ'_{total} for melhor do que λ_{total} , fazemos $\lambda_{total} = \lambda'_{total}$.
 - viii) Depois de um tempo de espera (número de passos suficiente que não obtemos um λ'_{total} melhor do que o λ_{total}), tomamos a configuração corrente como sendo a que minimiza a energia total do sistema para o valor corrente de h e Δ , e guardamos o valor de λ'_{total}/N (energia/ $spin$).

- c) Incrementamos o valor de h ;
- d) Incrementamos o valor de Δ ;
- e) Uma vez percorrido todo o plano Δ - h , e de posse dos pontos que minimizam o sistema, obtemos o diagrama de fase.

4.5 Diagramas de fases

4.5.1 Fronteiras Numéricas

Para a construção dos diagramas de fases, fazemos uso do estado do *spin*, que é determinado pelo ângulo θ_i , dado por

$$\theta_i = \frac{2\pi}{p} S_i, \quad (4.0)$$

com $S_i = 1, 2, 3, \dots, p$, como podemos ver na figura 4.2 para o caso de $p = 3$. Onde θ é o ângulo formado entre o *spin* e o campo magnético h . O sistema, modelo de relógio quiral, está no estado fundamental quando os sítios de sua rede estão sendo ocupados por *spins* que possuam estados que minimiza a energia do sistema.

Figura 4.2: Esboço de uma rede, do modelo de relógio quiral, na presença de um campo magnético.

Os diagramas de fases, que apresentaremos agora, têm suas fases rotuladas da seguinte maneira: um número seguido de uma letra, onde o número indica o período do estado fundamental e a letra distingue fases de mesmo período e conjuntos de estados fundamentais diferentes.

Nos diagramas de fases fizemos uso de uma notação compacta, para melhor representar estados fundamentais periódicos. Os estados fundamentais periódicos serão representados por $\langle S_1 S_2 S_3 \dots S_Q \rangle$. Um estado fundamental $\{S_1 S_2 S_3 \dots S_N\}$ é periódico se existir um padrão de repetição de uma sequência de Q estados de *spin* $\{S_1 S_2 S_3 \dots S_Q\}$.

Caso $p=2$

$$\begin{aligned} 1A &= \langle 1 \rangle \\ 2A &= \langle 1 2 \rangle \end{aligned}$$

Figura 4.3: Diagrama de fases do modelo de relógio quirál, para o caso de $p=2$.

Para o caso onde $p = 2$, existem apenas duas fases, a ferro magnética $\langle 1 \rangle$, como todos os *spins* paralelos ao campo magnético, e a antiferromagnética $\langle 1 2 \rangle$ com os *spins* antiparalelos.

Caso $p=3$

$$1A = \langle 1 \rangle$$

$$2A = \langle 12 \rangle, \langle 13 \rangle$$

$$3A = \langle 123 \rangle$$

Figura 4.4: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p=3$.

Caso $p=4$

$$1A = \langle 1 \rangle$$

$$2A = \langle 13 \rangle, \langle 24 \rangle$$

$$3A = \langle 124 \rangle$$

$$4A = \langle 1234 \rangle$$

Figura 4.5: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p=4$.

Caso $p=5$

1A	=	$\langle 1 \rangle$	4A	=	$\langle 1235 \rangle, \langle 1245 \rangle$
2A	=	$\langle 25 \rangle$	5A	=	$\langle 13524 \rangle$
3A	=	$\langle 124 \rangle, \langle 135 \rangle$	5B	=	$\langle 12345 \rangle$
3B	=	$\langle 125 \rangle$

Figura 4.6: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p=5$.Caso $p=6$

1A	=	$\langle 1 \rangle$	3C	=	$\langle 126 \rangle$
2A	=	$\langle 14 \rangle, \langle 25 \rangle, \langle 36 \rangle$	4A	=	$\langle 1246 \rangle$
2B	=	$\langle 26 \rangle$	5A	=	$\langle 13625 \rangle$
3A	=	$\langle 125 \rangle, \langle 136 \rangle$	5B	=	$\langle 12356 \rangle$
3B	=	$\langle 135 \rangle, \langle 246 \rangle$	6A	=	$\langle 123456 \rangle$

Figura 4.7: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p=6$.

É importante dizer que os diagramas de fases obtidos com nosso método, baseado no modelo evolutivo de Bak-Sneppen, estão mais do que de acordo, são idênticos aos diagramas obtidos por Nelson [34].

Vale lembrar que, nada nos impede de obter diagramas de ordem maior, $p > 6$, uma vez que os diagramas de fases para os casos $p = 2$, $p = 3$, $p = 4$, $p = 5$ e $p = 6$ foram obtidos com o intuito de verificar a eficiência do dinâmica Bak-Sneppen (assunto central do capítulo 5).

4.5.2 Fronteiras Analíticas

Além das fronteiras obtidas numericamente, conseguimos obter, também, as fronteiras analiticamente do modelo de relógio quiral de p -estados. O procedimento é simples, dado o valor de p , igualamos duas a duas as equações de energia das fases. O motivo pelo qual podemos igualar as equações de energia de duas fases distintas é o fato de que a energia é uma função de Δ e h , que não possui singularidades. A seguir, vemos o diagrama de fases para o caso $p = 3$ e $p = 4$ (detalhes de como foram obtidos os diagramas do MRQ p para $p = 3$ e $p = 4$ são dados no apêndice B).

Diagrama do MRQ3

Figura 4.8: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p = 3$, obtido analiticamente.

Diagrama do MRQ4

Figura 4.9: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral, para o caso de $p = 4$, obtido analiticamente.

onde $x = \Delta/2\pi$ tanto no diagrama do MRQ3, quanto no MRQ4.

4.6 Número de Mínimos Locais

4.6.1 Definição da Heurística do Número de Mínimos Locais

Uma configuração S é dita mínimo local, por exemplo, uma configuração do MRQ p , quando dado uma configuração S que possua uma energia E , alteramos um estado de S gerando um S' com uma energia $E' > E$.

Apresentaremos agora, um algoritmo heurístico, simples, mas muito interessante. O algoritmo que veremos a seguir, nos dá a informação do número de mínimos locais.

- i) Sorteamos para todos os sítios da rede de tamanho N , uma variável *spin* S_i ;
- ii) Calculamos o *fitness* λ_i para cada sítio i e guardar a configuração corrente e o valor da soma dos λ_i em λ_{total} ;

- iii) De forma sistemática, vamos de sítio em sítio, modificando o estado do *spin* de maneira seqüencial de todos os N sítios, até encontrarmos as configurações que sejam mínimos locais;
- iv) Caso haja mais de uma configuração que seja mínimo local, contamos quantas são e as guardamos. Além do número de mínimos locais, nós também calculamos o tempo de busca médio para o encontrar os mínimos locais e a energia por *spin*.

Figura 4.10: Tempo de busca do estado fundamental *vs.* número de sítios, para o caso $p = 3$, fase 3A e valores de $\Delta = 0,35$ e $h = 0,8$.

Podemos identificar facilmente na figura 4.10 o período da fase, apenas olhando para os picos no tempo de busca, uma vez que eles representam o período e os múltiplos do período da fase.

Figura 4.11: Energia por *spin* vs. número de sítios, para o caso $p = 3$, fase 3A e valores de $\Delta = 0,35$ e $h = 0,8$.

Na figura 4.11, observamos que a medida que o número de sítios N aumenta, a energia por *spin* se aproxima cada vez mais da energia por *spin* do estado fundamental, enquanto que para N múltiplo de 3, período da fase, a energia por *spin* coincide exatamente com a do estado fundamental.

Figura 4.12: Tempo de busca do estado fundamental vs. número de sítios, para o caso $p=4$, fase 4A e valores de $\Delta = 0,26$ e $h = 0,4$.

Assim como vimos na figura 4.10, a figura 4.12 também possui a informação do período da fase, através de rápida verificação dos picos no tempo de busca.

Figura 4.13: Energia por *spin* vs. número de sítios, para o caso $p = 4$, fase $4A$ e valores de $\Delta = 0,26$ e $h = 0,4$.

Capítulo 5

Otimização, Ruído e Criticalidade Auto-Organizada

“Nunca diga às pessoas como fazer as coisas.

Diga-lhes o que deve ser feito
e elas surpreenderão você com sua engenhosidade.”

George Patton

5.1 Introdução

Apresentamos neste capítulo, uma dinâmica do tipo Bak-Sneppen, que será aplicado ao modelo de relógio quiral, um sistema discreto de *spins*. A dinâmica de Bak-Sneppen é uma boa ferramenta no estudo de propriedades de sistema contínuos [32]. Surgiu então a seguinte pergunta: como a dinâmica do modelo evolutivo de Bak-Sneppen se comportaria quando várias de suas espécies possuem a mesma capacidade de adaptação e sobrevivência no meio em que vivem, ou seja, melhor valor de *fitness*?

Tendo 50% do problema, que consiste em ter um problema a ser resolvido, nos dedicamos a buscar a solução do problema, ou seja, os outros 50% do problema.

5.2 Dinâmicas Bak-Sneppen

Para apresentarmos nossas dinâmicas, escolhemos o modelo de relógio quiral unidimensional, modelo que foi apresentado no capítulo 4 e que é nosso sistema de

teste. A hamiltoniana do modelo de relógio quirral é da forma

$$H = \sum_{i=1}^N \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta \right) \right\} + h \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_i - 1}{p} \right) \right\} \right] \right] \quad (5.1)$$

O diagrama de fases do modelo de relógio quirral, para o caso $p = 3$, que vemos na figura 5.1 com 3 regiões distintas e 1 ponto comum entre as regiões, foi nosso principal objeto de estudo. A notação $\langle 1 \rangle$, $\langle 12-13 \rangle$ e $\langle 123 \rangle$ utilizada aqui, tem respectivamente períodos 1, 2 e 3. A região I, $\langle 12-13 \rangle$, é superdegenerada, ou seja, a seqüência de estados de *spins* 12 pode ser igualmente seguida por 12 ou 13. E neste caso, temos que a degenerescência da região cresce exponencialmente como uma função do tamanho da rede.

Figura 5.1: Diagrama de fases do modelo de relógio quirral para o caso de $p=3$.

Precisamos agora reescrever a equação (5.1) em função de *fitness* λ_i

$$H = - \sum_{i=1}^N \lambda_i \quad (5.2)$$

onde o *fitness* λ_i , escolhido tem a seguinte forma

$$\begin{aligned}
 -\lambda_i = & \frac{1}{2} \{1 - \cos[2\pi(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta)]\} + \\
 & \frac{1}{2} \{1 - \cos[2\pi(\frac{S_i - S_{i-1}}{p} - \Delta)]\} + \\
 & \frac{1}{3} h \{1 - \cos[2\pi(\frac{S_{i+1} - 1}{p})]\} + \\
 & \frac{1}{3} h \{1 - \cos[2\pi(\frac{S_i - 1}{p})]\} + \\
 & \frac{1}{3} h \{1 - \cos[2\pi(\frac{S_{i-1} - 1}{p})]\}
 \end{aligned} \tag{5.-1}$$

A Escolha do *Fitness* — Uma Arte Arbitrária

Depois de algumas tentativas para estabelecer o *fitness*, descobrimos que existe uma certa arbitrariedade, uma arte, na escolha de sua forma. Por exemplo, poderíamos ter escolhido dos pré-fatores que vemos na equação (5.-1) um pré-fator $\frac{1}{4}$ para o campo magnético nos sítios $i + 1$ e $i - 1$ e o pré-fator $\frac{1}{2}$ para o sítio i . Sendo necessário apenas que, a soma do campo magnético nos sítios $i - 1$, i e $i + 1$ seja 1. Devido a liberdade de escolha, temos que diferentes formas de *fitness* podem levar a diferentes valores de quantidades físicas, como por exemplo, a energia média no estado estacionário. O *fitness* definido na equação (5.-1) foi a nossa melhor tentativa, uma vez que com ele obtivemos os melhores resultados (menores valores) para energia média.

De posse do *fitness*, e esclarecimento do porque o escolhemos desta forma, podemos agora apresentar do nosso algoritmo, que consiste do seguinte:

Algoritmo de Bak-Sneppen com sorteio (BSS)

- a) Sorteamos para os i sítios da rede de tamanho N , uma variável *spin* S_i ;
- ii) Calculamos λ_i para cada sítio i , e encontramos o menor (pior) valor de *fitness* λ_j ;
- iii) Sabendo qual o sítio j que possui o pior *fitness*, sorteamos uma nova variável *spin* para este sítio j , assim como para seu primeiro vizinho da esquerda, sítio $j - 1$ e da direita, sítio $j + 1$. Então, por nossa dinâmica envolver 3 *spins* e devido a forma do nosso *fitness*, 5 *fitnesses* consecutivos, sendo eles $j - 2$, $j - 1$, j , $j + 1$ e $j + 2$, são afetados e conseqüentemente serão alterados.

b) Procurar o pior valor de *fitness* até critério de parada.

Depois de alguns testes, pudemos constatar que mesmo para uma rede pequena, a dinâmica BSS tem uma variabilidade muito pequena do *fitness*. Entenderemos melhor o que significa essa baixa variabilidade com o seguinte exemplo: pensando no modelo de relógio quiral com $p = 3$ estados (com h e Δ fixos), é fácil constatar que existem 27 valores de *fitness* possíveis, onde alguns deles ainda acabam sendo valores degenerados. Como ainda veremos nesse capítulo, a dinâmica BSS não é SOC nem do ponto de vista de correlação espacial e nem da correlação temporal.

Uma vez identificado que a pequena variedade de *fitness* é o responsável pela ausência de um estado crítico auto-organizado, é introduzido um ruído branco da forma:

$$S'_i = S_i + \eta(1 - 2r) \quad (5.0)$$

no estado de configuração do *spin* do modelo de relógio quiral, onde $r \in [0, 1]$ é um número aleatório gerado por uma distribuição uniforme. Escolhendo um ruído η suficientemente pequeno as propriedades físicas que nos são relevantes não serão afetadas. Para a dissertação, utilizamos um $\eta = 10^{-3}$.

Com esse artifício, de inserir um ruído, λ passa a ser uma variável contínua dentro de um intervalo $\Delta\lambda$ controlada pelo ruído η , a quiralidade Δ e o campo magnético h . A essa nova dinâmica damos o nome de Bak-Sneppen com ruído (BSR). O objetivo maior desse capítulo é o de comparar a eficiência das dinâmicas EO, BSS e BSR.

Usando a mesma definição de *fitness* (eq. (5.-1) nos algoritmos EO, BSS e BSR, simulamos cada um deles usando 2×10^9 execuções em um anel de 4001 sítios, onde descartamos as primeiras 2×10^8 execuções, 10% do total, por considerarmos esse um tempo transiente, ou seja, um tempo necessário para garantir que o sistema atinja o estado estacionário. E vale lembrar que as médias tomadas foram sobre o número de execuções restante. Os resultados para os histogramas da energia são apresentados na figura 5.2.

As simulações foram feitas no ponto III, região da fase $\langle 123 \rangle$ da figura 5.1, onde o energia por *spin* do estado fundamental é igual a 0,8055. O melhor desempenho foi obtido pelo algoritmo EO com $\tau = 2, 1$, seguido pelo EO com $\tau = 1, 2$, BSR e BSS,

onde os valores para energia média foram $0,828 \pm 0,003$, $0,969 \pm 0,009$, $0,973 \pm 0,004$ e $0,983 \pm 0,005$.

Para estudar a dependência da correlação espacial, medimos a distribuição $D(x)$, da distância x entre dois subseqüentes sítios ativos, ou seja, $D(x)$ é o número vezes (frequência) em que algoritmo encontra a distância x como sendo a separação entre dois subseqüentes sítios ativos. Vale lembrar que, para os três algoritmos nós ativamos um sítio i mudando o seu estado de *spin* S_i e o *fitness* λ_i correspondente. O resultado de $D(x)$ pode ser visto na figura 5.3. Onde vemos claramente que o algoritmo EO apresenta um alcance espacial infinito, isto significa que não importa o quanto distante um sítio se encontra de outro, a probabilidade de ativação é constante. Enquanto, o algoritmo BSR exibe uma dependência da forma *lei de potência* dada por $D(x) \sim x^{-3,19 \pm 0,02}$, onde vemos que o expoente é absolutamente compatível com o do obtido por Bak e Sneppen ($3,15 \pm 0,05$), quando eles estudaram um modelo evolutivo [33]. Além disso, obtemos os mesmo expoentes para os demais pontos rotulados da figura 5.1, indicando que o princípio da universalidade é assegurado no espaço dos parâmetros Δ e h . E ainda da figura 5.3, podemos dizer que o BSS tem características de um algoritmo misto, pois tem o comportamento do BSR para pequenas distância e o do EO para grandes distâncias.

Figura 5.2: Histograma da energia por *spin* do modelo EO, tipo BS com sorteio e tipo BS com ruído.

No regime estacionário, a dinâmica BSR mostra uma evolução temporal intermitente com longos períodos de passividade interrompidos por repentinas explosões de atividade, ou seja, a dinâmica BSR exibe um equilíbrio pontuado. A esta mudança abrupta da atividade chamamos de avalanche. Uma avalanche acontece se existe um sítio do anel cujo valor do *fitness* é menor do que um certo limiar λ_c . O tamanho A de uma avalanche é definido como o número sequencial de passos do tempo com no mínimo um *fitness* abaixo do limiar. Calculamos para cada uma das três dinâmicas a distribuição de probabilidade de avalanches $P(A)$, e os resultados podem ser vistos na figura 5.4, onde as figuras 5.4(a), 5.4(b) e 5.4(c) correspondem aos algoritmos BSR, EO e BSS, respectivamente. Antes da análise de $P(A)$, precisamos falar sobre como eles foram obtidos. No final do período de transiente, passo de tempo 2×10^8 , fizemos os histograma dos *fitnesses* de todo o anel, os quais estão inseridos na figura 5.4. E todos eles foram calculados para os valores de quiralidade $\Delta = 0,35$ e campo magnético $h = 0,8$. Para $p = 3$ temos um total de 27 possíveis valores para o *fitness* no caso dos algoritmos EO e BSS, onde muitos dos *fitness* são degenerados ou quase degenerados. Contudo, para o algoritmo BSR existe uma flutuação de *fitness* $\Delta\lambda$ pelo fato de estarmos utilizando o ruído η . Dos histogramas de *fitness* das figuras 5.4(b) e 5.4(c), nós encontramos os valores de limiar $\lambda_c = -0,8055$ para a dinâmica EO, vale lembrar que a energia por

Figura 5.3: Probabilidade de distribuição $D(x)$ vs. distância x .

spin do estado fundamental para essa fase, $\langle 123 \rangle$, é 0,8055 e para a dinâmica BSS o valor de λ_c é $-1,5061$. No caso da dinâmica BSR, o limiar crítico é sintonizado pelo *fitness*, dentro do intervalo $\Delta\lambda$, para obter avalanches com um tamanho médio entre 500 e 2000. O valor de λ_c obtido por esse processo foi de $-1,5059$.

Voltando agora a falar sobre as distribuições de probabilidades $P(A)$. Elas foram calculadas usando seus respectivos limiares λ_c , os quais foram apresentados acima. O algoritmo BSR, figura 5.4(a), mostra uma *lei de potência* escalando $P(A) \sim A^{-0,87 \pm 0,01}$, e mais uma vez encontramos um expoente em muito bom acordo com o valor obtido no modelo evolutivo de Bak-Sneppen ($0,9 \pm 0,1$ [33]). Testes realizados nos pontos I, II, III e IV da figura 5.1 confirmam que este expoente é universal, ou seja, ele independe dos valores da quiralidade Δ e do campo magnético h . Enquanto o algoritmo EO, figura 5.4(b), apresenta um decaimento exponencial com A . E finalmente o caso do algoritmo BSS, figura 5.4(c), encontramos mais uma vez um comportamento misto descrito por $P(A) \sim A^{-0,68} e^{-0,0002 A}$.

Figura 5.4: Probabilidade de distribuição de avalanches $P(A)$ *vs.* tamanho de avalanche A . (a) algoritmo tipo BS com ruído, (b) algoritmo EO e (c) tipo BS com sorteio.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

“No fim tudo dá certo,
se não deu certo é porque ainda não chegou ao fim.”

Fernando Sabino

Fazendo uma análise do algoritmo EO com τ , vemos que para $\tau = 0$ a dinâmica torna-se uma caminhada aleatória através do espaço de configurações Ω . E para $\tau \rightarrow \infty$, a dinâmica tende para uma procura local, pois somente a variável de “pior posição” (as primeiras posições) da lista é atualizada, estando essa dinâmica destinada a cair numa “configuração armadilha”. Então, para valores finitos de τ a distribuição P_k , dada pela equação (2.6.1), assegura que nenhum *fitness* da lista é deixado de lado, com isso mantemos a idéia de fazer com que a dinâmica evolua de modo a promover sempre a alteração dos estados das variáveis de pior *fitness*, mesmo no caso de sistemas com pouca variabilidade do *fitness*, assim como é o sistema *spin glass*.

Das três dinâmicas estudadas nesta dissertação, podemos concluir que somente o algoritmo BSR conduz o sistema para um estado crítico auto-organizado. Pois, como podemos observar na figura 5.4, apenas o BSR apresenta correlação espacial e temporal escaladas por *leis de potências*.

Vimos que o princípio da universalidade parece ser satisfeito rigorosamente para o modelo de relógio quiral de p -estados. Uma outra importante conclusão é a de que mesmo possuindo características SOC, não é garantido que uma dinâmica seja ótima. Isso foi provado no capítulo 5 pela dinâmicas BSR e EO. O algoritmo EO não é do tipo SOC, uma vez que ele apresenta alcance espacial infinito e uma dependência exponencial com as avalanches. Por outro lado, o pico do histograma de energia da

dinâmica EO com $\tau = 2,1$ é apenas 2,7% (veja figura 5.2) maior que o valor exato do estado fundamental. Esse é um resultado espantoso, e não é superado pela dinâmica BSR.

É importante dizer que não existe parâmetro a ser sintonizado na dinâmica BSR. E para finalizar, a principal característica das dinâmicas EO e BSR são as seguintes: EO é um tipo de dinâmica *ideal* sem qualquer interação entre o sítio ativado e sua vizinhança, enquanto o BSR é um tipo de dinâmica *real* com interação de curto alcance entre o sítio ativado e seu vizinhos mais próximos.

Uma continuação natural do trabalho é a aplicação da dinâmica EO, BSS, BSR em outros problemas, no estudo de otimização. O primeiro problema que pretendemos estudar é o do grafo bipartido.

Apêndice A

Técnica do Potencial Efetivo

“É impossível para um homem
aprender aquilo que ele acha que já sabe.”

Epíteto

Griffiths e Chou propuseram[26, 35] um algoritmo que diferente dos métodos tradicionais, busca diretamente o estado fundamental. Este método é elegante e poderoso, e pode ser resumido da seguinte forma. Imagine o problema de encontrar o estado fundamental para um sistema de átomos com a energia de interação dada por

$$H = \sum_{i=1}^{\infty} [V(u_n) + W(u_n - u_{n-1})]. \quad (\text{A.1})$$

Como primeiro passo na demonstração do potencial efetivo, será útil considerarmos um sistema de apenas duas partículas, a primeira se movendo em um potencial periódico

$$U(1 + u) = U(u) \quad (\text{A.2})$$

e a segunda sujeita ao potencial V , sendo que as duas partículas estão conectadas por uma mola com energia potencial W , como mostrado na figura A.1. Para uma posição fixa u' do segundo átomo, a energia mínima do sistema acoplado é dada pela equação de autovalores aditiva

$$\overline{U}(u') = KU(u') = V(u') + \min_u [W(u' - u) + U(u)]. \quad (\text{A.3})$$

Se a equação (A.3) é iterada n vezes, $K^n V$ será a energia mínima da cadeia de n átomos em um potencial V . Note que $K^n V$ tem a mesma periodicidade de V . Então como n tende para o infinito, é aceitável que V e $K^n V$ difiram por $n\lambda$, onde λ é a energia do estado fundamental por partícula, mais um termo de ordem 1.

É conveniente procurar por uma solução para a equação de autovalor não-linear

$$KR(u') = \lambda + R(u') = V(u') + \min_u [W(u' - u) + R(u)], \quad (\text{A.4})$$

onde impomos a condição de que R tenha a mesma periodicidade de V ,

$$R(1 + u) = R(u), \quad (\text{A.5})$$

e então, quando ocorre um movimento na rede, isso custará alguma energia, e por essa razão, podemos definir uma função, que chamaremos de “potencial efetivo”, que descreve a energia gasta em função da posição dos átomos na rede. E então de (A.4) temos que

$$K^n R = n\lambda + R, \quad (\text{A.6})$$

onde R tem a seguinte propriedade: se uma cadeia finita de n átomos conectados por molas está colocada em um potencial V , e o átomo do lado mais a esquerda está num potencial R melhor do que V , a energia mínima de todo sistema, em função da posição do átomo mais à direita é dada por $R + n\lambda$.

Uma vez que R é uma função limitada, a energia por partícula do sistema tenderá para λ quando n for para o infinito, e então λ será a energia média por partícula em um estado fundamental qualquer.

Analogamente ao potencial efetivo R , existe um potencial efetivo S para o

Figura A.1: Potenciais $U(u)$ e $V(u')$.

átomo mais à esquerda em uma cadeia semi-infinita se estendendo para a direita, veja figura A.2(b), que satisfaz a equação

$$\lambda + S(u) = V(u) + \min[S(u') + W(u' - u)] \quad (\text{A.7})$$

e a condição periódica

$$S(1 + u) = S(u). \quad (\text{A.8})$$

Um átomo em uma cadeia duplamente infinita (figura A.2(c)), experimentará um potencial efetivo

$$F(u) = R(u) + S(u) - V(u), \quad (\text{A.9})$$

onde V deve ser subtraído no lado direito da equação (A.9), para que não seja contado duas vezes. Onde espera-se que F tenha o valor mínimo de energia quando u é um ponto de alguma configuração de estado fundamental.

Figura A.2: Esboço mostrando as redes referentes aos potenciais efetivos: (a) $R(u)$, (b) $S(u)$ e (c) $F(u)$.

Apêndice B

Cálculo das Fronteiras Analíticas

“Estou convencido das minhas próprias
limitações - e esta convicção é minha força.”

Mahatma Gandhi

Apresentamos aqui o cálculo das fronteiras dos diagramas de fases do modelo de relógio quiral de p -estados (MRQp), para os casos de $p = 3$ e $p = 4$. Como foi dito no capítulo 4, pelo fato da energia ser uma função que não apresenta singularidades, podemos igualar as equações de energia. As equações de energia das fases são obtidas a partir de

$$H = \sum_{i=1}^N \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta \right) \right\} + h \left[1 - \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_i - 1}{p} \right) \right\} \right] \right], \quad (\text{B.1})$$

onde podemos reescrever a equação B.1 na seguinte forma,

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_{i+1} - S_i}{p} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{S_i - 1}{p} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.2})$$

B.1 Cálculos das Fronteiras para o MRQ3

$$\begin{aligned} 1A &= \langle 1 \rangle \\ 2A &= \langle 12 \rangle, \langle 13 \rangle \\ 3A &= \langle 123 \rangle \end{aligned}$$

Fase 1A

A equação de energia para a fase 1A, é obtida substituindo S_i , S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1. Assim ficamos com

$$H_{11} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{3} \right) \right\} \right] \right] \quad (\text{B.3})$$

resolvendo a equação B.3, chegamos em

$$H_{11} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.4})$$

então temos que a energia da fase 1A é,

$$H_{1A} = H_{11} \quad (\text{B.5})$$

$$H_{1A} = -(\cos(\Delta) + h). \quad (\text{B.6})$$

Fase 2A

A equação de energia para a fase 2A, é obtida substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1 e 2, respectivamente. Assim ficamos com

$$H_{12} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{3} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.7})$$

Lembrando da identidade trigonométrica

$$\cos(A \pm B) = \cos(A) \cos(B) \mp \sin(A) \sin(B) \quad (\text{B.8})$$

fazendo uso de B.8 em B.7, obtemos

$$H_{12} = - \left(-\frac{1}{2} \cos(\Delta) + \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) - h \right). \quad (\text{B.9})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 2 e 1, respectivamente, temos que

$$H_{21} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-2}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{3} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.10})$$

Usando a relação trigonométrica B.8 na equação B.10, chegamos em

$$H_{21} = - \left(-\frac{1}{2} \cos(\Delta) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) - \frac{h}{2} \right) \quad (\text{B.11})$$

como resultado da energia da fase 2A, temos

$$H_{2A} = H_{12} + H_{21} \quad (\text{B.12})$$

$$H_{2A} = - \left(-\cos(\Delta) + \frac{h}{2} \right). \quad (\text{B.13})$$

Fase 3A

A equação de energia para a fase 3A, é obtida substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1 e 2, respectivamente. Assim ficamos com

$$H_{12} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{3} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.14})$$

fazendo uso de B.8 em B.14, obtemos

$$H_{12} = - \left(-\frac{1}{2} \cos(\Delta) + \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) - h \right). \quad (\text{B.15})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 2 e 3, respectivamente, temos que

$$H_{23} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-2}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{3} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.16})$$

Usando a relação trigonométrica B.8 na equação B.16, chegamos em

$$H_{23} = - \left(-\frac{1}{2} \cos(\Delta) + \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) - \frac{h}{2} \right). \quad (\text{B.17})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 3 e 1, respectivamente, temos que

$$H_{31} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-3}{3} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-1}{3} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.18})$$

Usando a relação trigonométrica B.8 na equação B.18, chegamos em

$$H_{31} = - \left(-\frac{1}{2} \cos(\Delta) + \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) - \frac{h}{2} \right) \quad (\text{B.19})$$

como resultado da energia da fase 3A, temos

$$H_{3A} = H_{12} + H_{23} + H_{31} \quad (\text{B.20})$$

$$H_{3A} = - \left(-\frac{3}{2} \cos(\Delta) + \frac{3\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) \right). \quad (\text{B.21})$$

Para encontrarmos as equações de fronteiras das fases 1A, 2A e 3A, precisamos igualar as equações de energia por *spin*, isto é, dividir as equações H_{1A} , H_{2A} e H_{3A} pelo número de *spins* do período da fase.

Fronteira da fase 1A com a 2A

Então, temos que a equação de fronteira da fase 1A com a 2A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{1A}}{1} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.22})$$

igual a

$$\frac{H_{2A}}{2} = - \left(-\cos(\Delta) + \frac{h}{2} \right) \quad (\text{B.23})$$

da igualdade das equações B.22 e B.23, temos que a equação de fronteira da fase 1A com a 2A é a seguinte

$$h = -2 \cos(\Delta). \quad (\text{B.24})$$

Fronteira da fase 1A com a 3A

A equação de fronteira da fase 1A com a 3A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{1A}}{1} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.25})$$

igual a

$$\frac{H_{3A}}{3} = - \left(-\frac{3}{2} \cos(\Delta) + \frac{3\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) \right) \quad (\text{B.26})$$

da igualdade das equações B.25 e B.26, temos que a equação de fronteira da fase 1A com a 3A é a seguinte

$$h = -\frac{3}{2} \cos(\Delta) + \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta). \quad (\text{B.27})$$

Fronteira da fase 2A com a 3A

A equação de fronteira da fase 2A com a 3A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{2A}}{2} = - \left(-\cos(\Delta) + \frac{h}{2} \right) \quad (\text{B.28})$$

igual a

$$\frac{H_{3A}}{3} = - \left(-\frac{3}{2} \cos(\Delta) + \frac{3\sqrt{3}}{2} \sin(\Delta) \right) \quad (\text{B.29})$$

da igualdade das equações B.28 e B.29, temos que a equação de fronteira da fase 2A com a 3A é a seguinte

$$h = 2\sqrt{3} \sin(\Delta). \quad (\text{B.30})$$

Então, juntando as equações B.24, B.27 e B.24 obtemos

Figura B.1: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral de p -estados, para o caso de $p = 3$, obtido analiticamente.

onde $x = \Delta/2\pi$ no MRQ3.

B.2 Cálculos das Fronteiras para o MRQ4

$$\begin{aligned} 1A &= \langle 1 \rangle \\ 2A &= \langle 13 \rangle, \langle 24 \rangle \\ 3A &= \langle 124 \rangle \\ 4A &= \langle 1234 \rangle \end{aligned}$$

Fase 1A

A equação de energia para a fase 1A, é obtida substituindo S_i, S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1. Assim ficamos com

$$H_{11} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{4} \right) \right\} \right] \right] \quad (\text{B.31})$$

resolvendo a equação B.31, chegamos em

$$H_{11} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.32})$$

então temos que a energia do fase 1A é,

$$H_{1A} = H_{11} \quad (\text{B.33})$$

$$H_{1A} = -(\cos(\Delta) + h). \quad (\text{B.34})$$

Fase 2A

A equação de energia para a fase 2A, é obtida substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1 e 3, respectivamente. Assim ficamos com

$$H_{13} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-1}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.35})$$

Lembrando da identidade trigonométrica

$$\cos(A \pm B) = \cos(A) \cos(B) \mp \sin(A) \sin(B) \quad (\text{B.36})$$

fazendo uso de B.36 em B.35, obtemos

$$H_{13} = -(-\cos(\Delta) + h). \quad (\text{B.37})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 3 e 1, respectivamente, temos que

$$H_{31} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-3}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.38})$$

usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.38, chegamos em

$$H_{31} = -(-\cos(\Delta) - h) \quad (\text{B.39})$$

como resultado da energia da fase 2A, temos

$$H_{2A} = H_{13} + H_{31} \quad (\text{B.40})$$

$$H_{2A} = -(-2 \cos(\Delta)). \quad (\text{B.41})$$

Fase 3A

A equação de energia para a fase 3A, é obtida substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 1 e 2, respectivamente. Assim ficamos com

$$H_{12} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{4} \right) \right\} \right] \right] \quad (\text{B.42})$$

fazendo uso de B.36 em B.42, obtemos

$$H_{12} = -(\sin(\Delta) + h). \quad (\text{B.43})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 2 e 4, respectivamente, temos que

$$H_{24} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{4-2}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.44})$$

Usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.44, chegamos em

$$H_{24} = -(-\cos(\Delta)). \quad (\text{B.45})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 4 e 1, respectivamente, temos que

$$H_{41} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-4}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{4-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.46})$$

Usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.46, chegamos em

$$H_{41} = -(\sin(\Delta)) \quad (\text{B.47})$$

como resultado da energia da fase 3A, temos

$$H_{3A} = H_{12} + H_{24} + H_{41} \quad (\text{B.48})$$

$$H_{3A} = -(2 \sin(\Delta) - \cos(\Delta) + h). \quad (\text{B.49})$$

Fase 4A

A equação de energia para a fase 4A, é obtida substituindo S_i e S_{i+1} na

equação B.2 por *spins* de estado 1 e 2, respectivamente. Assim ficamos com

$$H_{12} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-1}{4} \right) \right\} \right] \right] \quad (\text{B.50})$$

fazendo uso de B.36 em B.50, obtemos

$$H_{12} = -(\sin(\Delta) + h). \quad (\text{B.51})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 2 e 3, respectivamente, temos que

$$H_{23} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-2}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{2-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.52})$$

Usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.52, chegamos em

$$H_{23} = -(\sin(\Delta)). \quad (\text{B.53})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 3 e 4, respectivamente, temos que

$$H_{34} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{4-3}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{3-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.54})$$

Usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.54, chegamos em

$$H_{34} = -(\sin(\Delta)). \quad (\text{B.55})$$

Substituindo S_i e S_{i+1} na equação B.2 por *spins* de estado 4 e 1, respectivamente, temos que

$$H_{41} = \left[-\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1-4}{4} - \Delta \right) \right\} - h \left[\cos \left\{ 2\pi \left(\frac{4-1}{4} \right) \right\} \right] \right]. \quad (\text{B.56})$$

Usando a relação trigonométrica B.36 na equação B.56, chegamos em

$$H_{41} = -(\sin(\Delta)). \quad (\text{B.57})$$

como resultado da energia da fase 4A, temos

$$H_{4A} = H_{12} + H_{23} + H_{34} + H_{41} \quad (\text{B.58})$$

$$H_{4A} = -(4 \sin(\Delta) + h). \quad (\text{B.59})$$

Para encontrarmos as equações de fronteiras das fases 1A, 2A, 3A e 4A precisamos igualar as equações de energia por *spin*, isto é, dividir as equações H_{1A} , H_{2A} , H_{3A} e H_{4A} pelo número de *spins* do período da fase.

Fronteira da fase 1A com a 3A

Então, temos que a equação de fronteira da fase 1A com a 3A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{1A}}{1} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.60})$$

igual a

$$\frac{H_{3A}}{3} = -(2 \sin(\Delta) - \cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.61})$$

da igualdade das equações B.60 e B.61, temos que a equação de fronteira da fase 1A com a 3A é a seguinte

$$h = \sin(\Delta) - 2 \cos(\Delta) \quad (\text{B.62})$$

Fronteira da fase 1A com a 4A

A equação de fronteira da fase 1A com a 4A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{1A}}{1} = -(\cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.63})$$

igual a

$$\frac{H_{4A}}{4} = -(4 \sin(\Delta)) \quad (\text{B.64})$$

da igualdade das equações B.63 e B.67, temos que a equação de fronteira da fase 1A

com a 4A é a seguinte

$$h = \sin(\Delta) - \cos(\Delta) \quad (\text{B.65})$$

Fronteira da fase 2A com a 3A

A equação de fronteira da fase 2A com a 3A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{2A}}{2} = -(-2 \sin(\Delta)) \quad (\text{B.66})$$

igual a

$$\frac{H_{3A}}{3} = -(2 \sin(\Delta) - \cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.67})$$

da igualdade das equações B.66 e B.67, temos que a equação de fronteira da fase 2A com a 3A é a seguinte

$$h = -2 \sin(\Delta) - 2 \cos(\Delta). \quad (\text{B.68})$$

Fronteira da fase 3A com a 4A

A equação de fronteira da fase 3A com a 4A, é obtida fazendo

$$\frac{H_{3A}}{3} = -(2 \sin(\Delta) - \cos(\Delta) + h) \quad (\text{B.69})$$

igual a

$$\frac{H_{4A}}{4} = -(4 \sin(\Delta)) \quad (\text{B.70})$$

da igualdade das equações B.69 e B.70, temos que a equação de fronteira da fase 3A com a 4A é a seguinte

$$h = -2 \sin(\Delta) - 2 \cos(\Delta) \quad (\text{B.71})$$

E então, juntando as equações B.62, B.65, B.68 e B.71 obtemos onde $x = \Delta/2\pi$ no MRQ4.

Figura B.2: Diagrama de fases do modelo de relógio quiral de p -estados, para o caso de $p = 4$, obtido analiticamente.

Bibliografia

- [1] P. Bak, C. Tang e K. Wiesenfeld, *Physical Review Letters*, **59**, 381-384, 1987.
- [2] S. Ostlund. *Physical Review B* **24**, 398-405, 1981.
- [3] D. A. Huse. *Physical Review B* **24**, 5180-5194 1981.
- [4] C. Darwin. *The Origin of Species by Means of Natural Selection*, Murray, London, 1859.
- [5] P. Bak. *How Nature Works*, Springer, New York, 1996.
- [6] D. G. Bounds. *Nature*, **329**, 215-219, 1987.
- [7] N. L. Biggs, E. K. Lloyd e R. J. Wilson. *Graph Theory*, Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [8] N. A. W. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller e E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machine, *Journal of Chemical Physics*, **21**, 1087-1092, 1953.
- [9] S. Kirkpatrick, C. D. Gellat Jr e M. P. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing, *Science*, **220**, 671-680, 1983.
- [10] K. Binder. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer, Nova York, 1978.
- [11] P. J. M. van Laarhoven e E. H. L. Aarts. *Simulated Annealing: Theory and Applications*, D. Reidel, Dordrech, 1987.
- [12] J. H. Holland. Information Processing in Adaptative Systems, em M. C. Yovits, G. T. Jacobi e G. D. Gosdstein (eds), *Selforganizing Systems*, 215-230, Spartan Books, Washington, 1962.
- [13] J. H. Holland. Robust Algorithms for Adaptation Set in a General Formal Framework. *Proceedings of the IEEE Symposium on Adaptative Processes Decision and Control*, XVII, 5.15.5. 1970.

- [14] J. H. Holland. Genetic Algorithms and the Optimal Allocations of Trial, *SIAM J. Comp.* **2** (2), 88-105, 1973.
- [15] J. H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, 1975.
- [16] J. J. Grefenstette, R. Gopal, B. J. Rosmaita e D. van Gucht. Genetic Algorithms for the Traveling Salesman Problem, *Proceedings of an International Conference on Genetic Algorithms and their Applications*, 160-168, 1985.
- [17] D. E. Goldberg, R. Lingle. Alleles, Loci, and Traveling Salesman Problem, *Proceedings of an International Conference on Genetic Algorithms and their Applications*, 154-159, 1985.
- [18] D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search Optimization and Machine Learning*, Addison Wesley, Nova York, 1989.
- [19] K. A. de Jong e W. M. Spears. A Formal Analysis of the Role of Multi-Point Crossover in Genetic Algorithms, *Annals of Maths. and A.I.*, **5**, 1-26, 1992.
- [20] Z. Michalewicz. *Genetic Algorithm + Data Structure = Evolution Programs*, Springer, Nova York, 1992.
- [21] S. Boettcher e A. G. Percus. *Physical Review Letters*, **86**, 5211-5214, 2001.
- [22] S. Boettcher e A. G. Percus. *Artificial Intelligence*, **119**, 275-286, 2000.
- [23] W. S. McCullough. *Physical Review B* **46**, 5084-5089, 1992.
- [24] H. C. Öttinger. *Journal of Physics C* **15**, 1257-1262, 1982.
- [25] W. Selke e J. Yeomans, *Zeitschrift für physik B* **46**, 311-318, 1982.
- [26] R. B. Griffiths e W. Chou. *Physical Review Letters*, **56**, 1929-1931, 1986.
- [27] M. Buchanan. *Ubiquity: Why the world is simpler than we think*, Weidenfeld & Nicolson, 2000.
- [28] P. Bak, C. Tang e K. Wiesenfeld. *Physical Review A*, **38**, 364-374, 1988.
- [29] V. Frette, K. Christensen, A. Malte-Sorensen, J. Feder, T. Josang e P. Meakin. *Nature*, **379**, 49-52, 1996.
- [30] S. R. Nagel. *Reviews of Modern Physics*, **64**, 321-325, 1992.

-
- [31] S. Wright. *Evolution*, **36**, 427-443, 1982.
 - [32] P. Bak, K. Chen e M. Creutz. *Nature (London)*, **342**, 780, 1989.
 - [33] P. Bak e K. Sneppen. *Physical Review Letters*, **71**, 4083-4086, 1993.
 - [34] N. Alves Jr. *Estudo dos diagramas de fases de um modelo de relógio quiral na presença de um campo magnético*. São Paulo, 1996. 68p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física, Universidade de São Paulo.
 - [35] W. Chou e R. B. Griffiths. *Physical Review B*, **34**, 6219-6234, 1986.