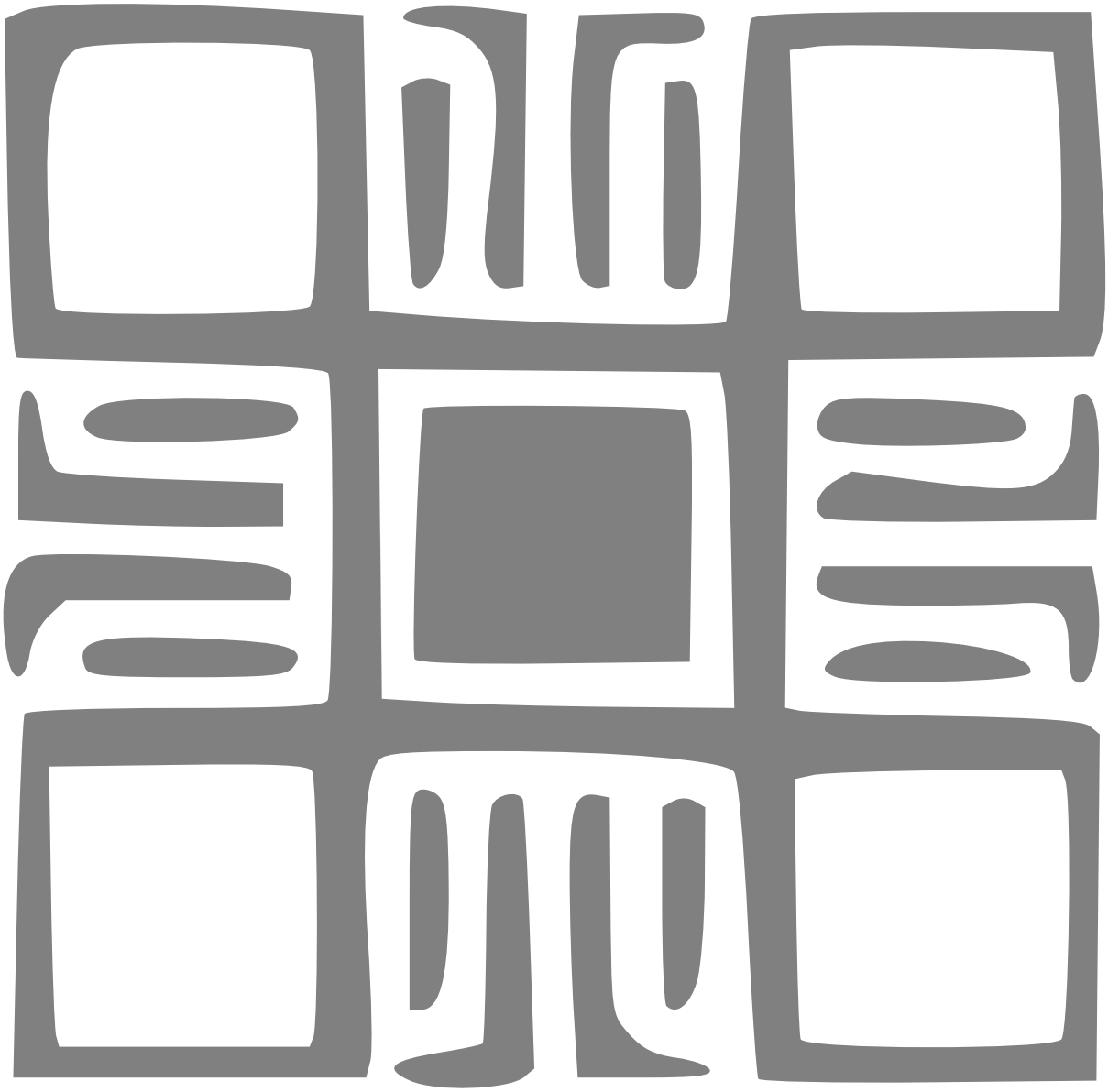
Aplicações Multidisciplinares de Física Estatística

Thadeu Josino Pereira Penna

Tese apresentada em Concurso Público para Professor Titular
Departamento de Física

Universidade Federal Fluminense
Outubro de 2009



À Vivizinha e
aos meus estudantes

Resumo

A Física Estatística trata com sistemas com grande número de componentes, fazendo uso de ferramentas de estatística e teoria de probabilidades. Com importante ajuda dos computadores, agora somos capazes de lidar com sistemas grandes e com interações competitivas. Sistemas não-lineares e com correlações de longo alcance no tempo e no espaço são de difícil tratamento analítico, sem a exigência de fortes aproximações. Estes sistemas podem ser estudados também com o auxílio de computadores, seja na análise ou mesmo como um laboratório *in silico*. Situações como estas descritas aparecem em várias áreas do conhecimento, não sendo exclusivas da Física.

Nesta tese vamos apresentar estudos que realizamos com sistemas em diversas áreas, procurando mostrar a relação entre eles e, principalmente as contribuições que a Física Estatística pode oferecer. Os sistemas variam desde o bloco descendo um plano inclinado, ao mercado de ações passando pelo mecanismo de controle de pressão em ratos e envelhecimento de populações. Os interesses variam do desenvolvimento de novos algoritmos a testes da teoria da Evolução e Seleção Natural, também passando por problemas de interesse tecnológico como o controle de processos em uma plataforma petrolífera.

Abstract

Statistical Physics deals with systems with a large number of components by using tools from Statistics and Theory of Probabilities. Thanks to computers, we are now able of dealing with large systems displaying competitive interactions. Non-linear and long-range correlated systems are hard of dealing with, if we consider analytical approaches. Nevertheless, they can be modeled in computers, either for approximate solutions of their equations or for in silico experiments. There are a lot of situations like those, and most of them do not belong to the traditional Physics domain.

In this work, we are going to present some results and models that we have working on, in different fields. We are focusing on the relationships that can connect these problems and how Statistical Physics can contribute to their understanding and solution. The systems we are going to discuss in this work are so different as a block sliding with friction in an inclined plane, stock markets, the blood pressure control system in rats and aging of populations. Our interests are also broad, going from algorithm developing to innovation problems like the process control inside an offshore plataform but also working with Evolution and Natural Selection theory.

Agradecimentos

Agradeço aos meus professores e aos meus estudantes, pela chance de aprender algo.

Agradeço aos que fazem do Instituto de Física da UFF, um local de trabalho fantástico, nestes últimos trinta anos.

Com o reconhecimento das frases acima, eu consigo englobar boa parte das pessoas a quem sou grato. No entanto, alguns merecem agradecimentos especiais.

Agradeço à Viviane e a toda a minha família pelo amor, paciência e dedicação.

Ao Prof. Antônio Tavares da Costa Jr., ex-aluno e amigo desde aquela época. Pela amizade, incentivo e as pelas correções e sugestões do texto.

Ao grupo de Sistemas Complexos pela ajuda, sugestões e compreensão durante a escrita desta tese.

Aos Profs. Titulares Paulo Gomes, Paulo Murilo, Dietrich Stauffer e Constantino Tsallis, pela orientação, suporte, incentivo e amizade ao longo destes anos.

Ao Diretor do Instituto, Prof. Roberto Bechara Muniz, pelo incentivo, amizade e pela decisão de não estar neste concurso, dobrando a minha chance de conseguir uma cadeira de Titular.

Sumário

1 Introdução **24**

2 Aplicações do Método de Monte Carlo **28**
2.1 Simulações computacionais 28
2.2 Sistemas Complexos 34
2.3 O Modelo de Ising 37
2.4 Acelerando as Simulações 42
2.5 Planos inclinados, avalanches e terremotos 48
2.6 Migração Campo-Cidade e o Mercado de Ações 53
2.7 O Cérebro e Redes Complexas 63
2.8 Otimização e Desenvolvimento de Software 71
2.9 Cyberwar 81
2.10 Conclusões 86

3 Envelhecimento Biológico **88**
3.1 O que é o Envelhecimento 88
3.2 Como Medir o Envelhecimento 92
3.3 Como Envelhecemos 99
3.4 Por que Envelhecemos ? 105
3.5 Um Modelo Computacional 110
3.6 Teoria Fenomenológica da Mortalidade 117

3.7 Avanços da Medicina 123
3.8 Bacalhaus, Salmões e Lagostas 126
3.9 Conclusões 135

4 Análise de Séries Temporais 136
4.1 Introdução 136
4.2 A torneira gotejante e o coração saudável 138
4.3 Mecanismos de controle da pressão sanguínea 150
4.4 Séries Temporais em Plataformas Petrolíferas 160
4.5 Conclusões 175

5 Conclusões 177

Referências Bibliográficas 182

Índice 198

Lista de Figuras

2.1 FERMIAC: um modelo analógico para simular a difusão de nêutrons em duas dimensões, proposto por Enrico Fermi e construído por Percy King, em Los Alamos. Os tambores no carro eram ajustados de acordo com o material que o nêutron atravessa. O mapa das regiões é colocado sobre a superfície e determinam quando os tambores devem se ajustados. Os dígitos sorteados determinavam a direção, a distância viajada até a próxima colisão e um terceiro se é um nêutron rápido ou lento. 30

2.2 Agulha de Buffon. Tábuas de largura h são colocadas paralelamente. Agulhas de tamanho b são soltas e desejamos calcular a probabilidade da agulha cruzar uma linha. 31

2.3 Configurações temporais de automata celulares para as regras mostradas na Tabela 2.2. Estes são três exemplos de regras exibindo comportamento complexo. O tempo é a vertical e a configuração inicial é apenas um sítio ativo. 36

2.4 Resultados para a simulação do modelo de Ising utilizando o método de Monte Carlo. Em cima, a susceptibilidade magnética ($\partial M/\partial H$) e, embaixo, a magnetização em função da temperatura, extraído de de Oliveira and Penna (1988). 39
2.5 Avanço relativo da velocidade da simulação do modelo de Ising comparado com o aumento da velocidade dos computadores. Extraído de Landau and Binder (2005). 43
2.6 Distribuição de probabilidades para uma simulação em $\beta J = 0.221654$, tamanho de rede $L = 16$ e reconstruídas nas outras temperaturas. Mesmo para este valor pequeno de tamanho de rede e para valores não muito distantes da temperatura simulada, os histogramas são cheios de ruído. Extraído de Landau and Binder (2005). 46
2.7 Histograma de visitações o Broad Histogram Method e o método de histogramas simples para uma rede 32x32. Extraído de de Oliveira et al. (1996). 47
2.8 Bloco descendo um plano inclinado de ângulo θ com atrito μ que depende da posição do bloco. 48
2.9 Mapeamento da situação da fig. 2.8, para implementação com bits. O atrito será dado pelo número de contatos entre o plano e o bloco. 50
2.10 Distribuições de avalanches para diversos ângulos de inclinação do plano. Os ângulos foram 35° (•), 40° (■), 44° (♦), 44.9^o (▲), e 44.99^o (+). O ângulo crítico foi escolhido como 45°. A linha tracejada corresponde à $A(\lambda) = \lambda^{-3/2}$, o expoente encontrado por Brito e Gomes. 51
2.11 Caminhante aleatório, com tendência, em direção a uma barreira absorvente. O problema do bloco descendo um plano, com atrito variável, pode ser mapeado neste problema. Outras situações de primeira passagem serão discutidas neste trabalho. 52

2.12 Problema dos trens em terremotos. Blocos são ligados por molas e o atrito é calculado como nesta seção. Extraído de Chianca et al. (2009). 53
2.13 Probabilidade de encontrarmos avalanches maiores que o tamanho s. Médias foram tomadas para mais de um milhão de eventos e as curvas são para diferentes concentrações de bits 1's no bloco e no plano, respectivamente: (∗) para 0,1 e 0,5 (■) para 0,3 e 0,2 e (•) 0,5 e 0,5. Extraído de Chianca et al. (2009). . . . 53
2.14 Condição de equilíbrio de Harris e Todaro para migração com desemprego. 56
2.15 Distribuição de agentes na rede. Pontos pretos correspondem aos agentes urbanos e pontos brancos aos agentes rurais. (a) configuração inicial com 80% da população no setor rural (b) estado de equilíbrio (em relação à fração de indivíduos no setor). 57
2.16 Fração urbana em função do tempo para redes com diferentes dimensões. O comportamento do refluxo é mais sensível em dimensões mais altas. 58
2.17 Evolução temporal para o modelo de Cont-Bouchaud na rede quadrada 50x50. Um "crash" ocorreu por volta de $t = 100$. 60
2.18 Distribuição de variações de preços para diversas escalas de tempo ou atividades a. As atividades variam de 1.25 (mais interna) até 40% (mais externa, como uma parábola) do número de clusters negociando em um período. 61
2.19 Distribuição do S&P 500, normalizadas. Os círculos representam as negociações, de minuto a minuto, enquanto os triângulos representam escalas de dias e semanas. 62

2.20 Mínimos locais e globais de uma função em duas dimensões. A região do espaço de parâmetros que correspondem a pontos cuja minimização leva ao mesmo estado final, ou atrator, é chamada de "bacia de atração". Duas bacias de atração estão marcadas na figura. L é uma medida do raio da bacia e R sua profundidade. O sistema, representado pela esfera Pr está na bacia de atração do mínimo global, enquanto vemos outros dois mínimos locais. 64
2.21 Redes small-world como interpolação entre a rede regular ($p = 0$) e a rede aleatória ($p = 1$). A rede mantém a alta clusterização da rede regular e as pequenas distâncias da rede aleatória. 68
2.22 Rede aleatória e rede livre de escala. Na rede livre de escala, os "hubs", ou pontos mais conectados, estão marcados em cinza. A maioria dos sítios possui apenas uma ligação. 69
2.23 Distribuição de conectividade para várias redes extensas. (**A**) Colaboração entre atores com $N = 212.250$ e conectividade média $\langle k \rangle = 28,78$. (**B**) WWW, $N = 325.729$, $\langle k \rangle = 5,46$. As linhas tracejadas possuem expoentes (A) $\gamma_{\text{atores}} = 2,3$ e (B) $\gamma_{\text{www}} = 2,1$. 70
2.24 Superposição ("Overlap") final entre o estado final da rede e uma das memórias vs a para as geometrias de small world com $p = 0.2$ $(+)$, $p = 0.4$ $(\times)$, $p = 1.0$ $(*)$ e a rede livre de escala $(\square)$. Para $\alpha = 0.15$ em (a) e $\alpha = 0.20$ em (b). Médias em 100 realizações. As curvas não vão a zero pois mesmo um reconhecimento errado ainda guarda uma certa superposição com o padrão correto. 71
2.25 Distribuição estável de Lévy. Os casos especiais são $\alpha = 2$ para a gaussiana, $\alpha = 1$ para a distribuição de Cauchy. 73

2.26 Rede de dependências do pacote php, no centro da imagem. 78
2.27 Eficiência dos algoritmos para detecção de comunidades. O gráfico superior diz respeito ao método espectral (não discutido neste trabalho), o gráfico inferior é o resultado para o simulated annealing. Os resultados finais são semelhantes, mas o método espectral é 10 vezes mais rápido. 79
2.28 Dendograma das comunidades dos pacotes Debian . . 80
2.29 Mapa da internet. O núcleo é formado por oitenta concentradores. A grande maioria dos sítios situa-se na periferia. Existe uma faixa de computadores conectados um a um (P2P). Extraído de Carmi et al. (2007). 82
2.30 Esquema dos roteadores da Universidade Federal Fluminense. 84
2.31 Correlações entre as flutuações dos roteadores de VoIP da UFF. As cores diferenciam ligações recebidas e ligações efetuadas. 85

3.1 Jeanne Louise Calment (21/02/1875–4/08/1997), 122 anos e 164 dias, a pessoa mais velha do mundo, segundo comprovações oficiais. Embora a expectativa de vida humana tenha aumentado nos últimos 100 anos (de 40 anos, no início do século XX, até 64 anos, em 2009) principalmente pela redução dos índices de mortalidade infantil, a máxima expectativa de vida – calculada pelos 10% mais longevos de uma população – subiu apenas 1.8% desde 1960. 89

3.2 Taxa metabólica (kcal/h) versus massa (g) para diversos organismos, mostrando a lei de potência com expoente 3/4 (Savage et al., 2007) . A lei continua valendo, inclusive para mitocôndrias e suas subunidades (até 10^{-18}, na escala vertical). A lei dos 3/4 pode ser obtida considerando a dimensão fractal da rede de transporte metabólica, que adiciona uma dimensão a mais, semelhante ao problema da compactação em teorias das cordas. 91
3.3 Expectativa de vida média nos diversos países, em 2008. Note que enquanto a região de menor expectativa está concentrada na África, em particular no sul do continente, países com maior expetativa estão espalhados. 91
3.4 Mortes por 100.000, nos Estados Unidos da América em 2006. As linhas contínuas representam as mortes, separadas por sexo e as pontilhadas, pela ascendência. Apesar das diferenças no número de mortes, o comportamento das curvas é semelhante. 94
3.5 Mortes por 100.000 indivíduos nos Estados Unidos da América, desde 1940. A redução da mortalidade é maior para as primeiras idades. 95
3.6 Apesar do valor das taxas de mortalidades diferirem bastante no tempo e em diferentes países, principalmente na puberdade, as mesmas se aproximam em idades mais avançadas. 96
3.7 A curva de mortalidade para moscas exibe um comportamento como o da lei de Gompertz para até 15 dias, quando a taxa parece constante e chega a diminuir. 90% da população de 1,2 milhões de moscas morrem antes de 30 dias. 97

3.8 Curvas de mortalidade de automóveis em vários períodos. O automóvel é considerado morto, quando não aparece no próximo registro. Em (b), são mostradas as mortalidades para automóveis de uma mesma marca. Dados de Vaupel e Owens, retirados de Wachter and Finch (1997). 98
3.9 Máxima expectativa de vida para alguns mamíferos contra o número máximo de divisões de fibroblastos (Masters, 2002). O resultado é semelhante para eritrócitos, ao invés de fibroblastos. 102
3.10 Taxas de mortalidade de moscas, em função da idade em dias, obtidas de Pletcher et al. (1999). Foram realizadas três experiências com moscas em que o cruzamento era selecionado para favorecer o acúmulo (Binscy/RY^L) ou não (C(1;Y^S)) de mutações. A mortalidade foi aumentada em todas as experiências devido ao "inbreeding", mas as mortalidades foram maiores para os conjunto com acúmulo de mutações. Esta experiência mostra o efeito do acúmulo de mutações na expectativa de vida de uma população. 107
3.11 Exemplo de tira de bits. Cada posição representa um intervalo de tempo na vida do indivíduo. Neste exemplo, mutações deletérias irão se manifestar nas idades 4,5 e 7. A leitura é feita da direita para esquerda e iniciando em zero, inspirada pela representação dos bits no computador. 111
3.12 Evolução temporal partindo de uma população de 450.000 indivíduos, inicialmente com tiras aleatórias. Os resultados são para o caso sem mutações (□) e para $M = 2$ (•). Note como a presença de mutações favorece a ida para o equilíbrio. 113

3.13 Frequência de indivíduos com uma dada idade na população para diferentes idades de maturidade sexual: $R = 2$ ($\square$), $R = 4$ ($+$) e $R = 8$ ($\bullet$). Os parâmetros para esta simulação foram $T = 4, M = 1$ e $b = 1$. 114
3.14 Taxa de mortalidade D(age) contra a idade (age). Os dados são para a população de mulheres alemãs, em 1987 ($+$), e uma simulação com $T = 2$ e $N_{max} = 10^6$ indivíduos. Retirado de Penna and Stauffer (1996). . . 116
3.15 Nível de Gompertz contra a inclinação b das curvas de mortalidade para japoneses 1891-1990 ($\diamond$), suecos 1780-1900 e 1968-1991 ($\circ$), alemães 1987 (∇) e algumas tabelas mundiais ($\triangle$). Extraído de (Azbel, 1997). 118
3.16 Inverso de sobreviventes $1/N_x$ na idade x. Os dados representam os machos ($\diamond$), fêmeas (∇) e para o conjunto ($\circ$). Na figura (a) idades até 130 dias, na (b) destacam-se as idades mais avançadas. Extraído de Azbel (1997). 119
3.17 Comprovação da relação linear entre a e b para simulações realizadas com o modelo computacional. Cada ponto do gráfico corresponde a uma simulação com uma semente aleatória diferente mas mantendo os mesmos parâmetros, exceto a taxa de novas mutações deletérias M , que corresponderiam à espécies diferentes. 121
3.18 Taxa de mortalidade para uma população heterogênea com quatro diferentes valores para as taxas de mutação ($M = 0,10; 0,25; 0,40$ e $0,55$). Para idades avançadas, é possível ver a redução da derivada da taxa de mortalidade. Note que também as flutuações na mortalidade são maiores que no caso anterior. 122
3.19 $\ln(N_0/N_x)$ versus a idade s, para o caso da figura anterior. O comportamento é o mesmo das populações de moscas, como notado por Azbel (ver fig. 3.16). 123

3.20 $\ln a$ vs. b, para mulheres (esquerda) e homens (direita) na França, Suécia, Japão e Estados Unidos. A maioria dos pontos que pertencem à diagonal são do início do século XX. Extraído de Yashin et al. (2001). 124
3.21 Taxa de mortalidade para simulações do efeito da Medicina, introduzindo probabilidade de cura em mutações em intervalos regulares. O eixo vertical representa a idade (de 0 a 32) e as cores representam faixas de mortalidades. O eixo horizontal representa o tempo de simulação. Em a) a escala é linear e em b) é logarítmica. Notem que não há avanços graduais e contínuos mas saltos. Algumas idades podem temporariamente ter mortalidades menores que outras menores, mas o efeito é temporário. As mortalidades são diminuídas consistentemente em idades menores. . . 126
3.22 Dinâmica dos parâmetros de Gompertz, utilizando avanços da Medicina, que reduz a mortalidade devido a fatores genéticos. Como o processo de cura se estende por um longo período (400 passos) observamos claramente o desvio no padrão de correlação, formando diversos "ganchos" ao longo de sua trajetória. A curva é propositadamente exagerada, com excesso de "ganchos". 127
3.23 Tamanho da população em função do tempo. Começando com mais de 300 milhões de indivíduos, a pesca é introduzida no tempo 1000 (17%) e aumentada no tempo 1200 (+5%). As curvas, de cima para baixo, representam a população total e as idades de 1,8,16,24 e 32 anos. Nesta simulação, a pesca foi introduzida quando a população estava estável, mas não a distribuição de idades. Extraído de de Oliveira et al. (1995). 128

3.24 Comprimento da carapaça e o peso da lagosta verde, em função da idade. 129
3.25 a) População total b) estoque disponível em função da idade máxima de pesca estabelecida. 130
3.26 a) População e b) estoque disponível quando é introduzido um limite superior para o tamanho das lagostas pescadas. A população dobra, quase que imediatamente e o estoque logo se recupera e, em pouco tempo, é 15% maior que o anterior, sem a limitação. . 131
3.27 Taxas de sobrevivência em função da idade para uma estratégia de reprodução semélpara (○) e outra iterópara. É evidente a senescência catastrófica ($R = 26$). Extraído de Penna et al. (1995b). 132

4.1 (a) Comportamento caótica da torneira gotejante, de Shaw. À medida que o fluxo aumenta as gotas passam de um comportamento periódico para um comportamento caótico. (b) Arranjo experimental da primeira experiência. 139
4.2 Diagrama de bifurcações obtido deixando o nível de um reservatório de 50 l baixar naturalmente. Foram obtidas 100.000 gotas neste experimento. Extraído de (Pinto and Sartorelli, 2000). 140
4.3 Gotas no vidro. A gota escorre dependendo do ângulo de contato com a superfície, que por sua vez depende da viscosidade do líquido, do coeficiente de atrito líquido-superfície e da condição inicial. 141
4.4 Configuração inicial para o problema da gota na parede. O fluido é representado por +. A coluna mais à direita representa a parede e não é atualizada na dinâmica. 142

4.5 Diversos estágios de formação de uma gota segundo o modelo de de Oliveira and Penna (1993). A parte inteira dos tempos se refere ao número de injeções efetuadas. A parte fracionária corresponde à fração de atualizações em que ocorreu a ruptura da gota. . . 143
4.6 Comparação entre gotas de torneiras reais (esquerda) e o modelo simples bidimensional (direita). Os resultados são para área em função do perímetro, razão perímetro/área e altura do centro de massa em função do tempo, para diversos fluxos. 144
4.7 Formação de cascata em uma torneira gotejante em que o líquido é mais viscoso que a água. O estudo dos pontos de quebra é de interesse tecnológico, como na fabricação de impressoras jato-de-tinta. 145
4.8 Mapas de retorno para os intervalos de tempo entre gotas sucessivas $B(n)$. Estas são séries experimentais para fluxo médio igual a 25 gotas/s (acima) e 40 gotas/s (abaixo). Extraído de Penna et al. (1995a). 146
4.9 DFA: a série a ser analisada é integrada gerando a série $y_s(k)$. A série é dividida em janelas de tamanho variável l. Dentro de cada janela é ajustada uma reta correspondendo à tendência naquela janela. A flutuação é calculada segundo a eq. (4.3) mas a partir da série integrada menos a tendência em cada janela. O procedimento é repetido para janelas de tamanhos diferentes. O expoente α é definido como $F(l) \propto l^{\alpha}$. As figuras representam a série original, as janelas e em vermelho as tendências ajustadas em cada uma delas, para dois tamanhos de janelas diferentes. 147
4.10 Flutuação média dos intervalos contra a distância entre gotas. (a) e (b) correspondem aos casos mostrados na 4.8, enquanto (c) e (d) são as séries embaralhadas. 148

4.11 "Gotas de formigas" que se formam na extremidade de um pedaço de fio, onde se encontra alimento. As formigas ficaram um tempo sem serem alimentadas. As gotas de formigas pingam sucessivamente e apresentam o mesmo expoente da torneira gotejante. . . . 149
4.12 Enervação do sistema nervoso autônomo mostrando o sistema nervoso simpático (vermelho) e o parassimpático (azul). 152
4.13 Esquema do laço negativo de retroalimentação responsável pelo controle da pressão arterial, o barorreflexo. Estímulos dos neurônios aferentes excitam o parassimpático ("vagal"), que tende a diminuir a taxa de batimentos. O sistema simpático tende a aumentar os batimentos, mas é inibido pelo parassimpático, levando à queda de pressão. 153
4.14 Séries de pressão arterial para ratos do (a) grupo controle; (b) grupo agudo e (c) grupo crônico (20 dias depois da desnervação). A série aguda é altamente não estacionária. As médias da pressão para os diversos grupos são (a) 116.55 ± 10.15mmHg, (b) 178.31 ± 31.15 mmHg e (c) 129.95 ± 9.32 mmHg. 155
4.15 Resultados de DFA para vários ratos do grupo controle, agudo e crônico. Existe uma mudança de comportamento, por volta de $n \approx 35$ para os ratos controles: a série é não estacionária para valores menores que estes.A mudança de comportamento não aparece no grupo agudo (b) e voltam a aparecer no grupo crônico (c), embora em uma posição mais avançada ($n \approx 100$). Os expoentes α serão considerados como sendo os para maiores distâncias, isto é, além do crossover quando for o caso. 156

4.16 Resultados para a pressão sistólica média MASP e o expoente α das flutuações para o grupo controle (ctr), agudo (1d) e crônico (20d). Os valores para os grupos crônico e controle são estatisticamente os mesmos. O grupo agudo apresenta não-estacionaridades ($\alpha = 1.23 \pm 0.09$). 157
4.17 Para modelar o controle da pressão arterial, vamos considerar um modelo de movimento Browniano, dirigido pelas forças f_s (em vermelho) e f_v (em verde). O equilíbrio (homeostase) é atingido para $f_v = f_s$. 157
4.18 Análise de DFA para séries artificiais de pressão arterial, geradas segundo o modelo de um caminhante aleatório forçado. De baixo para cima, os resultados são para $thr_s - thr_v = 3, 5, 8, 11$ e 15. A linha cheia representa $\alpha = 1.5$ para comparação. 158
4.19 Série temporal para medida de pressão em função do tempo (em minutos) para um dos sensores do tratamento de óleo de um plataforma petrolífera. Note que a série é estacionária em vários momentos, mas existem vários "outliers". 163
4.20 Resultados para uma série de medidas de temperatura. De cima para baixo temos a série original, a média dentro de uma janela, o desvio dentro da janela, a entropia de Shannon e o expoente α do DFA. 165

4.21 Fourier Detrended Analysis: um método auxiliar na análise do DFA. Em (a) mostramos uma série artificial mas com uma tendência sazonal de frequência muito menor que as frequências típicas das flutuações. Em (b) são mostradas as curvas da flutuação, obtidas através do DFA, para a série original, a série com 10, 50, 100 e 150 termos truncados na expansão de Fourier. O expoente α calculado da série original é maior que o obtido para truncamentos a partir de 50 termos. O valor obtido para α depois do truncamento do 50° termo é numericamente idêntico ao valor utilizado para construir a série original, representado no gráfico pela linha tracejada. 166
4.22 (a) Atrator de Lorenz (b) gráfico de recorrência do atrator. Um ponto j do atrator que pertence a uma vizinhança, representada pelo círculo cinza em (a), próximo a um ponto i (i e j representados em (a) pelos círculos pretos), corresponde a um ponto preto em (b), com coordenadas dadas pelos tempos de i e j, respectivamente. Sistemas determinísticos são representados por padrões nos gráficos de recorrência. Um sistema aleatório preencheria o gráfico com densidade praticamente uniforme. 167
4.23 Gráfico de recorrência para uma das séries estudadas. É possível distinguir uma forte componente determinística, representada pelos padrões em torno da diagonal e regiões fora da diagonal, representando eventos aleatórios. 168
4.24 Redes de sensores. As ligações aparecem em sensores que têm valores altos para a correlação cruzada. Sensores que possuem um número grande de ligações são redundantes e mostram as mesmas informações que outros. 169

4.25 Determinação dos segmentos, a partir de um erro máximo `max_error`. O limite do erro determina o número de segmentos e a qualidade da representação. . 171
4.26 Resultado da segmentação de uma série de fluxo (em vermelho), tomando apenas a média e o desvio padrão como critérios de segmentação (os limites dos segmentos são apresentados em azul). O número de segmentos é fortemente afetado pelos "outliers". A segmentação apresentada aqui não é adequada para efeitos de mineração pois existe um excesso de janelas no final da série e janelas muito estreitas, devido aos outliers. 172
4.27 Resultado da segmentação, utilizando o método de agregação, utilizando a entropia e o expoente α do DFA como coordenadas. Cada cor corresponde a um segmento, de um total de quatro. 174

Lista de Tabelas

2.1 Resultados da experiência de Fox. Para N agulhas de tamanho b lançadas, $n_\times$ cruzaram a linha, que separava tábuas de largura h. Nas duas últimas experiências, Fox rodou a mesa e removeu a tendência de lançamento das agulhas. Na terceira, escolheu agulhas maiores que as tábuas, melhorando a estatística de cruzamentos, sem aumentar consideravelmente o número de lançamentos. 33
2.2 Regras para automata celulares. Para cada uma das 2^3 vizinhanças da primeira linha, é escolhido o estado do sítio no tempo seguinte. O número binário com 8 bits é o nome da regra. 35
2.3 Tabela verdade para as operações booleanas. 44

1

Introdução

"We have a habit in writing articles
published in scientific journals
to make the work as finished as possible,
to cover up all the tracks, to not worry about the blind alleys or
describe how you had the wrong idea first, and so on.
So there isn't any place to publish, in a dignified manner,
what you actually did in order to get to do the work."
Richard P. Feynman

Há quase vinte anos, apresentava a tese "Problemas em Física Computacional: Aplicações da Técnica de Spin Múltiplo", como requisito para a obtenção do título de Doutor em Física. Já naquela época senti alguma dificuldade em escolher o título da tese, devido à variedade de temas abordados: supercondutividade, redes neurais e automata celulares. Depois deste tempo, eu passo pela mesma dificuldade, sendo que a pressão agora é muito maior.

Alguns dos problemas que estudei há vinte anos serão recordados neste trabalho pois servem de justificativa e conexão entre os vários assuntos tratados. O número de assuntos tratados agora é maior e tem uma clara justificativa: naquela época, apenas o Professor Paulo Murilo Castro de Oliveira e eu, como seu orientado, estávamos trabalhando em Física Computacional, no grupo

de “Sólidos”, no Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense. Durante este tempo, o número de estudantes, professores e pós-doutores no grupo de Sistemas Complexos cresceu exponencialmente.

Algumas características foram mantidas, como o seminário semanal e, principalmente, o interesse em aplicações multidisciplinares. Hoje atraímos estudantes de diversos centros e com diversos interesses: alguns por sistemas biológicos, outros por economia, e alguns até sem interesse inicial por computadores, e nem todos físicos. Colaboramos com médicos, fisiólogos, engenheiros, cientistas da computação e, pasmem, gerentes de projetos. Utilizamos desde então, DOS, Windows, DigitalUNIX,SunOS, AIX,FreeBSD, Linux, em XT’s, {2,3,4}86, Alphas, Pentiuns, {Dual,Quad}cores e até videogames, com 8,16,32,64 e 128 bits.

Procuramos, neste trabalho, não apenas apresentar diretamente os trabalhos e projetos com que estamos envolvidos, mas também servir de referência e apresentação destes trabalhos para novos interessados.

A Física Estatística lida com problemas com grande número de componentes, utilizando conceitos de probabilidades e estatística. A origem foi a mecânica estatística, que estuda os sistemas com grande número de componentes sujeito à ação de forças, que apareceu para justificar os resultados fenomenológicos da termodinâmica. A sequência natural de evolução foi do gás ideal para sistemas com interações simétricas, sistemas desordenados e finalmente com interações competitivas e conflitantes. O desenvolvimento destas técnicas permitiu a aplicação da Física Estatística em várias áreas do conhecimento.

As assimetrias e competições dificultam a solução analítica dos problemas citados. Nestes casos, as simulações de Monte Carlo aparecem como alternativa de métodos de solução dos problemas. Em alguns casos, as simulações podem servir de experimentos, não apenas como testes de teorias. Simulações são poderosas

como experimentos pois é mais fácil manter as variáveis sob controle.

No primeiro capítulo, apresentamos a mais importante ferramenta para o desenvolvimento deste trabalho: o método de Monte Carlo. Vamos dar alguns exemplos de sistemas complexos e porque isto interessaria aos físicos. O modelo de Ising é base para boa parte das simulações que usamos e mereceu uma rápida apresentação. Em seguida apresento a técnica que permitiu que simulássemos estes sistemas mesmo quando os recursos eram parcos: a técnica de spin múltiplo e que foi base da tese de doutorado há vinte anos.

Ainda no primeiro capítulo mostraremos algumas aplicações interdisciplinares em Geofísica, Economia, Biologia, Computação e Redes de computadores. Ainda que simples, o modelos buscam apenas capturar a essência e os elementos principais da dinâmica dos sistemas estudados.

O segundo capítulo fala sobre o problema do envelhecimento em populações e é fortemente ligado à Evolução e Seleção Natural. Dos três capítulos é o que tem menor relação com a formação comum aos físicos. Por esta razão, decidimos dedicar uma parte maior na introdução para tentar justificar o interesse pelo assunto. Embora existam várias contribuições relevantes ao tema, o fato de já existirem livros sobre o assunto e para que pudesse apresentar os outros capítulos, optamos por não fazer uma revisão completa, mas concentrarmos nas nossas contribuições para a confirmação da utilidade do modelo. Para ilustrar a diversidade de estratégias de vida, decidi acrescentar duas seções de aplicações em populações reais. Com estas seções, o leque da multidisciplinaridade fica mais aberto.

O terceiro capítulo é o mais aplicado. Apresentamos as contribuições de físicos para análise de sinais não-estacionários e sistemas dinâmicos, porém sem esquecer o avanço da área de análise de séries temporais, impulsionado por estatísticos, matemáticos,

engenheiros, etc. As aplicações são em sistemas físicos como a torneira gotejante, sistemas biológicos como o coração humano ou o controle de pressão em ratos até o controle de processos em uma plataforma petrolífera.

2

Aplicações do Método de Monte Carlo

"Science is what we understand
well enough to explain to a computer.
Art is everything else we do."
Donald Knuth

2.1 Simulações computacionais

Ciência vem do latim *"scientia"*, que significa conhecimento. A aquisição do conhecimento se dá através da aplicação do método científico, que consiste na técnica de investigar os fenômenos obtendo dados através de experimentos e observações, formular hipóteses, testá-las diretamente e as suas previsões, publicar os resultados e hipóteses e testar em novas situações. Enquanto, na Antiguidade, a pesquisa era principalmente teórica e filosófica, na Idade Média o experimento foi utilizado para testar teorias concorrentes (Copernici, 1543; Lindberg, 1967).

Embora seja componente crucial do método científico, nem sempre é possível realizar experimentos que testem as teorias por falta de condições técnicas ou de tempo necessário para a realização, como nos casos de experimentos envolvendo evolução, que trataremos nesta tese. Simulações computacionais representam a saída

para estes casos, testando teorias, previsões e mesmo apresentando solução impossíveis de serem obtidas através de cálculos teóricos, sem excessiva simplificação. Deste modo, simulações podem ser entendidas como poderosa ferramenta teórica e, ao mesmo tempo, fornecem dados a partir de experiências simuladas, com grau de controle maior que experimentos reais.

Como o poder dos computadores cresceu enormemente nos últimos anos com diminuição de custos proporcional, as técnicas de simulação também tiveram um grande desenvolvimento. Com computadores mais rápidos e com grande capacidade de armazenamento e memória é possível testar modelos com precisão e tamanhos impensáveis há vinte anos. Com isto, novos algoritmos foram desenvolvidos, ferramentas de visualização foram criadas, inspirando interpretações que levam à melhor compreensão do problema.

Este capítulo trata de método de Monte Carlo (Metropolis, 1987; Metropolis and Ulam, 1949), que é um método que utiliza amostragem aleatória repetidamente para calcular os resultados. O método foi inventado por Stanislaw Ulam quando jogava "paciência". Ulam primeiro tentou calcular a probabilidade de fechar um jogo de paciência usando análise combinatória. Depois de algum tempo, achou que seria mais prático jogar várias vezes e contar o número de sucessos. Mais tarde, apresentou a ideia a John von Neumann e começaram a aplicar o método para o problema da difusão de nêutrons. Ulam também aplicou o método para obter a probabilidade de encontrar uma vaga no estacionamento do laboratório.

O nome Monte Carlo foi proposto por Metropolis, inspirado pelos cassinos e os eventos estocásticos que ali são famosos. von Neumann criou um dos primeiros geradores de números aleatórios, "middle-square digits": um número inteiro de n dígitos elevado ao quadrado terá $2n$ dígitos (em média). O gerador consiste em retirar os n dígitos do meio do novo número. O método da inversão, que gera eficientemente números aleatórios segundo distribuições

n o uniformes mas inversíveis, e o método da rejeição, menos eficiente porém mais geral que o da inversão, foram também propostos nesta época (o último está em uma carta manuscrita de von Neumann para Ulam). Enrico Fermi chegou a construir um modelo analógico para as realizações das simulações enquanto o ENIAC não poderia ser usado 2.1. Este é um brilhante exemplo de simulação que não envolve um computador digital.

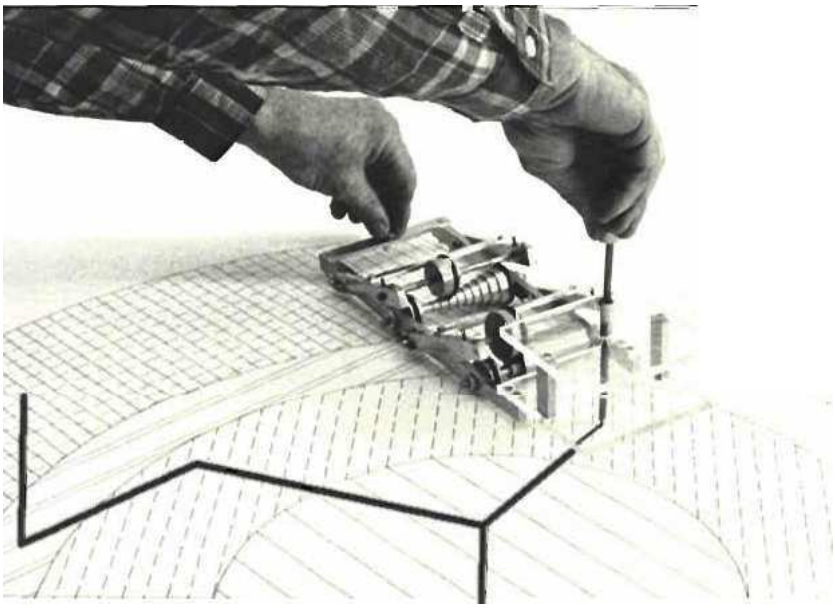


Figura 2.1: *FERMIAC: um modelo analógico para simular a difusão de nêutrons em duas dimensões, proposto por Enrico Fermi e construído por Percy King, em Los Alamos. Os tambores no carro eram ajustados de acordo com o material que o nêutron atravessa. O mapa das regiões é colocado sobre a superfície e determinam quando os tambores devem se ajustados. Os dígitos sorteados determinavam a direção, a distância viajada até a próxima colisão e um terceiro se é um nêutron rápido ou lento.*

O método de Monte Carlo é usado hoje em diversas áreas do conhecimento, mas o primeiro uso "nobre" foi em um problema de Física Nuclear: a difusão de nêutrons. O método de Monte Carlo também é bastante usado na solução de integrais multidimensionais. Para reforçar o significado de simulações como experimentos, vamos citar mais uma curiosa aplicação do método de Monte

Carlo: as agulhas de Buffon. Georges-Louis Leclerc, o Comte de Buffon, é mais conhecido pelos 35 volumes de *Histoire naturelle, générale et particulière*, publicados entre 1749 e 1788. Entre suas ideias constam a hipótese da formação dos planetas através de colisões de cometas com o Sol, a negação do dilúvio e a observação de partes de animais que não são úteis e podem ser a prova que os mesmos evoluíram (Buffon foi um dos inspiradores de Lamarck e Darwin) e o cálculo da idade da Terra como superior aos 4000 anos, impostos pelo bispo Ussher.

O problema das agulhas de Buffon é simples: se o chão é composto de tábuas paralelas de madeira com largura h, qual a probabilidade de uma agulha de tamanho b cruzar a linha entre duas tábuas ? Um cálculo simples pode determinar a probabilidade se $h > b$, ver fig. 2.2.

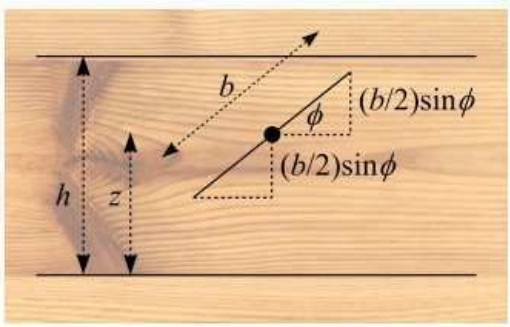


Figura 2.2: *Agulha de Buffon. Tábuas de largura h são colocadas paralelamente. Agulhas de tamanho b são soltas e desejamos calcular a probabilidade da agulha cruzar uma linha.*

A função densidade de probabilidade do centro da agulha estar a uma distância z da linha mais próxima é uniforme e dada por

$$P(z)dz = \frac{2}{h}dz \tag{2.1}$$

A densidade de probabilidade da agulha estar inclinada de θ em

relação à linha mais próxima também é uniforme e dada por

$$P(\phi)d\phi = \frac{2}{\pi}d\phi \tag{2.2}$$

Como as duas variáveis z e ϕ são independentes, a densidade de probabilidade conjunta será

$$P(z,\phi)dzd\phi = \frac{4}{h\pi}dzd\phi \tag{2.3}$$

A agulha cruza a linha se

$$z \leqslant \frac{b}{2}\sin\phi \tag{2.4}$$

A probabilidade de cruzar a linha será dada então por

$$\int_{\phi=0}^{\pi/2}\int_{z=0}^{(b/2)\sin\phi}\frac{4}{h\pi}dzd\phi = \frac{2b}{h\pi} \tag{2.5}$$

A solução acima foi demonstrada, pela primeira vez, por Laplace. Mario Lazzarini realizou a experiência de Buffon, em 1901 e obteve a excelente estimativa de 355/113 para π, com desvio de 3×10^{-7}. O experimento de Lazzarini é um curioso exemplo da importância do planejamento na utilização do método de Monte Carlo: ele usou 3408 agulhas, o que não pode assegurar a precisão obtida. Lazzarini escolheu agulhas cujo comprimento é 5/6 das tábuas, já sabendo que 355/113 é uma excelente aproximação para π. Se na realização do experimento tivermos $n_\times$ agulhas cruzando a linha, de N atiradas, então

$$\pi = \frac{5}{3}\frac{n_\times}{N} \tag{2.6}$$

Para atingir este resultado, Lazzarini realizou lançamentos de 213 agulhas de cada vez (355/113*3/5=213/113). O "resultado" esperado seria 113 agulhas cruzando a linha. Lazzarini realizou o experimento tantas vezes foram necessárias para obter o valor "estimado", no caso 16 vezes, por isto o valor de 3048 agulhas. Em-

bora tenha trapaceado, Lazzarini reproduziu um outro problema que apresentaremos algumas vezes neste trabalho: o tempo de primeira passagem de um caminhante aleatório.

Um outro truque engenhoso reportado por um certo Capitão O. Fox em 1894, reproduz, nesta mesma experiência, um problema que enfrentamos nas simulações de Monte Carlo em computadores: a eliminação de tendências espúrias. Lançando mais de 500 agulhas, o capitão notou que a estimativa de π era maior que a esperada. Ele repetiu o experimento, girando ligeiramente a mesa, de tempos em tempos, onde as agulhas caíam. O resultado da segunda experiência foi melhor que a primeira, como mostra a Tabela 2.1: o que o capitão fez é análogo a retirar a tendência que alguns geradores de números aleatórios apresentam.

N	$n_\times$	b	h	π
500	236	3	4	3,1780
530	253	3	4	3,1423
590	939	5	2	3,1416

Tabela 2.1: *Resultados da experiência de Fox. Para N agulhas de tamanho b lançadas, $n_\times$ cruzaram a linha, que separava tábuas de largura h. Nas duas últimas experiências, Fox rodou a mesa e removeu a tendência de lançamento das agulhas. Na terceira, escolheu agulhas maiores que as tábuas, melhorando a estatística de cruzamentos, sem aumentar consideravelmente o número de lançamentos.*

Hoje realizamos em um computador, uma experiência semelhante a de Lazzarini, sem precisar "apelar" para a sorte: milhões de agulhas são simuladas em segundos. O exemplo acima mostra como o método de Monte Carlo pode ser útil para o cálculo de integrais. Em particular o método é vantajoso para integrais multidimensionais, pois o erro cai com a raiz quadrada do número de lançamentos, independente do número de dimensões. O custo computacional de métodos tradicionais como de Simpson, ou dos trapézios, crescem com o número de dimensões.

A partir da próxima seção, vamos apresentar algumas contribuições e aplicações do método de Monte Carlo porém, como é o objetivo deste trabalho, dando ênfase às aplicações multidisciplinares.

2.2 Sistemas Complexos

Muitas das simulações e modelos que apresentaremos neste trabalho se referem a sistemas complexos. Sistemas complexos são formados por partes interconectadas que interagem de tal forma que apresentam comportamentos ou propriedades que não são evidentes considerando as propriedades individuais. Emergência é o nome dado ao aparecimento destas propriedades ou padrões a partir de elementos mais simples. O aparecimento de padrões parece violar a segunda lei da termodinâmica, já que a ordem aparece a partir da interação de vários sistemas menores que não apresentam esta ordem. No entanto, a ordem e os padrões podem aparecer por conta da interação do sistema com o meio. Sistemas não-lineares, isto é, para os quais não vale o princípio de superposição são candidatos a serem sistemas complexos, já que a saída não é a simples soma das entradas. No estudo de sistemas dinâmicos, a não linearidade pode significar sensibilidade às condições iniciais e ao caos.

Como discutimos, as propriedades interessantes dos sistemas complexos aparecem por conta das interações e não necessariamente da complexidade inerente das partes individuais. Um exemplo simples são os automata celulares (Neumann, 1966; Wolfram, 2002): são sistemas discretos com um número dado finitos de estados, colocado em um rede e cuja dinâmica é feita também em tempos discretos, seguindo alguma regra ou lei que depende da vizinhança. Os automata mais simples são os unidimensionais de Wolfram: o estado de cada sítio em uma rede regular unidimensio-

nal pode assumir apenas dois valores: 0 ou 1, "On" ou "Off", ativo ou inativo, etc. São exemplos de sistemas Booleanos, portanto. O estado de um sítio depende apenas de sua vizinhança. No caso mais simples, o estado de um sítio depende dos primeiros vizinhos e dele próprio. Como o estado depende de 3 sítios, cada um deles sendo uma variável binária (ou um "bit", *bi*nary digi*t*), existem 2^3 diferentes vizinhanças. Uma regra consiste em escolher uma possível saída para cada uma das vizinhanças, o que dá um total de $2^{2^3} = 256$ regras ou automata. A representação da regra em decimal serve para nomearmos as regras,como na Tabela 2.2. Em geral trabalhamos com 128 regras, apenas as regras pares onde o sítio e seus vizinhos estão no estado 0, sempre gera o estado 0 ($000 \rightarrow 0$) no tempo posterior.

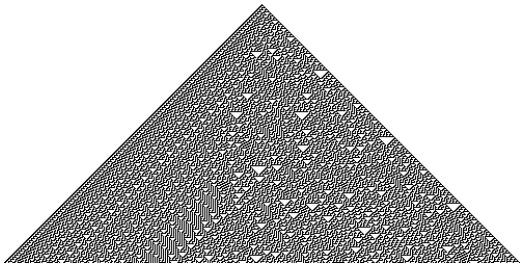
111	110	101	100	011	010	001	000	Regra
0	0	0	1	1	1	1	0	30
0	1	0	1	1	0	1	0	90
0	1	1	0	1	1	1	0	110

Tabela 2.2: *Regras para automata celulares. Para cada uma das 2^3 vizinhanças da primeira linha, é escolhido o estado do sítio no tempo seguinte. O número binário com 8 bits é o nome da regra.*

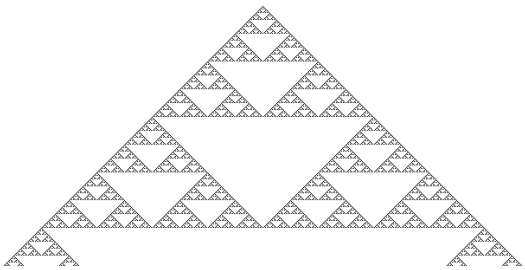
As regras de evolução, ou automata definem diversos comportamentos. Wolfram (2002) sugere quatro classes de automata:

- **Classe I** para qualquer condição inicial, o estado final é homogêneo (como a regra 0, por exemplo).
- **Classe II** as configurações finais são oscilantes ou localizadas.
- **Classe III** as configurações finais parecem caóticas ou aleatórias, como a regra 30, na fig. 2.3(a).
- **Classe IV** Estruturas locais podem se propagar indefinidamente. Padrões ou estruturas interagem. A regra 110 na fig.2.3(c) é um exemplo. A regra 90 parece pertencer a esta

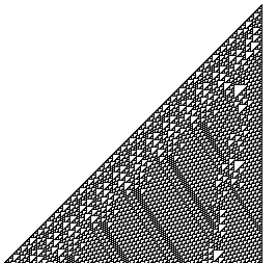
classe, se olharmos a figura 2.3(b), mas as estruturas ordenadas desaparecem se iniciarmos com condições aleatórias.



(a) Regra 30



(b) Regra 90



(c) Regra 110

Figura 2.3: *Configurações temporais de automata celulares para as regras mostradas na Tabela 2.2. Estes são três exemplos de regras exibindo comportamento complexo. O tempo é a vertical e a configuração inicial é apenas um sítio ativo.*

Existem outras classificações para automata celulares, por exemplo, quanto à reversibilidade, se dependem da soma dos estados dos vizinhos (automata totalísticos), etc. Muitas aplicações em áreas como computação, ecologia, mecânica dos fluidos e outras também já foram implementadas. Uma definição um pouco mais relaxada inclui automata probabilísticos, que seguem regras de

acordo com probabilidades, que são aplicações genuínas do método de Monte Carlo.

Automata booleanos apresentam características interessantes que permite eficientes implementações em computadores: com apenas dois estados, a quantidade de memória necessária para armazenamento é de apenas um bit; sendo a dinâmica paralela, é possível implementá-los usando algoritmos paralelos. Discutiremos alguns deles mais adiante. Na seção seguinte vamos apresentar um modelo simples, estudado por Ising (1925), para a transição ferromagnética, que apresenta também comportamento coletivo e emergência.

2.3 O Modelo de Ising

O modelo de Ising foi proposto para tentar explicar a transição de fase ferro-paramagnética, presente nos materiais ferromagnéticos. Na versão original, spins eram dispostos em uma rede unidimensional e estavam sujeitos a uma interação ferromagnética, que tende a alinhar os spins. Em uma dimensão, porém, não aparecem transições de fase em modelos de equilíbrio. O problema com o modelo de Ising é que, em uma dimensão, a maximização da entropia vence a disputa mesmo para os menores valores de temperatura. Onsager (1944) conseguiu obter a solução exata em duas dimensões na rede quadrada, onde o modelo apresenta transição de fase à temperatura finita. Ainda não é conhecida a solução exata para o modelo do Ising em três dimensões, sendo o método de Monte Carlo uma das ferramentas mais poderosas para o estudo deste sistema.

A energia do modelo de Ising pode ser escrita como :

$$E = -\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \tag{2.7}$$

onde os spins assumem valores ± 1, J_{ij} é a intensidade do acopla-

mento ferromagnético e a soma é feita sobre pares de spins vizinhos. Se $J_{ij} > 0$, o estado de menor energia corresponde aos spins alinhados. Se $J_{ij} < 0$, o estado de menor energia corresponde aos spins opostos (antiferromagnetismo) e $J_{ij} = 0$ não há interação entre os spins. Materiais desordenados possuem J_{ij} diferentes para pares ij diferentes. Nos ferromagnetos, podemos considerar os $J_{ij} = J$ como constantes.

Vamos tratar o modelo de Ising no ensemble canônico (Salinas, 2005), isto é, em contato com um reservatório que mantém a temperatura constante. A probabilidade de uma dada configuração com energia E aparecer é dada por

$$P(E) \propto e^{-\beta E} \tag{2.8}$$

onde $\beta = 1/kT$. Ferromagnetos apresentam uma transição de fase em que a magnetização vai a zero na temperatura crítica, ou temperatura de Curie. A magnetização é dada por

$$M = \sum_i S_i \tag{2.9}$$

Em baixas temperaturas, os spins ficam alinhados e em temperaturas muito altas, sua orientação é aleatória e a magnetização vai a zero. Na temperatura crítica, um aglomerado, ou "cluster", de spins paralelos se forma, com grande área e domina o comportamento do material.

Na fig. 2.4 mostramos os resultados de uma simulação de Monte Carlo comparado com o resultado exato de Onsager (1944) para um sistema infinito. A simulação é feita utilizando o algoritmo de Metropolis (Metropolis et al., 1953), que soma hoje mais de 10.000 citações. Diferente do método de Monte Carlo para solução de integrais ou do problema das agulhas de Buffon, da seção 2.1, o algoritmo de Metropolis usa amostragem por importância: as configurações que aparecem na dinâmica, aparecem com a mesma

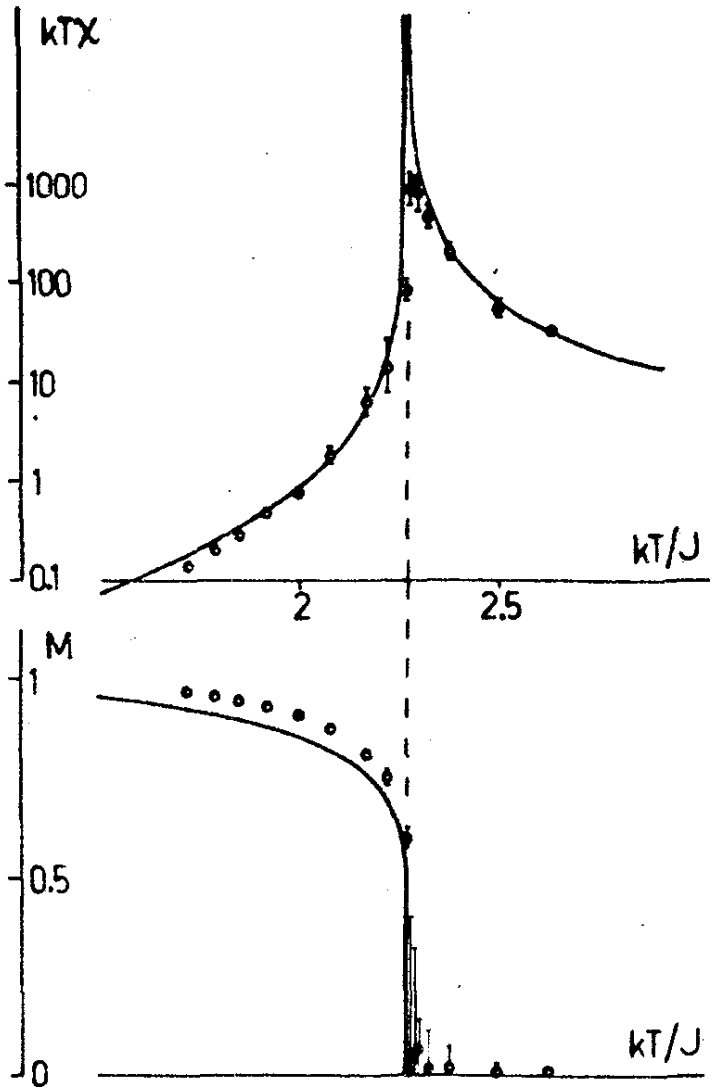


Figura 2.4: *Resultados para a simulação do modelo de Ising utilizando o método de Monte Carlo. Em cima, a susceptibilidade magnética ($\partial M/\partial H$) e, embaixo, a magnetização em função da temperatura, extraído de de Oliveira and Penna (1988).*

probabilidade de equilíbrio, dada por (2.8). Para uma referência atual de método de Monte Carlo em mecânica estatística, veja Landau and Binder (2005).

Para compreender a importância do algoritmo de Metropolis e a amostragem por importância, considere o problema do modelo de

Ising com N spins. Existem 2^N diferentes configurações de spins, que representaremos por σ. A maioria destas configurações contribui com um peso estatístico irrelevante, dependendo da temperatura (apenas configurações com energias próximas à energia média do sistema são significativas). Para obter médias estatísticas razoáveis, considerando a amostragem simples, deveríamos testar um número um pouco menor que 2^N para garantir que configurações pouco prováveis tenham seu peso próximo ao correto. Enquanto $N \approx 10^{23}$ em sistemas reais, sistemas como $10^6 - 10^9$ podem ser simulados em nossos computadores pessoais. Podemos ver que o número de configurações necessárias é impraticável com os nossos recursos computacionais, isto é, 2^{10^6}!

Para calcularmos a média de uma grandeza de interesse F, como a magnetização na fig. 2.4, fazemos

$$\bar{F} = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} F(\sigma) e^{-\beta E_\sigma} \tag{2.10}$$

onde $F(\sigma)$ é o valor da grandeza na configuração σ, que tem energia E_σ. O fator de normalização é a função de partição

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_\sigma}. \tag{2.11}$$

Se, no entanto, as configurações σ aparecerem na dinâmica, com a distribuição de probabilidades dada por

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\sigma} \tag{2.12}$$

a média $\bar{F}$ pode ser calculada, em M amostras, como

$$\bar{F} = \frac{1}{M} \sum_{\sigma} F(\sigma) \tag{2.13}$$

O problema é escolher as configurações segundo a distribuição (2.12). Se considerarmos a inversão de um spin levando à con-

figuração ξ, que muda a energia de ΔE em relação à configuração anterior, com taxa de transição $w_{\xi,\sigma}$, teremos que

$$P(\sigma) = \sum_{\xi} w_{\xi,\sigma} P(\xi) \tag{2.14}$$

A condição acima é chamada de balanço detalhado e garante a existência de um estado de equilíbrio. No equilíbrio, as taxas de transição serão

$$w_{\xi,\sigma} = \frac{P(\sigma)}{P(\xi)} = \frac{e^{-\beta E_\sigma}}{e^{-\beta E_\xi}} = e^{-\beta \Delta E} \tag{2.15}$$

Uma solução possível que satisfaz a condição (2.15), é usar a $w_{\xi,\sigma} = e^{-\beta \Delta E}$ para $\Delta E > 0$ e 1 para $\Delta E < 0$.

Em resumo, o algoritmo de Metropolis é implementado da seguinte maneira:

1. partindo de uma configuração de spins, é feito um movimento no espaço de configurações, por exemplo, invertendo um spin;

2. se a energia do sistema diminui, a nova configuração é aceita e selecionamos outra configuração.

3. se a energia do sistema aumenta de ΔE, a nova configuração é aceita com probabilidade $e^{-\Delta E/kT}$.

O algoritmo de Metropolis é semelhante ao algoritmo de rejeição, proposto por von Newmann, para gerar números aleatórios segundo qualquer distribuição.

Uma simulação como a mostrada na figura 2.4 é feita considerando médias no tempo, após várias relaxações, e médias em diferentes condições iniciais. Podemos notar que as barras de erro são maiores para temperaturas próximas à temperatura crítica: o efeito é conhecido como "critical slowing down" e é comum em simulações de sistemas complexos. O alcance das correlações é da ordem do tamanho do sistema, portanto é preciso mais tempo para que as informações se propaguem na rede. Podemos notar, também na

figura 2.4, que os resultados numéricos são próximos ao resultado exato para o tamanho infinito da amostra (Onsager, 1944). A técnica que estuda como extrapolar os resultados de amostras finitas para o limite termodinâmico chama-se "finite size scaling" (escalonamento de tamanho finito) e foi proposta por Fisher, veja Fisher (1998) para um artigo de revisão.

Não é possível encontrar uma relação entre o tempo de Monte Carlo e o tempo real, pois isto dependeria do tipo de movimento que é realizado no espaço das configurações. Neste parágrafo sugerimos que a dinâmica fosse a de "single-spin flip", um spin de cada vez, mas há outras, envolvendo vários spins, como os algoritmos de cluster (Landau and Binder, 2005). A dinâmica de atualização pode alterar a velocidade com que um sistema que parte de uma dada configuração aleatória atinja a distribuição de probabilidades no equilíbrio. Estes são problemas e limitações do método de Monte Carlo que devem ser levados em conta ao planejarmos uma simulação.

2.4 Acelerando as Simulações

Na seção anterior já havíamos adiantado ao menos dois problemas nas simulações de Monte Carlo: o primeiro é o tamanho pequeno dos sistemas simulados comparados com os sistemas reais e o segundo é demora da convergência na região crítica. Em termos de custo computacional, envolvem a quantidade de memória e o poder de processamento. O desenvolvimento de algoritmos e técnicas de simulação tem avançado bastante no sentido de melhorar o desempenho do método. Para uma ilustração do avanço dos algoritmos, comparado com o avanço do poder de processamento, veja fig. 2.5. Para o avanço nos tamanhos, veja Stauffer (2000).

A técnica que passaremos a descrever aqui é o "multispin coding" (Creutz et al., 1979; Zorn et al., 1981). Consiste em utilizar

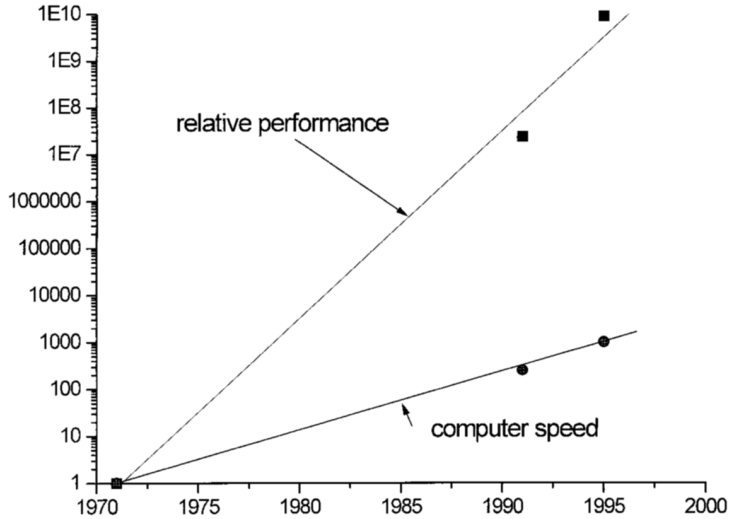


Figura 2.5: *Avanço relativo da velocidade da simulação do modelo de Ising comparado com o aumento da velocidade dos computadores. Extraído de Landau and Binder (2005).*

o fato das variáveis de estado serem booleanas para armazená-las em bits, ao invés de números inteiros ou reais. Não só a memória é economizada como também a velocidade é muito aumentada: em computadores de 64 bits, é possível realizar 64 operações de uma só vez, sendo cada uma delas ainda mais rápida que a multiplicação entre variáveis inteiras. É possível, então, realizar simulações paralelas em um único processador ou "core".

Vamos apresentar aqui a implementação da técnica de multispin para o modelo de Ising. Para detalhes da implementação, veja de Oliveira and Penna (1988) e Oliveira (1991). A primeira modificação é redefinir as variáveis de spin S_i, para

$$\sigma_i = \frac{1}{2}(1 - S_i) \tag{2.16}$$

fazendo a correspondência $S_i = +1, -1 \mapsto \sigma_i = 0, 1$. A energia do modelo de Ising, eq. (2.7), contém termos que se somam, para spins iguais. A operação binária, ver Tabela 2.3, que representa a multiplicação é a "ou exclusivo" ou XOR. Olhando a tabela, fica claro que

o XOR é que motivou a escolha do mapeamento $\sigma_i = 0 \mapsto S_i = -1$. Finalmente, precisamos realizar a soma entre todos os pares de

σ_i	σ_j	AND (&)	OR (|)	XOR ($\wedge$)
0	0	0	0	0
0	1	0	1	1
1	0	0	1	1
1	1	1	1	0

Tabela 2.3: *Tabela verdade para as operações booleanas.*

spins vizinhos. O XOR, que representaremos por $\wedge$, entre palavras de 64 bits, retorna uma outra palavra de 64 bits, com "1"s nas posições onde os bits das palavras originais estão em estados diferentes. Porém, a multiplicação é feita para spins vizinhos. Podemos construir uma palavra contendo os bits vizinhos a uma posição i, realizando um deslocamento, ou "shift", na palavra. Os deslocamentos podem ser à direita, à esquerda e circulares (o bit que é descartado no deslocamento normal é colocado na posição oposta, semelhante às condições periódicas de contorno).

Assim, o somatório da eq. (2.7) deve ser substituído pela operação de contar bits 1's, que representaremos por `bitcount`. Existem vários algoritmos para a contagem de bits (Oliveira, 1991), mas o mais eficiente consiste em guardar o número de bits em uma tabela, se a operação for realizada muitas vezes. Assim, a energia do modelo de Ising será reescrita como

$$E = 2J \, \texttt{bitcount} \left(\sigma_i \wedge \sigma_j \right) \tag{2.17}$$

Com isto, conseguimos ganhos de velocidade maiores que o tamanho da palavra do processador (hoje é comum encontrarmos 64 bits, em computadores pessoais). A economia de memória também é da mesma ordem. Existe um efeito adicional de ganho de velocidade: armazenando mais variáveis em menor espaço, aumentamos a probabilidade da variável ficar armazenada na memória cache do computador, que é muito mais rápida que a memória RAM (mais

do que 15 vezes). Portanto o ganho pode chegar à duas ordens de grandeza, implementando a técnica de multispin.

Podemos ganhar ainda mais, implementando o método em processadores com palavras maiores, como o Cell, do consórcio Sony-IBM-Toshiba, de 128 bits, e ainda aproveitando o fato dos novos processadores possuírem mais de um core. Em particular, o Cell possui 8 unidades especiais, as SPEs ("synergistic processor elements"), que podem realizar processamento em paralelo, em altíssima velocidade e com memória cache programável. Por esta razão é que submetemos um projeto para montagem de um cluster de Playstations 3 (que utilizam este processador) para processamento massivamente paralelo. O projeto foi aprovado no âmbito do programa "Grandes desafios da computação na próxima década", do CNPq. Ao contrário da tendência da programação atual, que depende do desenho e habilidade dos compiladores, este novo processador exige mais dos programadores, oferecendo desempenho muito acima do obtido com a programação tradicional.

O algoritmo de Metropolis tem uma particularidade que dificulta a implementação toda em paralelo: para cada spin cuja inversão aumentará a energia, é necessário sortear um número aleatório. Esta limitação pode ser evitada se gerarmos números aleatórios com concentrações de bits iguais às probabilidades dependentes da temperaturas que queremos simular. Esta saída foi proposta e estudada por Penna and Oliveira (1990).

Como mostramos na fig. 2.4, para definirmos a temperatura da transição, extraírmos os resultados em diversas temperaturas ao redor da transição e fizemos médias em várias configurações. Porém em temperaturas próximas à transição aparece a necessidade de maior tempo de computação para obtermos boas médias (o que justifica as maiores barras de erro em torno da temperatura crítica). O esforço computacional demandado então é enorme. Uma maneira simples de minimizar este esforço é notar que, para o cálculo das médias, como eq. (2.10), existem dois termos: $F(\sigma)$,

o valor da grandeza na configuração σ e os pesos de Boltzmann $e^{-\beta E_\sigma}$. Se em uma simulação armazenarmos $F(\sigma)$ para todas as configurações σ, poderíamos utilizar estes valores em uma outra temperatura β sem precisar rodar outra simulação, apenas recalculando os pesos de Boltzmann. Este raciocínio é base dos métodos de histograma (Landau and Binder, 2005). A ideia que acabei de apresentar apresenta problemas pois a simulação em um dada temperatura restringe as configurações que aparecem, afinal este é o objetivo do algoritmo de Metropolis: fazer com que apenas as configurações relevantes naquela temperatura apareçam. Ao tentarmos extrapolar para temperaturas muito diferentes, não teremos uma boa estatística para as médias, pois as configurações de interesse não aparecem com frequência na simulação original, conforme mostrado na fig. 2.6.

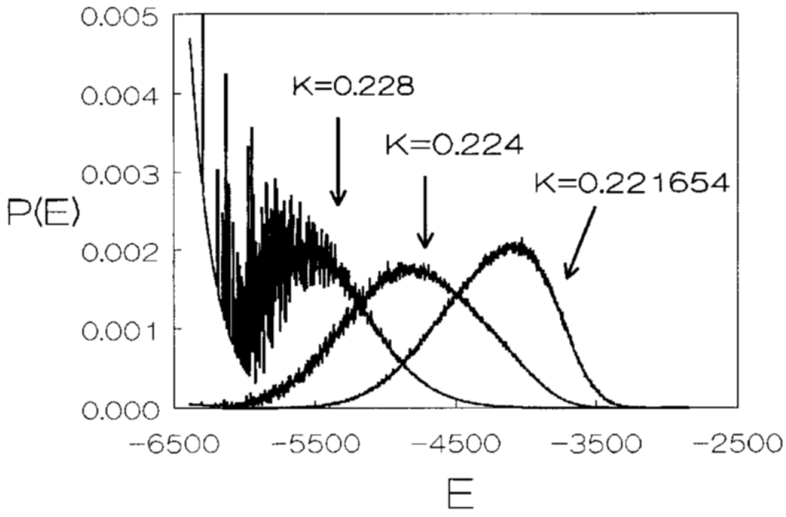


Figura 2.6: *Distribuição de probabilidades para uma simulação em $\beta J = 0.221654$, tamanho de rede $L = 16$ e reconstruídas nas outras temperaturas. Mesmo para este valor pequeno de tamanho de rede e para valores não muito distantes da temperatura simulada, os histogramas são cheios de ruído. Extraído de Landau and Binder (2005).*

O problema da repesagem dos histogramas consiste então em um problema de passeio no espaço de fases. Novamente olhando

a eq.(2.10), observamos que não há nenhuma obrigatoriedade em obedecer os pesos de Boltzmann para a evolução do sistema, já que isto seria corrigido na fase de repesagem. Utilizando uma dinâmica semelhante a um caminhante aleatório, conseguimos obter um histograma que, diferente da fig. 2.6, cobre uma faixa extensa de energias, daí porque chamado de "Broad Histogram Method" (de Oliveira et al., 1996, 1998) ou simplesmente BHM.

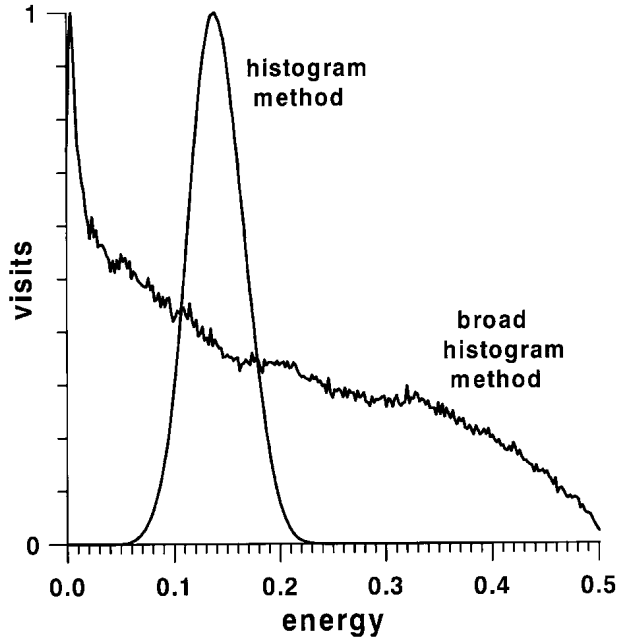


Figura 2.7: *Histograma de visitações o Broad Histogram Method e o método de histogramas simples para uma rede 32x32. Extraído de de Oliveira et al. (1996).*

O BHM é um método poderoso e já foi utilizado para Hamiltonianas com mais de um parâmetro, onde apenas uma só simulação fornecia dados para toda a faixa de valores de parâmetros e temperaturas (Lima et al., 2000b), para sistemas com espectro contínuo de energias (Muñoz and Herrmann, 1999), comparado com outros métodos multicanônicos (Lima et al., 2000a), utilizado em estatísticas não-extensivas (Lima et al., 1999) e outras aplicações. O artigo original (de Oliveira et al., 1996) tem 97 citações e é o 4º artigo

mais citado do *Brazilian Journal of Physics*. Como suas citações são relacionadas a métodos computacionais e aplicações a sistemas magnéticos, não o descreveremos em detalhes neste trabalho, cujo principal objetivo é demonstrar aplicações multidisciplinares destas técnicas.

2.5 Planos inclinados, avalanches e terremotos

Antes de apresentarmos as aplicações multidisciplinares do modelo de Ising e do método de Monte Carlo, vamos apresentar uma simulação de um sistema físico simples, que inspirou uma aplicação multidisciplinar, mas que servirá para apresentar alguns conceitos importantes que serão repetidos ao longo deste trabalho. O sistema é um bloco descendo em um plano inclinado com atrito, fig. 2.8. A diferença entre este problema e aquele tratado nos primeiros cursos da graduação em Física, é que nesta versão o atrito vai depender da posição do bloco.

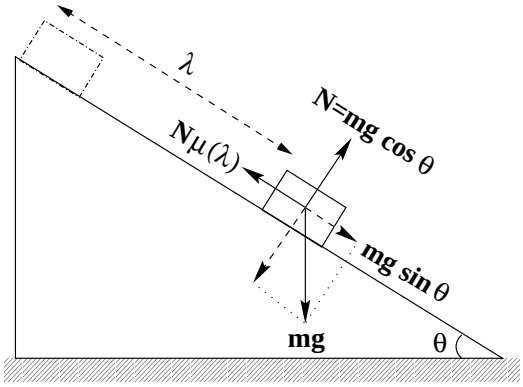


Figura 2.8: *Bloco descendo um plano inclinado de ângulo θ com atrito μ que depende da posição do bloco.*

A interface de contato entre dois sólidos, devido à rugosidade da superfícies, consiste de muitos pontos ao invés de uma região

contínua (Bowden and Tabor, 1950) ou uma interface de multi-contatos. O atrito depende de vários fatores como a velocidade dos corpos, suas massas, da natureza dos materiais, mas também de quantas vezes as superfícies estiveram em contato, por quanto tempo (Caroli and Velický, 2003) e outros fatores.

O que nos motivou a estudar o sistema foi uma publicação (Brito and Gomes, 1995) que mostravam resultados inesperados. Brito e Gomes realizaram experiências com um arranjo como o da fig. 2.8, para inclinações do plano perto do ângulo crítico θ_c. O impacto de um martelo colocava o bloco em movimento que deslizava por uma distância λ. A distribuição experimental $N(\lambda)$, para deslizamentos maiores que λ, se comportava como $N(\lambda) \sim \lambda^{-\delta}$, para $\theta \approx \theta_c$. O expoente $\delta \approx 1/2$ e não parece depender dos materiais envolvidos. Outros expoentes como τ_1 em $\bar{\lambda} \sim (\theta_c - \theta)^{-\tau_1}$, também em $\theta \to \theta_c^-$, foram obtidos ($\tau_1 \approx 0.23$).

O modelo que vamos estudar é bastante simples. O bloco será uma palavra do computador com N_{max} bits 1's. A superfície será também uma sequência de bits. O atrito local será dado pelo número de contatos 1's no plano e no bloco simultaneamente. O número de contatos pode ser determinado em paralelo, usando a operação AND, como definida em 2.3.

O coeficiente de atrito será dado por

$$\mu(\ell) = b\frac{N(\ell)}{N_{\max}}, \tag{2.18}$$

onde ℓ é a posição do bloco no plano e $N(\ell)$ é o número de contatos na posição ℓ. b é uma constante que depende do material. O balanço de energia será

$$dK + \left(mg\mu(\ell)\cos\theta - mg\sin\theta\right) d\ell = 0 \tag{2.19}$$

onde K é a energia cinética. Definiremos a energia cinética reduzida

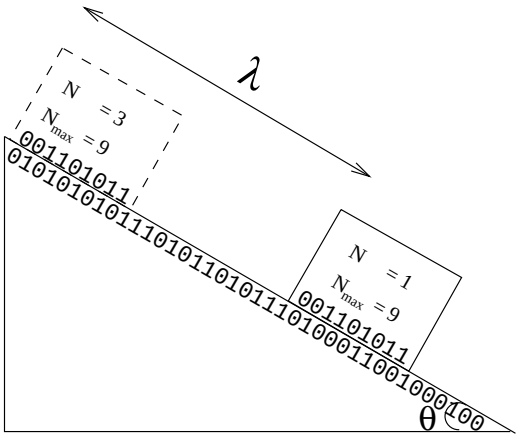


Figura 2.9: *Mapeamento da situação da fig. 2.8, para implementação com bits. O atrito será dado pelo número de contatos entre o plano e o bloco.*

como $k(\ell) = K(\ell)/mg\cos\theta$ ou

$$\frac{\partial k(\ell)}{\partial \ell} = \tan\theta - \mu(\ell) \tag{2.20}$$

A equação acima deve ser integrada até que a energia cinética se torne zero. Se $\mu(\ell) = C$, isto é independente of ℓ, teremos $\lambda_C = v_0^2/2g\cos\theta(C - \tan\theta)$. Os resultados de Brito e Gomes porém mostram uma larga distribuição de valores para λ. Se as incertezas são independentes deveríamos que os valores de λ se distribuíssem como uma gaussiana em torno de λ_c. Isto daria uma distribuição exponencial para $N(\lambda)$ e não uma lei de potência como reportado por Brito e Gomes, para $\theta \approx \theta_c$!

Primeiramente realizamos simulações com concentrações de bits 1's C_b no bloco e C_p no plano. A equação (2.20) se torna, em nosso modelo discreto:

$$\Delta k = a\left(\tan(\theta) - \frac{bN(t)}{N_{max}}\right). \tag{2.21}$$

O bloco é movido um bit de cada vez, até que sua energia cinética

se anule. O ângulo crítico será dado por

$$\tan\theta_c = \overline{\mu} = bC_pC_b, \tag{2.22}$$

Realizamos então 10^8 experimentos ou 10^5 vezes mais que Brito e Gomes e encontramos o resultado da fig. 2.10.

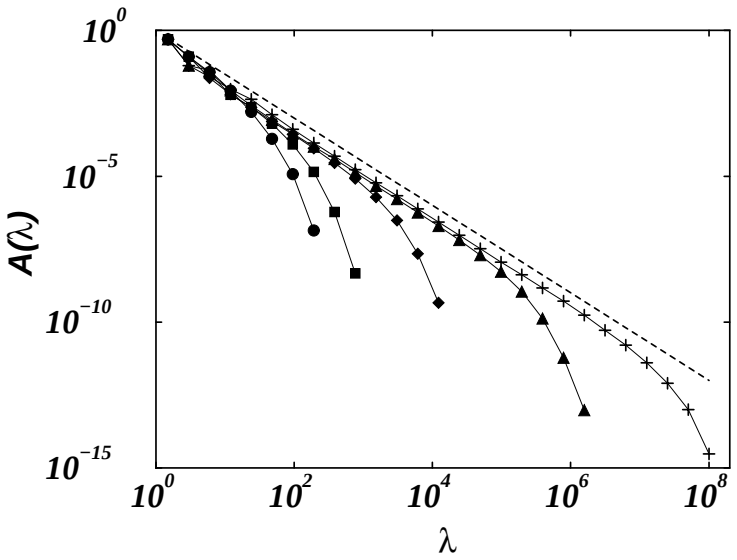


Figura 2.10: *Distribuições de avalanches para diversos ângulos de inclinação do plano. Os ângulos foram* 35° *(•),* 40° *(■),* 44° *(♦),* 44.9^o *(▲), e* 44.99^o *(+). O ângulo crítico foi escolhido como* 45°*. A linha tracejada corresponde à* $A(\lambda) = \lambda^{-3/2}$*, o expoente encontrado por Brito e Gomes.*

A figura 2.10 sugere que o efeito verificado por Brito e Gomes foi devido ao número pequeno de experimentos (10^3), já que o comportamento exponencial apareceria somente para um número maior de eventos.

O interessante é que este problema pode ser mapeado em um problema de primeira passagem de caminhada aleatória. A energia cinética flutua, mas com uma tendência governada por $\bar{\mu}$. A primeira vez que o valor da energia cinética atinge o valor zero, o bloco para e não anda mais (semelhante ao truque usado por Lazzarini em seu experimento para as agulhas de Buffon). Este problema

lembra o da "Ruína do Jogador", problema famoso em processos estocásticos. Mapeando este problema em um caminhante aleatório contra uma barreira móvel absorvente, como na fig 2.11, conseguimos resolver este problema analiticamente. A solução analítica foge ao escopo deste trabalho porém é descrita com detalhes em Lima et al. (2000c) e envolve a solução de uma equação de Fokker-Planck.

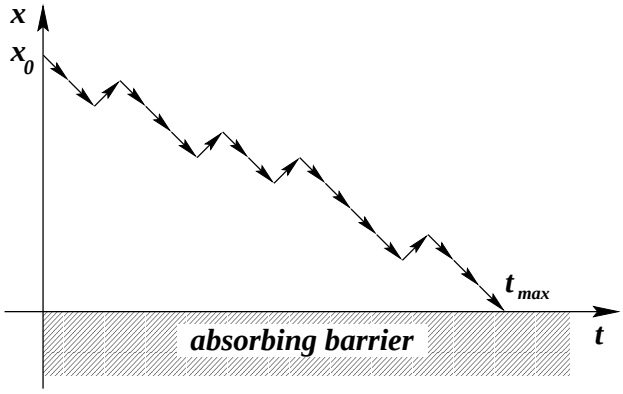


Figura 2.11: *Caminhante aleatório, com tendência, em direção a uma barreira absorvente. O problema do bloco descendo um plano, com atrito variável, pode ser mapeado neste problema. Outras situações de primeira passagem serão discutidas neste trabalho.*

Este modelo simples foi aplicado em outros sistemas, com pequenas modificações, na simulação de avalanches (Ward and Day, 2006) e de terremotos (Chianca et al., 2009). Para a simulação de terremotos, os blocos foram unidos por molas, como na figura 2.12.

O primeiro bloco se desloca e puxa os outros. O sistema é deixado relaxar e, para cada relaxação é medida a quantidade de blocos que se movem. A distribuição de probabilidades desta quantidade segue uma lei de potência, como a de Guthenberg-Richter, como mostrado na fig. 2.13.

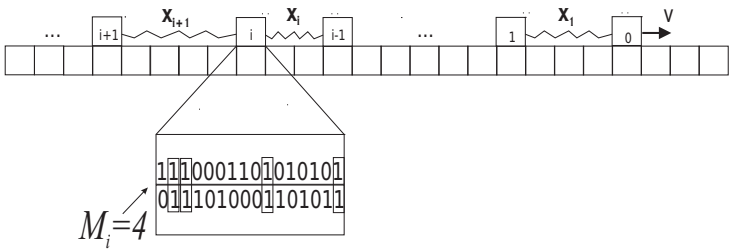


Figura 2.12: *Problema dos trens em terremotos. Blocos são ligados por molas e o atrito é calculado como nesta seção. Extraído de Chianca et al. (2009).*

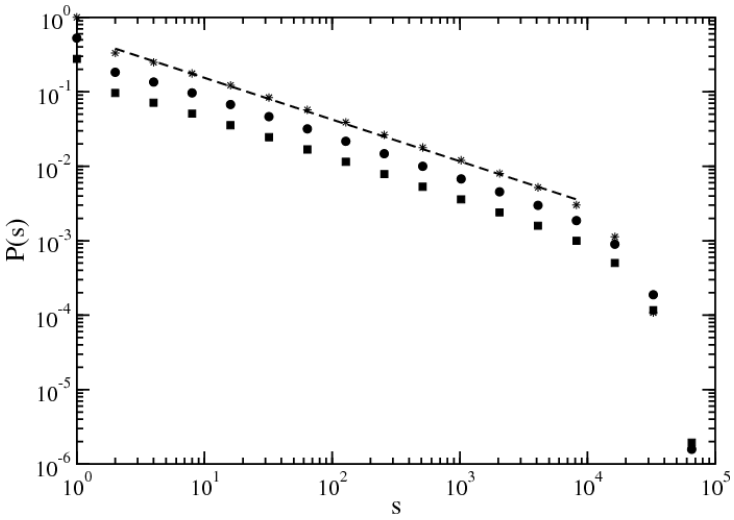


Figura 2.13: *Probabilidade de encontrarmos avalanches maiores que o tamanho s. Médias foram tomadas para mais de um milhão de eventos e as curvas são para diferentes concentrações de bits 1's no bloco e no plano, respectivamente: (∗) para 0,1 e 0,5 (■) para 0,3 e 0,2 e (•) 0,5 e 0,5. Extraído de Chianca et al. (2009).*

2.6 Migração Campo-Cidade e o Mercado de Ações

Na seção anterior apresentamos uma aplicação de um modelo simples unidimensional, ou tiras de bits, para representar um bloco deslizando por um plano inclinado, que foi posteriormente aplicado por outros pesquisadores em problemas de geofísica como avalanches e terremotos. Nesta seção vamos mostrar algumas aplicações

diretas do modelo de Ising em dois problemas sociais.

Primeiro vamos tratar do problema da migração rural-urbana. A migração rural é um fenômeno universal mas diferentemente dos problemas que estudamos em Física, tem causas totalmente diferentes. Enquanto na Noruega, a migração é causada principalmente para a busca das universidades, em países sub-desenvolvidos ou em desenvolvimento, a migração é questão de sobrevivência. O que determina o fluxo de indivíduos são diversos fatores e decisões que são influenciadas por outras decisões e interesses conflitantes, o que torna o problema próximo da área de complexidade.

Em Economia, o ponto de partida da teoria clássica é o modelo de Harris e Todaro para migração rural-urbana (Harris and Todaro, 1970; Todaro, 1969). A inspiração para o modelo veio da observação que existe um fluxo migratório apesar deste gerar um aumento do salário rural w_a e aumentar o nível de desemprego no setor urbano. A explicação para este paradoxo seria a hipótese de "rendimentos esperados": apesar do desemprego no setor urbano, a possibilidade de maiores salários mantém o fluxo migratório. No modelo original, um salário mínimo urbano é determinado artificialmente ou "politicamente", como justificado no modelo original.

Como é típico em Ciências Sociais, existem um número de hipóteses e proposições adicionais para o funcionamento do modelo:

1. *produtividade marginal decrescente:* a produção urbana é função do número de empregados no setor N_m, e a produtividade intensiva, isto é, por trabalhador, decresce com o número de empregados.

2. existe um salário mínimo urbano w_m, fixado pelo governo, e as firmas maximizam seus lucros que dependem deste salário.

3. O nível de emprego ótimo é o que maximiza o lucro das firmas.

4. Existe um salário $w_m^\star$ que corresponde ao total emprego no nível urbano, mas este salário é abaixo do mínimo fixado.

5. O setor agrícola não tem poder de mercado, isto é, de determinar o preço em que está inserida

6. existe pleno emprego no setor rural

7. existe um vínculo de população constante $N = N_r + N_u$, onde N_r é a população no setor rural e N_u a população no setor urbano.

A dinâmica de migração é guiada pelas seguintes regras: a decisão de migração para o setor urbano depende do salário w_u esperado neste setor. O salário urbano esperado w_u^e é o salário real atual w_m porém levando em conta o desemprego:

$$w_u^e = \frac{N_m}{N_u} w_m. \tag{2.23}$$

Se todos estão empregados $N_m = N_u$ (usamos m para o setor manufatureiro e o a para o agrícola). A condição de equilíbrio de Harris-Todaro será

$$w_u^e = w_a. \tag{2.24}$$

A condição generalizada impõe ainda um custo δ para a migração, o que corresponderia a

$$w_u^e = w_a + \delta\ . \tag{2.25}$$

A condição de equilíbrio de Harris-Todaro está apresentada na fig. 2.14.

Existem algumas definições a serem feitas ainda, entre elas as funções de produtividade de cada setor. A prescrição usada é a função de produção de Cobb-Douglas (H et al., 1987), tal que a produção de bens agrícolas Y_{ai}de uma firma é função do número de trabalhadores da forma

$$Y_{ai} \propto N_{ai}^{\phi} \tag{2.26}$$

com ϕ menor que 1. Com estas hipóteses e proposições é possível calcular o equilíbrio do setor urbano e do setor rural através

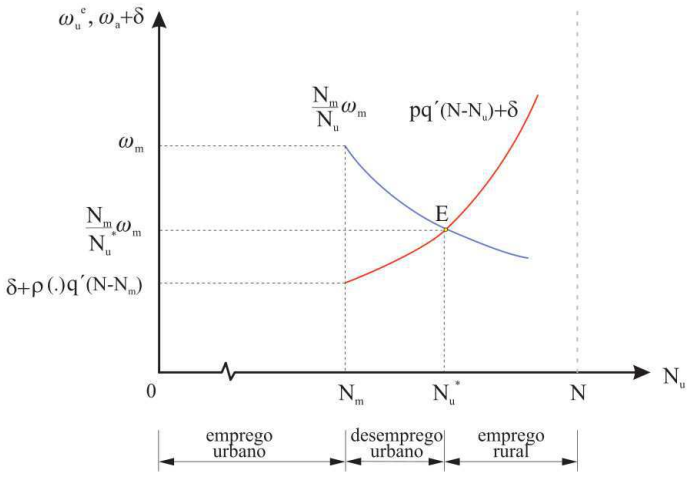


Figura 2.14: *Condição de equilíbrio de Harris e Todaro para migração com desemprego.*

dos salários, da quantidade dos bens produzidos e do número de empregados em cada setor. Observem que este problema é não-extensivo: depende do tamanho e da produção e não de uma razão entre estas grandezas, por exemplo.

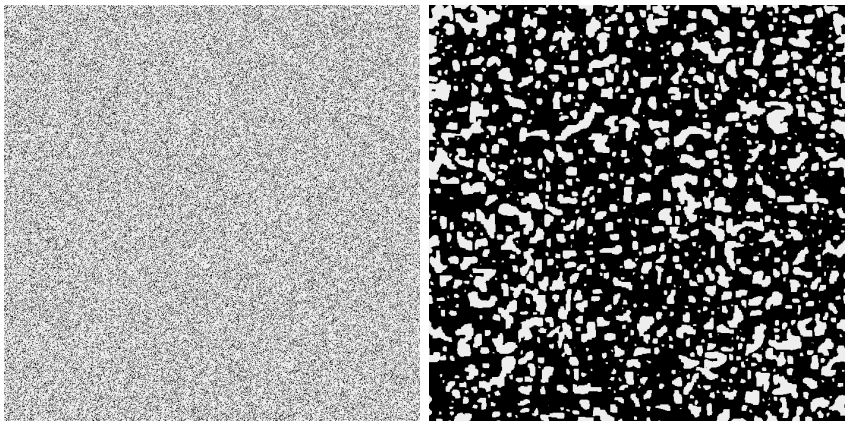
A nossa primeira contribuição na área, consistiu em propor um modelo baseado nas ideias de Harris-Todaro porém levando em conta a influência social (Espindola et al., 2005, 2006; Silveira et al., 2006). Nossa simulação é baseada no modelo de Ising apresentado na seção 2.3. Vamos considerar uma rede quadrada, inicialmente. Os vizinhos de cada sítio são os indivíduos que podem influenciar a decisão de migração. Estes vizinhos não precisam estar geograficamente perto, ao contrário, um indivíduo no setor urbano pode ser vizinho de um do setor rural e influenciá-lo na decisão (alguém que conseguiu um bom emprego no setor urbano, por exemplo). A nova expressão para a energia do sistema será:

$$E = -K\left[(1-u)w_m - w_a\right]\sigma_i - J\sum \sigma_i\sigma_j \tag{2.27}$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ indica o estado do indivíduo: setor rural ou urbano,

K é a influência do aumento de salário, u é a taxa de desemprego, e J é a influência da vizinhança. K e J competem. Observe que neste modelo, os vizinhos sempre influenciam no sentido de manter o indivíduo no mesmo setor que ele (interação ferromagnética). K tem um papel de um campo externo mas cuja intensidade depende da magnetização da amostra.

A dinâmica do sistema é a mesma do modelo de Ising com o algoritmo de Metropolis: o indivíduo (ou o spin) tentativamente inverte seu estado e infere o novo nível de satisfação segundo a eq. (2.27). Caso a satisfação aumente (ou a energia diminua), ele toma esta decisão e muda de setor. Caso contrário, permanece no mesmo setor. A figura 2.15 mostra dois estágios de uma simulação. Além da maior concentração de agentes no setor urbano, o que nossa simulação mostra que há formação de clusters, ou grupos que mantém seu estado. O grupo urbano percola, isto é, atravessa toda a rede e forma praticamente um grupo único, enquanto o setor rural é formado de grupos menores ou bolsões.



(a) (b)

Figura 2.15: *Distribuição de agentes na rede. Pontos pretos correspondem aos agentes urbanos e pontos brancos aos agentes rurais. (a) configuração inicial com 80% da população no setor rural (b) estado de equilíbrio (em relação à fração de indivíduos no setor).*

Não há nenhum argumento para justificar a utilização da rede

quadrada (nem nenhuma outra rede especificamente). Para estudar se o efeito dos resultados dependem da topologia e do número de vizinhos, simulamos redes hipercúbicas de até 7 dimensões. Devemos ressaltar que aumentar o número de dimensões é diferente de aumentar o número de vizinhos, pois ao escolhermos aumentar o número de dimensões consideramos os vizinhos como se fossem independentes entre si, diferente do que poderia ocorrer se considerássemos outras geometrias e números de vizinhos mas mantendo duas dimensões. Os resultados no equilíbrio não mudaram significativamente, mas um fato interessante pode ser notado, olhando o máximo da população urbana, na figura 2.16. O refluxo é frequentemente observado em fenômenos migratórios e o comportamento descrito na figura pode sugerir que exista um efeito de influência social na decisão da migração (H et al., 1987).

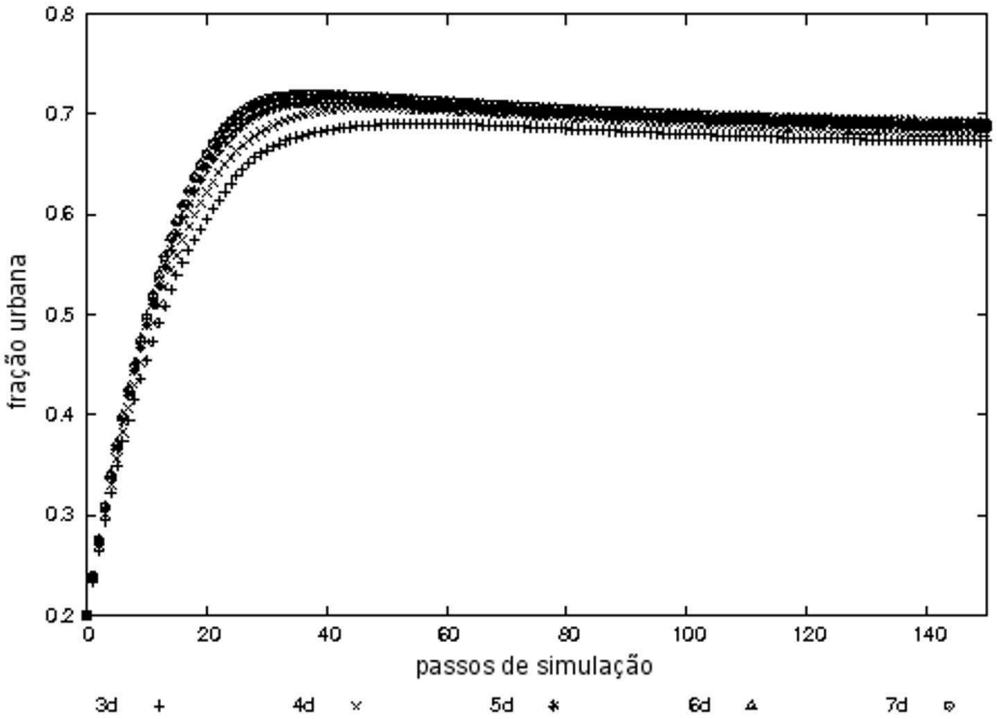


Figura 2.16: *Fração urbana em função do tempo para redes com diferentes dimensões. O comportamento do refluxo é mais sensível em dimensões mais altas.*

Apresentamos um modelo computacional simples para analisar o fenômeno da migração rural-urbana. Utilizamos um sistema econômico constituídos de dois setores, rural e urbano, os quais diferem pelos tipos de bens produzidos, a tecnologia de produção e o mecanismo de determinação salarial. Os trabalhos aqui apresentados são parte da tese de doutorado de Aquino Espíndola, da qual fui o orientador principal, e com co-orientação do prof. Jaylson da Silveira, na época na FEA/USP.

Atualmente, um dos trabalhos de dissertação sob minha orientação e com a colaboração de um estudante de Economia da UFRJ, estamos simulando um sistema de três níveis, em que o terceiro setor seria um setor urbano de alta tecnologia. Embora não seja uma migração no sentido geográfico, existem custos para a mudança e o mecanismo é o mesmo de Harris-Todaro, embora seja mais difícil de encontrar a solução analítica (o que torna simulações computacionais uma ferramenta poderosa). A ideia é verificar como a distribuição de população responde a investimentos em cada setor.

No final desta seção iremos tratar de um sistema econômico diferente: o mercado de ações. Bachelier (1900), em sua tese "Théorie de la spéculation", já utilizava o caminhante aleatório para estudo do mercado de ações. O que vamos apresentar é a simulação baseada no problema de percolação (Stauffer and Aharony, 1992): o modelo de Cont-Bouchaud (Cont and Bouchaud, 2000). O modelo consiste em agentes dispostos em uma rede. O estado de cada sítio da rede representa a intenção do agente. Cada agente pode comprar ($\phi_i = +1$), vender ($\phi_i = -1$) ou não negociar ($\phi_i = 0$).

O mais importante é a disposição dos agentes: eles formam clusters que sempre agirão tomando a mesma decisão. Os tamanhos de clusters são os mesmos do problema de percolação (sítios que preenchem uma rede com uma dada probabilidade) na concentração crítica ou do modelo de Ising exatamente na temperatura crítica da transição ferro-paramagnética. Nesta situação, a distribuição de clusters segue uma lei de potência, ao passo que longe

da temperatura crítica, existe um "cutoff" exponencial, que determina um tamanho característico. Na temperatura crítica existem clusters de todos os tamanhos e quanto menores os clusters, mais prováveis eles são. Na concentração crítica, existe então uma distribuição n_s de clusters de tamanho s, que segue a lei de potência.

Em cada instante de tempo, cada cluster pode negociar, com probabilidade a ("atividade"). A atitude a ser tomada é aleatória: tanto pode comprar quanto vender. A variação ΔP no índice das ações ou no preço P, se considerarmos apenas um tipo de ação, será, como nos mercados reais, determinada pela diferença entre demanda e oferta.

$$\Delta P \propto \sum_i n_s^i \phi_i \tag{2.28}$$

onde a soma corre sobre todos os clusters i, cada um de tamanho n_s^i cuja decisão de negociar foi ϕ_i. A evolução temporal está mostrada na fig. 2.17.

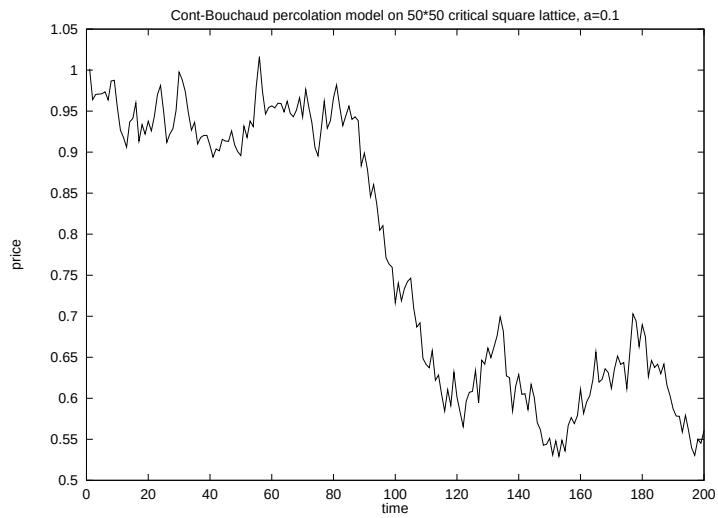


Figura 2.17: *Evolução temporal para o modelo de Cont-Bouchaud na rede quadrada 50x50. Um "crash" ocorreu por volta de* $t = 100$.

A grandeza importante nesta simulação é a atividade a, pois a mesma define uma escala de tempo: com a próximo a 1, quase todos os clusters teriam feito alguma negociação, o que equivale

a olharmos os preços das ações em intervalos de tempo grandes (da ordem de dias). Para a perto de zero, teríamos um ou nenhum cluster realizando negociações, o que corresponderia a intervalos de tempo da ordem de minutos (ou fração de minuto). Como também não temos noção da topologia da rede real, no mercado de ações, também aqui vamos simular dimensões maiores que dois. O resultado está apresentado na fig. 2.18.

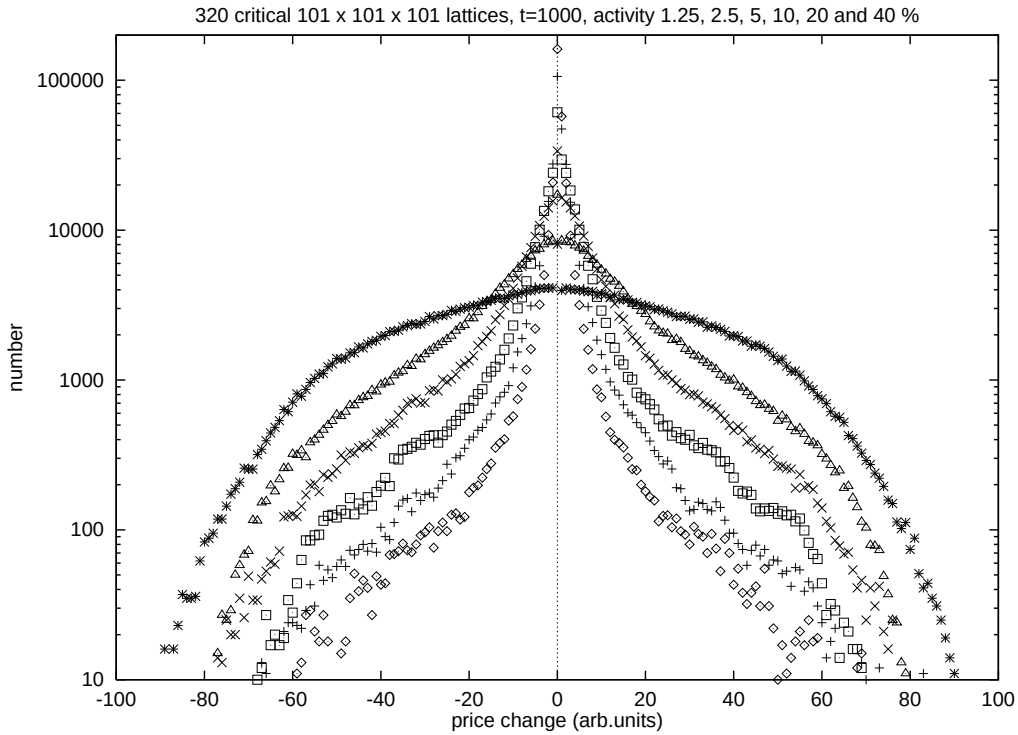


Figura 2.18: *Distribuição de variações de preços para diversas escalas de tempo ou atividades a. As atividades variam de 1.25 (mais interna) até 40% (mais externa, como uma parábola) do número de clusters negociando em um período.*

A figura 2.18 mostra claramente uma mudança de comportamento gaussiano para um comportamento de caudas longas, tipo distribuições de Lévy. Embora o modelo pareça excessivamente simplificado, é possível notar que o comportamento do mercado varia de um comportamento de caudas longas (curta duração) onde eventos extremos são prováveis para um comportamento gaussi-

ano (longa duração) onde eventos extremos são exponencialmente pouco prováveis. A curva gaussiana, que parece uma parábola no gráfico log, é mais larga pois o volume negociado é maior, pois integramos em um tempo muito maior. A figura 2.18 é para ser comparada com os dados experimentais da figura 2.19.

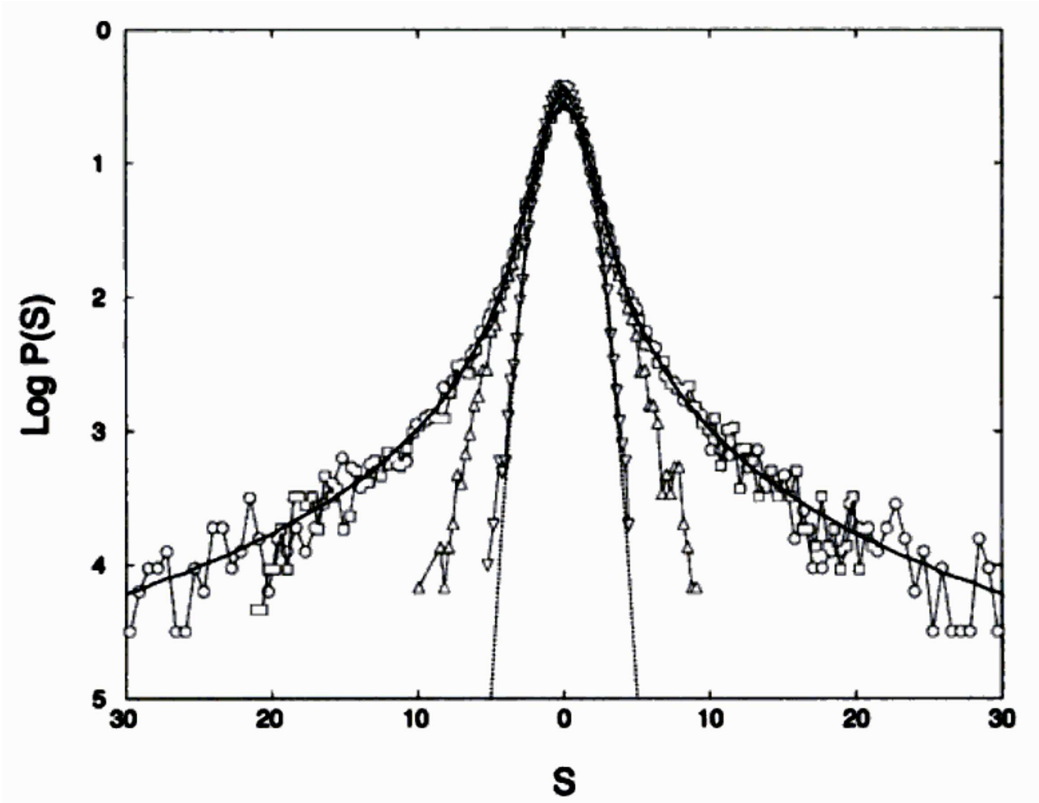


Figura 2.19: *Distribuição do S&P 500, normalizadas. Os círculos representam as negociações, de minuto a minuto, enquanto os triângulos representam escalas de dias e semanas.*

Existem duas dinâmicas competindo, em escalas de tempo diferentes, como veremos nas seções 4.2 e 4.3: a negociação que é rápida e a escala em que os clusters todos negociam e sentem o efeito das outras negociações (que é uma escala lenta). Este comportamento de escalas competindo foi analisado recentemente por economistas (Reimann and Tupak, 2007), criando o conceito de "clusters de volatilidade", para construir um modelo que justifi-

casse a distribuição de clusters que utilizamos.

2.7 O Cérebro e Redes Complexas

Até agora, apresentamos simulações de sistemas unidimensionais como o bloco deslizante como modelo de terremotos na sec. 2.5 e veremos outro sistema inspirado na biologia de populações na sec. 3.5; sistemas de duas ou mais dimensões como os modelos para migração rural-urbana e o do mercado de ações 2.6 e ainda veremos a torneira gotejante na sec. 4.2, sem contar o próprio modelo de Ising para o ferromagnetismo, descrito na sec.2.3. Nesta seção vamos apresentar rapidamente alguns exemplos de simulações em redes de dimensões maiores ou mesmo redes irregulares.

Em nossa corrida na compreensão de sistemas complexos, poderia se esperar que o cérebro fosse uma das últimas etapas, dada a sua complexidade. O córtex cerebral de humanos contém de 15 a 33 bilhões de neurônios, dependendo da idade, sendo cada um deles ligados em média com 10000 outros através das conexões sinápticas, com 1 bilhão de sinapses por mm^3. Os neurônios se comunicam através dos axônios, que transmitem os potenciais de ação para outros neurônios ou células específicas. O estado do neurônio é determinado pela integração destes pulsos através das sinapses que geram os potenciais pós-sinápticos que podem ser excitatórios ou inibitórios, dependendo da ação dos canais iônicos.

Mcculloch and Pitts (1943) propuseram uma simplificação radical: a complicada dinâmica dos neurônios, potenciais de ação, permeabilidade de membranas, etc. poderia ser resumida em um variável booleana S_i que indicaria ser um neurônio estaria emitindo um sinal, ou não. Porém, a contribuição para a teoria de redes neurais que viria a chamar a atenção dos físicos, foi dada por J.J. Hopfield (Hopfield, 1982). A competição entre sinais chegando por sinapses excitatórias e inibitórias, que competem para determinar

o estado de um neurônio, é análoga aos vidros de spins, sistemas magnéticos em que interações ferro e antiferromagnéticas competitivas levam a comportamentos dinâmicos ricos, como alta degenerescência do estado fundamental, longos tempos de relaxação (daí porque serem chamados de vidros) e vários outros.

Para Hopfield, as memórias que temos armazenadas são mínimos de uma função multidimensional. Ao recebermos um estímulo o cérebro é levado a uma configuração, ou estado, neste espaço multidimensional e, por um processo dissipativo, acabaria caindo em algum dos mínimos locais, ver fig. 2.20. Neste processo não há nenhuma comparação entre o estado atual da rede e qualquer uma das memórias, como ocorre nos computadores digitais. A memória é acessada pelo seu conteúdo, não por seu endereço, sendo chamada de memória associativa.

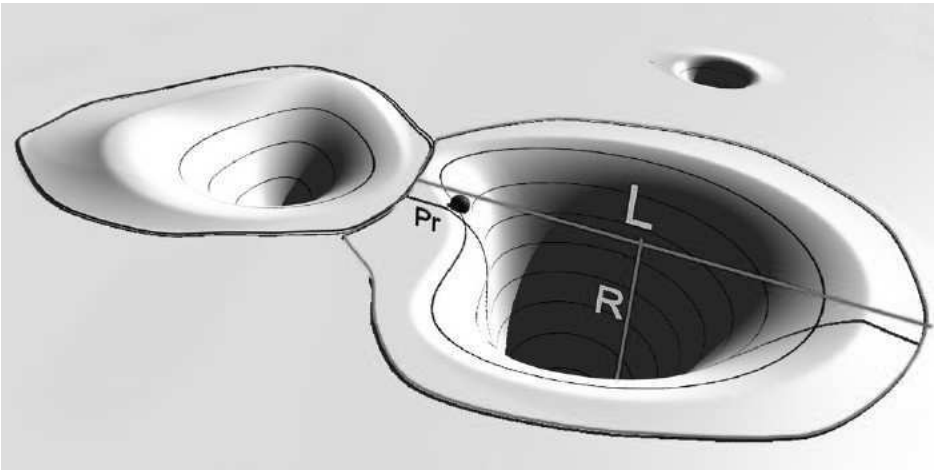


Figura 2.20: *Mínimos locais e globais de uma função em duas dimensões. A região do espaço de parâmetros que correspondem a pontos cuja minimização leva ao mesmo estado final, ou atrator, é chamada de "bacia de atração". Duas bacias de atração estão marcadas na figura.* L *é uma medida do raio da bacia e* R *sua profundidade. O sistema, representado pela esfera* Pr *está na bacia de atração do mínimo global, enquanto vemos outros dois mínimos locais.*

No modelo de Hopfield, o processo de aprendizado corresponde

a montar o espaço de configurações, com seus mínimos locais e globais. O processo de reconhecimento corresponde à minimização da função de Lyapunov que leva ao mínimo local mais próximo. O problema é o inverso do vidro-de-spin, onde queremos saber quais os mínimos, sendo conhecida a distribuição de ligações. Na rede de Hopfield, sabemos os mínimos (as memórias a serem armazenadas) e precisamos saber como dispor as ligações.

Para montar as ligações, Hopfield fez uso da prescrição de Hebb (Hebb, 1949):

> "Quando um axônio da célula A está perto o suficiente para excitar a célula B e repetidamente ou insistentemente o faz disparar, então ocorre alguma mudança metabólica ou crescimento, em ambas as células tal que a eficiência de A, como uma das células que faz B disparar, é aumentada."

A regra de Hebb também é conhecida como *"Neurons that fire together wire together."*.

A formulação do modelo parte do estado $S_i(t)$ do neurônio na rede de N neurônios, no tempo t. Iremos armazenar P memórias, que correspondem a P conjuntos de neurônios, sendo que o estado do i-ésimo neurônio na μ-ésima memória será dado por ξ_i^μ. A função de Lyapunov, ou "energia" da rede neural será

$$H = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j J_{ij} S_i S_j \tag{2.29}$$

Em cérebros reais, a chamada matriz sináptica, cujos elementos são J_{ij}, é antissimétrica: o neurônio i, que tem uma sinapse conectada a j, não necessariamente tem uma sinapse de volta e, caso tenha, não terá a mesma intensidade. Por analogia com sistemas físicos, Hopfield adicionou duas proposições ao modelo: a matriz J seria simétrica e todos os neurônios estão conectados entre si.

A implementação da regra de Hebb, é simples com as considerações anteriores. Uma nova memória ξ^μ é aprendida através da modificações das sinapses:

$$\Delta J_{ij} = \xi_i^\mu \xi_j^\mu \tag{2.30}$$

A expressão acima é calculada para todos os neurônios e todos os padrões. Com a matriz definida podemos utilizar o que aprendemos simulando o modelo de Ising, a partir da eq. (2.29). A dificuldade computacional que aparece, reside no tamanho da matriz J_{ij}, se quisermos simular redes grandes (Penna and Oliveira, 1989). Utilizando (2.30) podemos reescrever a eq. (2.29) como

$$H = \frac{1}{NP} \sum_i \sum_j \sum_\mu \xi_i^\mu \xi_j^\mu S_i S_j \tag{2.31}$$

Vamos reescrever a equação acima em termos das variáveis σ_i, como fizemos na seção 2.4. Além disto, podemos obter, a partir da eq. (2.31), o estado do neurônio no tempo seguinte:

$$\sigma_i(t+1) = \frac{1}{NP} \left(2 \sum_j \sum_\mu \zeta_i^\mu \wedge \zeta_i^\mu \wedge \sigma_j \right) \tag{2.32}$$

onde fizemos a transformação $\xi^\mu \mapsto \zeta^\mu$ seguindo a mesma regra para os σ. A divisão na eq. (2.32) é do tipo inteira, o que garante que σ_i será 0 ou 1.

Este truque computacional permitiu que simulássemos a maior rede neural até então (10000 neurônios). O recorde durou pouco, pois logo depois Greg Kohring simulou 33,968 neurônios em um supercomputador (Kohring, 1990) e, graças a este estudo, foi comprovada a existência de estados estáveis que o método de quebra de simetria das réplicas previa, diferente do método das réplicas, em um exemplo onde simulações computacionais de qualidade ajudam a resolver dúvidas em questões teóricas.

Uma rede de Hopfield com N neurônios é capaz de armazenar de armazenar e recuperar $P \approx 0.14N$ memórias. Enquanto o número grande de sinapses (N^2) favorece o armazenamento de um razoável número de informações, o tempo necessário para recuperar a mesma também aumenta, o que é uma situação indesejável. Como descrito nos primeiros parágrafos desta seção, o cérebro humano apresenta uma conectividade baixa (10^4 conexões por neurônio, de 10^{10} possíveis). O problema de redes neurais com conectividade baixa já foi bastante estudado, mas o que fizemos recentemente foi estudar a performance da rede de Hopfield em redes complexas.

Redes complexas são como grafos, conjuntos de vértices e ligações ou arestas. Diferente das redes tratadas até aqui, isto é, redes com simetria de translação ou rede de Bravais, as redes complexas tem número de coordenação, ou número de vizinhos variável. Em sistemas biológicos e, principalmente sociais, não existe esta simetria (o próprio modelo de Hopfield é uma simplificação, neste sentido). Redes complexas apresentam características vantajosas para sistemas adaptativos: são econômicas quanto ao número de ligações; as distâncias são reduzidas, diminuindo o tempo de propagação de informações; são robustas face à ataques aleatórios, isto é, podem perder boa parte de seus componentes sem perder a capacidade de transmissão de informação.

O interesse por redes complexas foi deflagado recentemente (e muito graças às simulações computacionais). Em um artigo publicado na Nature (Watts and Strogatz, 1998), Watts e Strogatz propuseram um modelo de rede que apresentava as propriedades de alta conectividade entre vizinhos, porém com distâncias reduzidas entre todos seus componentes: as chamadas redes "small-world". O nome foi inspirado em um experiência de Milgram (Milgram, 1967), onde cartas foram enviadas de um ponto na Costa Oeste americana com destino a um indivíduo em Boston, na Costa Leste. As cartas deveriam ser entregues em mãos, e cada um que recebesse deveria anotar o seu nome na carta e passá-la adiante. Um quarto das

cartas foram entregues, mas as que foram entregues passaram por seis pessoas apenas, em média, dando origem à expressão "os seis graus de separação".

O modelo de Watts e Strogatz consiste em, a partir de uma rede regular, retirar ligações existentes e substituí-las por ligações de longo alcance, com uma dada probabilidade p, ver fig. 2.21. Observe que a distância nestas redes é medida como o número de

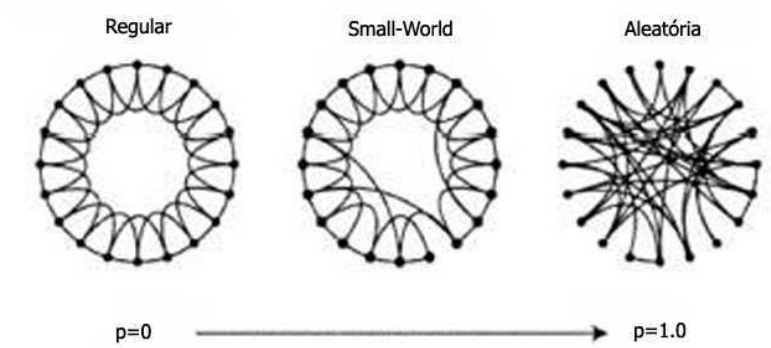


Figura 2.21: *Redes small-world como interpolação entre a rede regular ($p = 0$) e a rede aleatória ($p = 1$). A rede mantém a alta clusterização da rede regular e as pequenas distâncias da rede aleatória.*

passos ou caminhos a serem percorridos, não importando a distância geográfica entre eles. Para redes small-world a distância se escala como (De Menezes et al., 2000; de Menezes et al., 2001)

$$l \sim \frac{N^{1/d}}{K} f(p, K, N) \tag{2.33}$$

onde K é o número médio de conexões, p é a probabilidade de reconexão, d a dimensão da rede original, com f comportando-se assintoticamente como

$$f(x) = \begin{cases} \text{const} & \text{se } x \ll 1 \\ \ln(x)/x & \text{se } x \gg 1 \end{cases} . \tag{2.34}$$

Outra topologia interessante diz respeito às redes livres de escala. Redes, como a internet, redes de terroristas e a WWW, possuem uma distribuição de graus em forma de lei de potência. O exemplo principal de redes livres de escala são as redes de Barabási-Albert (Barabasi and Albert, 1999). Dois ingredientes são fundamentais para que a rede seja livre de escalas neste modelo: o crescimento e o "preferential attachment", isto é, sítios mais antigos têm maior probabilidade de serem conectados. O algoritmo é o seguinte: a rede começa com m nós, conectados entre si. Em um novo passo de tempo t adiciona-se um novo nó j a rede, com n arestas tal que $n \leqslant m$. Essas arestas são ligadas ao sitio $i < m + t$, com probabilidade $p(k_i)$, dada por:

$$p_{j \to i}(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j} \tag{2.35}$$

onde k_i é o grau do i-ésimo nó. Depois de t passos, a rede possuirá $N = t + m$ e $e = (m-1) + nt$ arestas. Quando $t \to \infty$ a distribuição de conexões é dada por $P(k_i) \propto k_i^{-3}$. As redes livre de escala apresentam

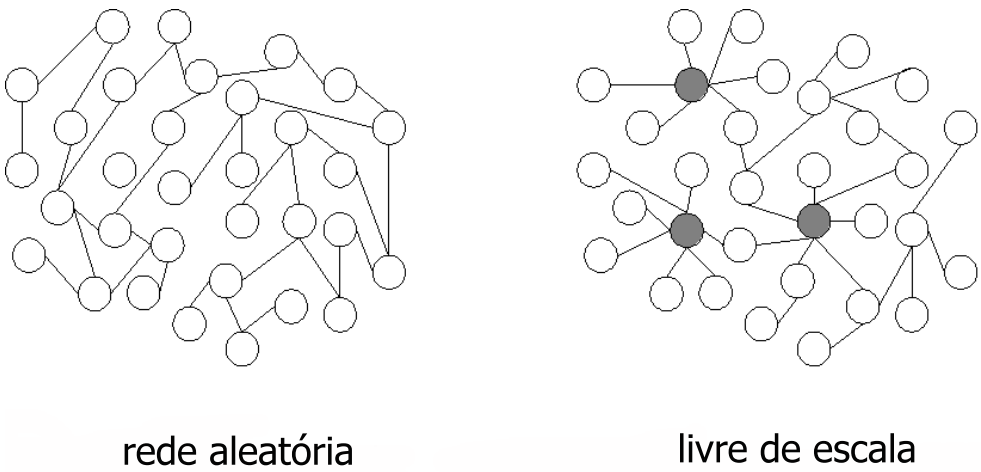


Figura 2.22: *Rede aleatória e rede livre de escala. Na rede livre de escala, os "hubs", ou pontos mais conectados, estão marcados em cinza. A maioria dos sítios possui apenas uma ligação.*

as características que comentamos anteriormente: robustez face à ataques aleatórios e fragilidade frente à ataques localizados (aos "hubs"). Alguns exemplos de lei de potência estão mostrados na fig. 2.23.

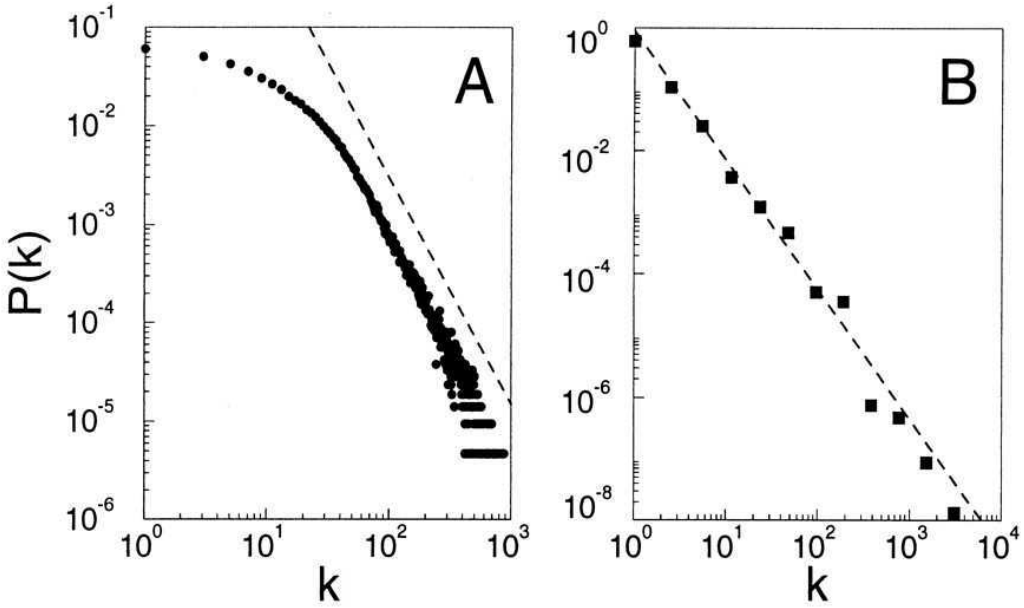


Figura 2.23: *Distribuição de conectividade para várias redes extensas.* ***(A)*** *Colaboração entre atores com* $N = 212.250$ *e conectividade média* $\langle k \rangle = 28,78$. ***(B)*** *WWW,* $N = 325.729$, $\langle k \rangle = 5,46$. *As linhas tracejadas possuem expoentes (A)* $\gamma_{\text{atores}} = 2,3$ *e (B)* $\gamma_{\text{www}} = 2,1$.

A primeira parte do trabalho, que deu origem à dissertação de mestrado de C.E. Galhardo, consistiu em testar a capacidade de recuperação e armazenamento de redes complexas como modelo de redes neurais. A prescrição de Hebb, eq. (2.30), foi usada. Os experimentos consistiram em apresentar padrões semelhantes às memórias. Após a rede atingir o equilíbrio verificamos se o estado final guardava alguma superposição com o padrão original (superposição próxima a um). Os resultados para padrões aleatórios e padrões correlacionados, mostram que a rede livre de escala, para conexões $K > 10$, são mais robustos quanto à introdução de correlação entre os padrões. A grandeza atividade na fig. 2.24 se refere ao

número de neurônios ativos em cada memória armazenada. Para atividade 0.5 os padrões são descorrelacionados.

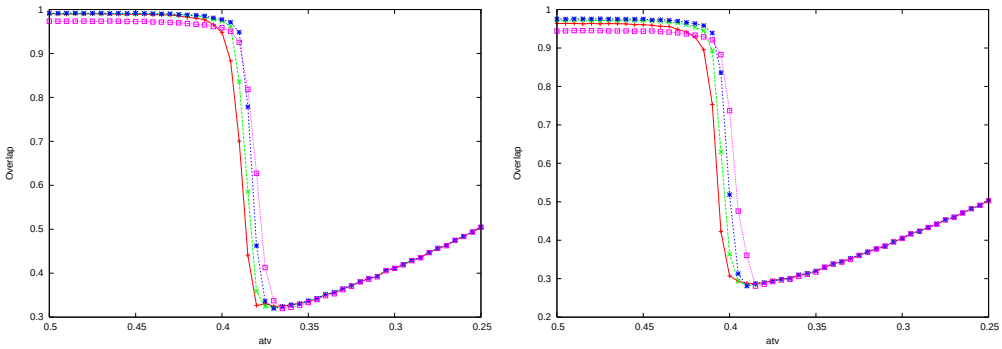


Figura 2.24: *Superposição ("Overlap") final entre o estado final da rede e uma das memórias vs a para as geometrias de small world com $p = 0.2$ $(+)$, $p = 0.4$ $(\times)$, $p = 1.0$ $(*)$ e a rede livre de escala $(\square)$. Para $\alpha = 0.15$ em (a) e $\alpha = 0.20$ em (b). Médias em 100 realizações. As curvas não vão a zero pois mesmo um reconhecimento errado ainda guarda uma certa superposição com o padrão correto.*

Nossa próxima etapa é propor um algoritmo em que as ligações sejam realizadas de acordo com as correlações entre os padrões (neurônios que estão no mesmo estado em várias memórias têm menor probabilidade de criar ligações). O modelo não tem nenhuma justificativa biológica mas pode ser mais eficiente em aplicações práticas.

2.8 Otimização e Desenvolvimento de Software

Nesta seção vamos apresentar aplicações de técnicas de simulação e Física Estatística em alguns problemas de Ciência da Computação e Informática.

Na seção anterior discutimos o analogia entre redes neurais para reconhecimento de padrões e o estado fundamental de vidros de spin. É comum encontrarmos problemas de múltiplos mínimos

em sistemas complexos devido ao fato de interações competitivas serem um ingrediente fundamental para o aparecimento de propriedades emergentes. Dada a imensa diversidade de mínimos locais, muitas vezes estamos interessados não em encontrar o mínimo global, mas um mínimo local próximo, dado um tempo finito para encontrar a melhor solução.

O método mais usado para uma minimização de função é o do maior gradiente. Este método tem o inconveniente de encontrar o mínimo mais próximo da condição inicial, não o mínimo global. Uma estratégia é aplicar o método para diversas condições iniciais e escolher a melhor saída após várias tentativas. Outra saída, é inspirada na Termodinâmica, explicitamente na metalurgia: o "simulated annealing" (Kirkpatrick et al., 1983), ou arrefecimento simulado. O processo, em metalurgia, é o oposto da têmpera: o metal é aquecido além do ponto de fusão e resfriado lentamente, permitindo que os átomos se arranjem em configurações de menor energia. Metais temperados são resfriados rapidamente e a sua estrutura é um estado meta-instável. O problema em simulações é exatamente fazer a redução lenta da temperatura, pois isto exigiria mais tempo de computação. O efeito da temperatura é o mesmo que no algoritmo de Metropolis, apresentado na sec. 2.3: é permitido que o sistema aumente a energia, ou o custo, em alguns instantes. A diferença é que iniciamos em uma temperatura mais alta e a diminuímos a cada passo, de acordo com alguma prescrição.

Geman and Geman (1984) mostraram que se os saltos ΔE seguem uma distribuição gaussiana, então a temperatura deve ser resfriada de forma logarítmica para garantir que o sistema não seja aprisionado em um mínimo local. A diminuição da temperatura de forma logarítmica torna proibitivo o uso do método. Esta prescrição é chamada de "Boltzmann machine". O passo seguinte foi dado por Szu e Hartley (Szu and Hartley, 1987), que modificando a distribuição de saltos ΔE, de uma gaussiana para uma distribuição de

Cauchy, mostraram que a temperatura poderia ser resfriada linearmente com o tempo. O método é chamado de "Cauchy machine" ou "Fast Simulated Annealing" (FSA). O FSA foi patenteado.

Utilizando distribuições estáveis de Lévy 2.25, Tsallis and Stariolo (1996) generalizaram e estenderam os resultados anteriores e criaram o "Generalized Simulated Annealing", ou GSA, em que o mínimo global é alcançado mesmo com a temperatura sendo resfriada com uma potência do tempo.

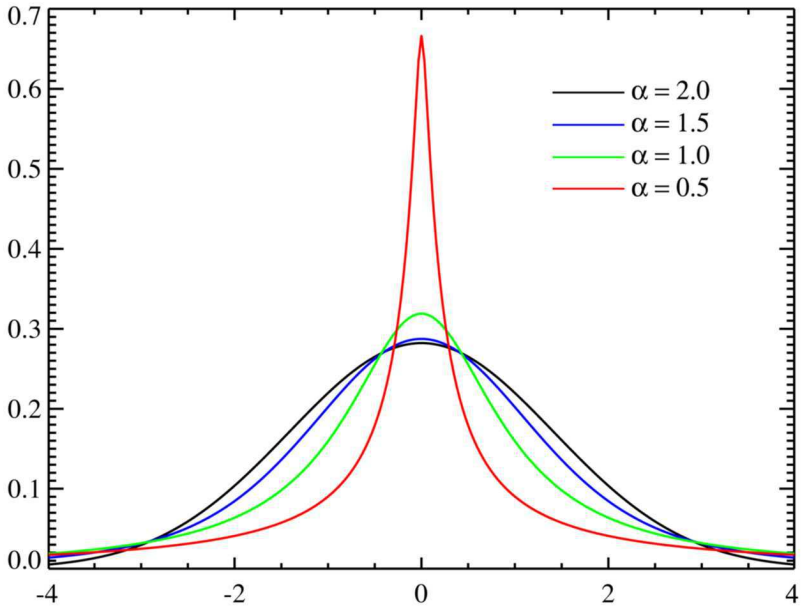


Figura 2.25: *Distribuição estável de Lévy. Os casos especiais são $\alpha = 2$ para a gaussiana, $\alpha = 1$ para a distribuição de Cauchy.*

Enquanto os trabalhos anteriores sugerem procedimentos para minimizações mais eficientes de funções $f(x)$ contínuas, isto é, para as quais é sempre possível escolher um valor Δx tal que $f(x + \Delta x)$ exista, nada garante o esquema para funções discretas. Um exemplo é o problema do caixeiro viajante (TSP), que consiste em visitar N cidades realizando o menor percurso. Existem $(N-1)!/2$ configurações possíveis que deveriam ser examinadas para determinar o menor percurso. O problema é então NP-completo: a complexidade cresce com o tamanho, de uma forma

exponencial, no pior caso. A dificuldade na utilização dos resultados anteriores é que não podemos criar soluções com qualquer tamanho. Na realidade, as melhores soluções aparecem com heurísticas como a de Lin and Kernighan (1973). Em uma das primeiras aplicações do GSA, mostrei (Penna, 1995) que o TSP pode ser tratado com o GSA e que a prescrição de redução de temperatura não piora a qualidade das soluções e retorna a solução com um número menor de passos.

Outra situação em que o GSA pode ser usado é no ajuste de curvas. Em Penna (1995) mostrei que o problema de ajuste de curvas aos dados experimentais é um problema de múltiplos mínimos e o simulated annealing poderia ser uma opção para ajustes de curvas mesmo quando não temos nenhuma pista dos valores ótimos. Apesar de não computado na Web of Science, talvez pelo fato da revista ter mudado de nome ou não ter sido indexada na época, este artigo já tem cerca de cinquenta citações. Uma procura no Google por "fitting curves by simulated annealing" mostra inclusive softwares comerciais utilizando o método sem a devida citação. O método tem sido "redescoberto" recentemente em áreas diferentes da física e engenharia. A motivação para a criação do novo algoritmo de ajuste de curvas foi quando precisamos ajustar uma distribuição de Lévy aos dados experimentais da torneira gotejante, que iremos apresentar na sec. 4.2. O método é utilizado hoje em espectroscopia, onde um grande número de parâmetros precisa ser ajustado e nem sempre temos alguma ideia sobre que valores iniciais devemos dar, se resolvermos pelo método do gradiente, por exemplo.

Um outro exemplo de aplicações de redes complexas está na gerência de pacotes ou programas de todo um sistema operacional, no caso, o GNU/Linux. Já há muito tempo que usamos software livre em nossas simulações (antes de Linus Torvalds lançar a primeira versão do sistema operacional Linux, em 1991, já usávamos o GNU/C, no DOS). Boa parte dos computadores coletivos e todos os servidores do Instituto de Física da Universidade Federal Flu-

minense usam Linux. Principalmente nos servidores é utilizada a distribuição Debian, famosa pela estabilidade e ligação com a liberdade de software.

A primeira versão da Debian – que é a junção dos nomes Deb e Ian, sendo este último, Ian Murdock, o fundador da mesma – foi lançada em 1993. Um dos pontos altos da distribuição é o gerenciamento de pacotes: pacotes são programas, bibliotecas, drivers, etc. que são arranjados para uma fácil instalação no sistema operacional. O mecanismo de controle de pacotes do Debian - APT, ou Advanced Packaging Tool - permite a instalação de programas, cuidando de suas dependências para que a mesma ocorra sem problemas de compatibilidade. Para manter a estrutura de 20.000 pacotes, existe uma equipe de quase dois mil desenvolvedores espalhados pelo planeta, sobre a liderança de um desenvolvedor escolhido em um intricado sistema eleitoral. Os desenvolvedores são escolhidos após um demorado e exigente processo.

Uma das razões da fama de estabilidade do projeto Debian vem do seu esquema de liberações de versões, ou "releases". Existem três níveis de distribuição: estável, teste e instável. Quando uma nova versão de um programa é lançada, o pacote entra na distribuição instável. Após alguns dias (10 a 15), se o pacote não receber nenhum "bug report" crítico (e nem nenhuma de suas dependências), ele é promovido à teste. Quando o "Release Manager" decidir que está na hora de lançar uma nova versão, todas as versões de programa são congeladas na teste, isto é, não serão aceitas novas versões dos programas. Os programas são testados e bugs são corrigidos. Se algum bug do programa é corrigido pelo autor, e lançado como nova versão com outras novidades, o desenvolvedor Debian (DD) deve examinar o código fonte do programa e retirar apenas a parte em que houve a correção. Nenhuma outra novidade pode ser adicionada sem ser exaustivamente testada, sob o risco de aparecerem novos bugs.

Este procedimento exige que os programas tenham os fontes li-

berados, para que os desenvolvedores possam modificá-lo e adaptá-lo à versão corrente. Quando o número de bugs reportados atinge um valor mínimo, o "Release Manager" pode liberar uma nova versão: portanto a versão estável é uma versão em que os pacotes nela contidos, forma testados para ação em conjunto. A estabilidade pode ser comprometida se algum pacote estranho ou mais atual é instalado.

Sob o compromisso de não esconder os erros e a necessidade do código aberto, o projeto Debian tem toda a sua história e dados disponíveis e acessíveis. Após 16 anos de história, existe uma quantidade significativa de dados muito bem documentados que podem ser estudados, no sentido de reconhecer fraquezas, mecanismos de evolução, etc. de grandes projetos de software. Esta disponibilidade permitiu que um recente estudo (Maillart et al., 2008) testasse um modelo de crescimento estocástico que dá origem à lei de Zipf, quase onipresente em sistemas complexos.

O que realizamos, e que culminou na dissertação de mestrado de Orahcio Felicio de Sousa, foi estudar a rede de quase 20,000 pacotes e dependências do Debian, em versões diferentes buscando caracterizar a rede quanto à robustez (ou fragilidade) e fornecer ingredientes para uma melhor e maior eficiência na gerência do projeto, veja também Sousa et al. (2009). Como demonstração do interesse do assunto, a dissertação de mestrado sobre o projeto é a mais baixada do site do Instituto de Física, com 50 downloads no último mês (setembro de 2009) e mais de 250 downloads no mês da publicação (abril de 2009).

Como exemplo de uma rede de dependências, mostramos na figura a rede de dependências do pacote php5-cli. O PHP é uma linguagem de programação bastante utilizada em programação para a Web. É possível distinguir, na figura, algumas comunidades de pacotes e alguns pacotes "hubs", que têm alto grau de conectividade. Um bug nestes pacotes afeta muitos outros. Pacotes na periferia da rede são pacotes que dependem de outros mas não

são dependências de outros. Um bug neles (na maioria, portanto) não afeta os programas, exceto o próprio. Existem pacotes fundamentais também para a estabilidade, como o php-pear, que tem o php-cli como dependência. Todo o ramo da rede depende desta ligação php-cli→php-pear. A detecção destes pontos de alto centralidade é de importância para a estabilidade da rede e não apenas os pacotes com grande número de dependência direta. Este critérios deveriam ser usados para ordenar os bugs por importância, isto é, não é o número de bugs que importa, mas o número de pacotes potencialmente atingidos por eles.

Um dos mecanismos de detecção de comunidades que utilizamos faz uso do simulated annealing e da analogia com o modelo de Ising. Para isto, definimos a modularidade espectral como (Newman, 2006):

$$Q = \frac{1}{2m} \sum_{ij} \left[A_{ij} - \frac{k_i \cdot k_j}{2m} \right] \delta_{c_i c_j} \tag{2.36}$$

para uma rede com m ligações, distribuídas na matriz adjacência A, isto é, $A_{ij} = 1$ se existe uma ligação entre i e j, a soma é realizada por todos os n sítios da rede, k_i é a conectividade de um dado sítio i, e $\delta_{c_i c_j}$ é o delta de Kronecker, que terá valor 1 se o rótulo c_i for igual ao rótulo c_j. O segundo termo do somatório é igual ao número de ligações que teríamos se a rede fosse aleatória: se tivermos mais ligações, a modularidade é positiva, será negativa se os sítios estiverem se repelindo, isto é, evitando ligações.

O procedimento é como a dinâmica de Ising: mudamos um pacote para outra comunidade e verificamos se a modularidade aumenta. Caso diminua, geramos um número aleatório que depende da temperatura e aceitamos ou não a mudança. Na fig. 2.27 apresentamos o resultado do método de annealing, comparado com o método espectral, em função do número de passos. O annealing fica algum tempo preso em uma configuração de baixa modularidade. Os resultados finais são comparáveis, mas neste caso o annealing foi muito mais lento.

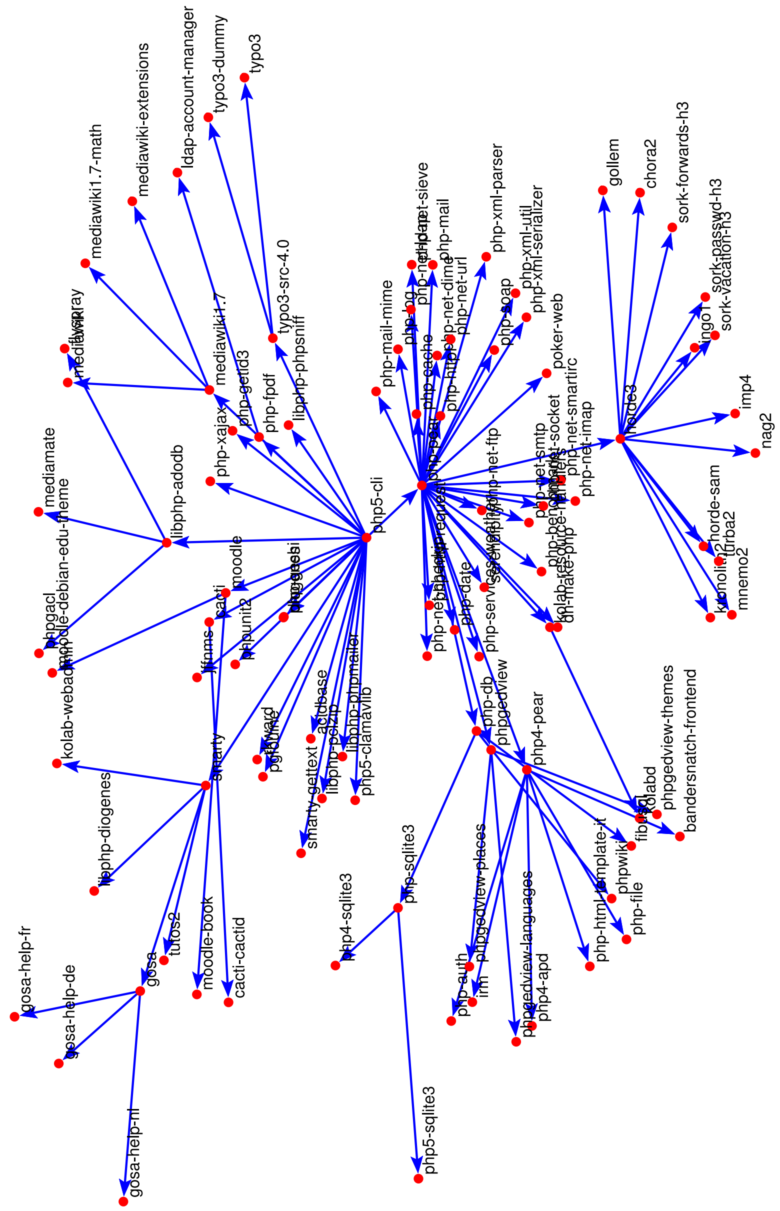


Figura 2.26: *Rede de dependências do pacote php, no centro da imagem.*

Entre outros vários resultados, obtivemos o dendrograma das comunidades, mostrado na fig. 2.28. O dendrograma separa os pacotes em comunidades. Nossa sugestão para o projeto Debian

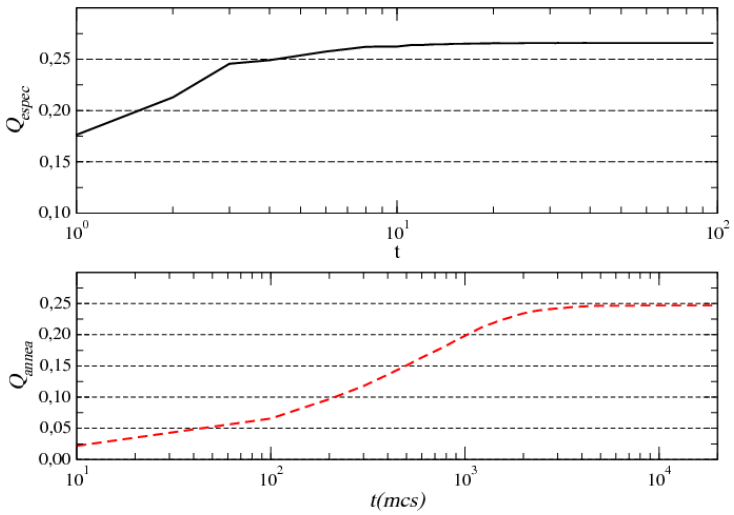


Figura 2.27: *Eficiência dos algoritmos para detecção de comunidades. O gráfico superior diz respeito ao método espectral (não discutido neste trabalho), o gráfico inferior é o resultado para o simulated annealing. Os resultados finais são semelhantes, mas o método espectral é 10 vezes mais rápido.*

é usar a separação obtida pelos métodos de detecção de comunidades (por sua vez baseados no simulated annealing) para definir times de desenvolvedores responsáveis por pacotes semelhantes.

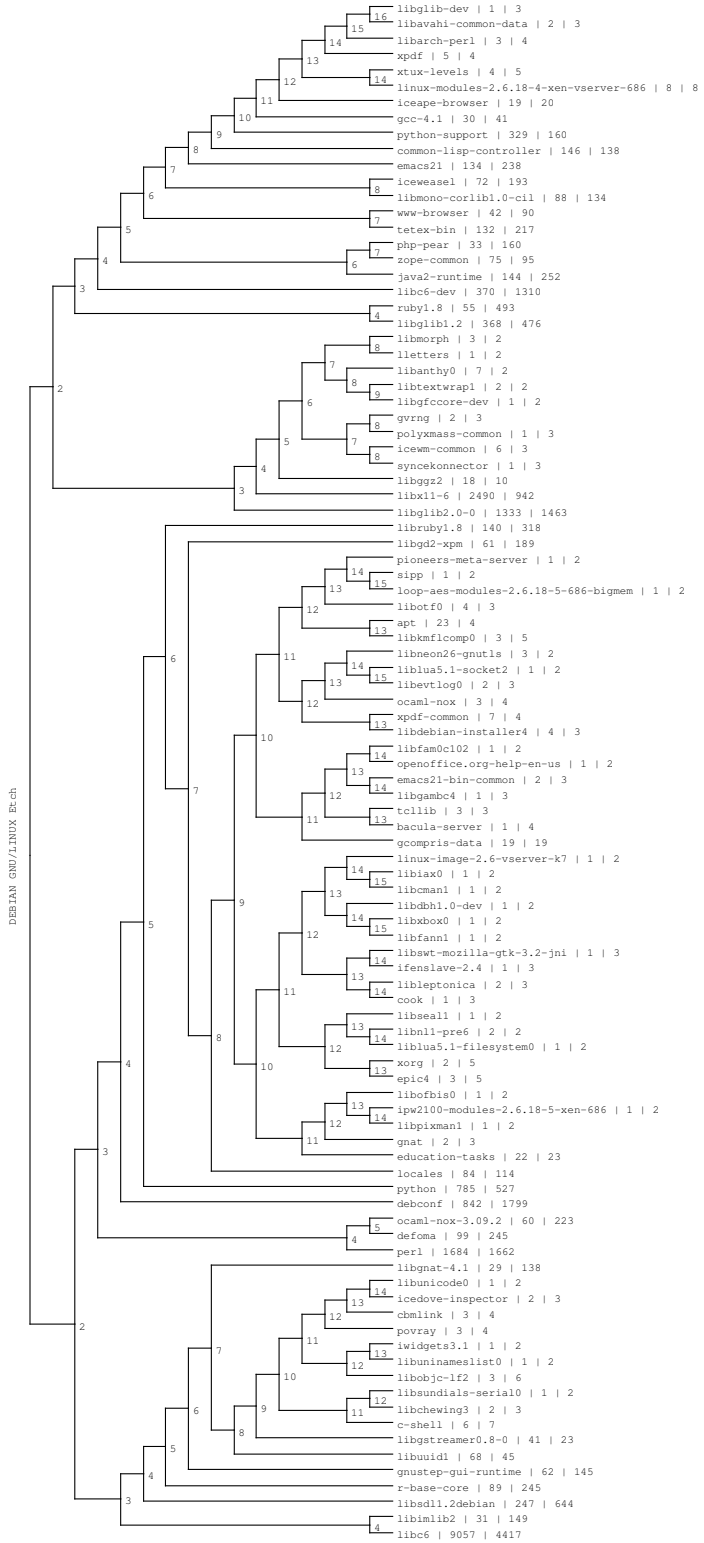


Figura 2.28: *Dendograma das comunidades dos pacotes Debian*

2.9 Cyberwar

Vamos apresentar nesta seção um do dois projetos de inovação tecnológica em que estamos envolvidos. O projeto é o de Guerra Cibernética, aprovado no Edital de Subvenção Econômica da FINEP 2007, cujo objetivo é o desenvolvimento de ferramentas de varredura, auditoria e ataque cibernético a serem realizadas em teste de invasão, defesa e ataque em ambientes de redes, utilizando técnicas de computação, física e biologia. O setor de TI da Marinha do Brasil está envolvido no projeto e é o cliente em potencial.

Como dissemos, o interesse é criar ferramentas nacionais de defesa e ataque. Em particular, temos um excelente laboratório para experimentos já que computadores de universidades são alvos bastante visados graças à facilidade e qualidade de banda e de pouco interesse em atividades de segurança (Dall'Asta et al., 2004). A parte do projeto que nos interessa consiste em criar um simulador de guerra cibernética, onde redes de computadores virtuais seriam invadidas e atacadas e treinamento e simulações de estratégias de defesa e ataque poderiam ser realizadas. É importante notar que existe um grande número de ferramentas livres já desenvolvidas para defesa e monitoramento, mas quase nenhuma para ataques.

Vários estudos e reportagens recentes têm apontado o elevado risco de "guerras cibernéticas" entre grupos rivais ou mesmo entre países. Além da mera especulação, é evidente que a probabilidade de ocorrência de tais eventos tem crescido consideravelmente devido ao alto grau de conectividade entre redes de computadores em todo o mundo, acesso fácil a ferramentas de desenvolvimento, sistemas operacionais, hardwares poderosos de baixo custo, manuais, livros e, principalmente, colaboração em tempo real, veja a figura 2.29. Um caso recente é um ataque de 3 semanas à Estônia supostamente coordenado por grupos terroristas russos `http://www.guardian.co.uk/russia/article/0,,2081438,00.html`.

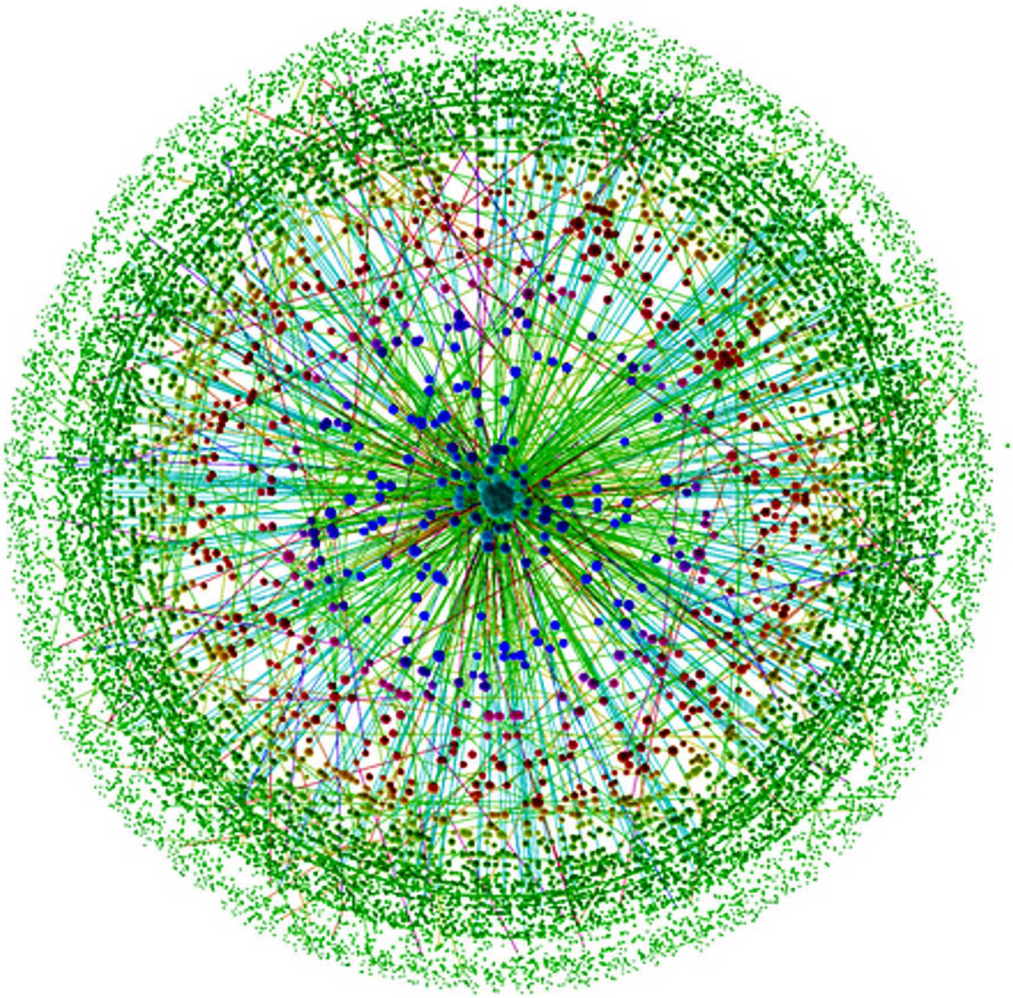


Figura 2.29: *Mapa da internet. O núcleo é formado por oitenta concentradores. A grande maioria dos sítios situa-se na periferia. Existe uma faixa de computadores conectados um a um (P2P). Extraído de Carmi et al. (2007).*

Recentemente também teve espaço na mídia, o anúncio do presidente dos Estados Unidos, Barack Obama, sobre a criação do cargo de "cyber czar", com o objetivo de melhorar a segurança das redes de computadores do país, que constantemente sofrem ataques de piratas virtuais. Segundo Obama, os Estados Unidos perdem cerca de 8 bilhões de dólares anuais com cybercrimes.

As ações numa guerra cibernética visam quebrar a disponibili-

dade, confidencialidade e integridade dos sistemas críticos e do poder central, causando perdas econômicas e descrédito no governo. Em relação a custos financeiros, ataques realizados em alvos comerciais trazem um maior prejuízo financeiro, causado pela perda do lucro no período em que este fica fora do ar, muito maior do que o realizado em alvos do governo. É óbvio que todos os setores da infra-estrutura nacional dependem das telecomunicações para a operação eficiente - algumas vezes, para todas as operações - e, também é sabido que o presente nível de dependência da tecnologia de informação e sistemas baseados em computadores representam, para alguns aspectos da infra-estrutura dos serviços críticos, a base da informação para que possam também funcionar. Da mesma forma, a energia elétrica é absolutamente essencial para as facilidades e funções dos equipamentos, mantendo o padrão mínimo das operações.

Em uma situação de ataque cibernético existem alguns detalhes devem ser levados em conta: o ataque deve ser silencioso, deve ter previsão para atitudes a serem tomadas em caso de descoberta (pânico) e deve ser descentralizado (Gelenbe and Loukas, 2007). Além destas características gerais, outras específicas como o perfil de utilização de serviços de rede também terão que ser pensadas na hora do planejamento.

Como citamos na seção 2.7, redes de computadores costumam apresentar topologia livre de escalas e, em consequência, são robustas face à ataques aleatórios (Cohen et al., 2000) e frágeis face a ataques localizados (Cohen et al., 2001). Como exemplo de uma rede acadêmica, apresentamos o mapa do "Anel da Rede UFF", na fig. 2.30. A figura 2.30 foi preparada para que ficasse evidente a estrutura livre de escalas da rede. As comunidades estão separadas por cores.

Embora o fator geográfico seja importante para determinar o crescimento da rede, a utilização da mesma também é importante. Observamos que alguns pontos cruciais como a Reitoria e o HUAP,

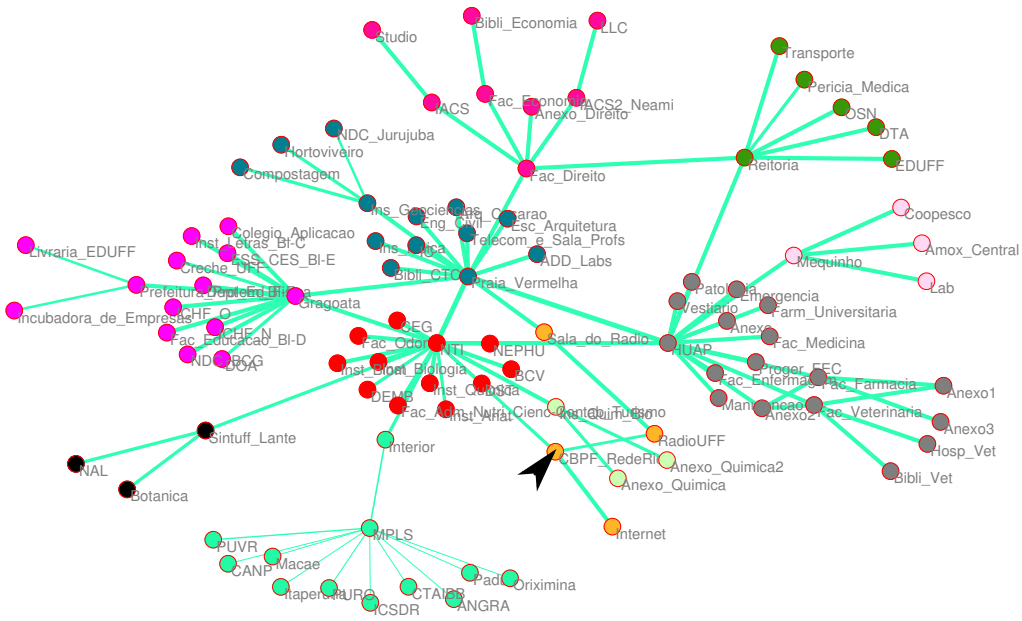
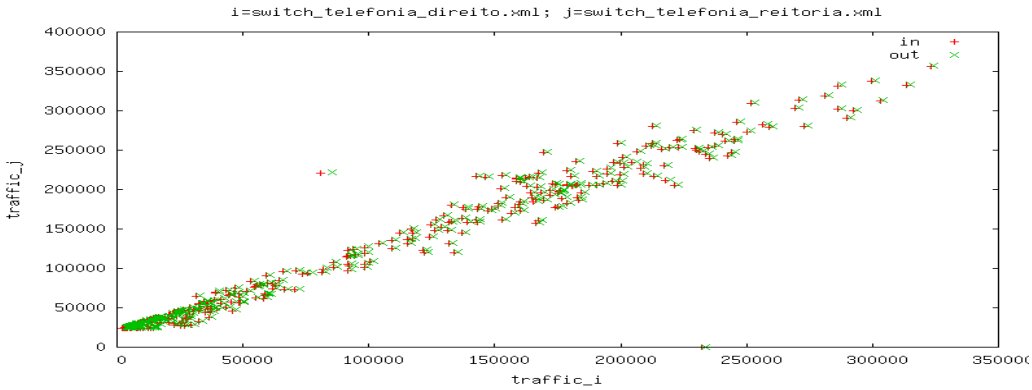


Figura 2.30: *Esquema dos roteadores da Universidade Federal Fluminense.*

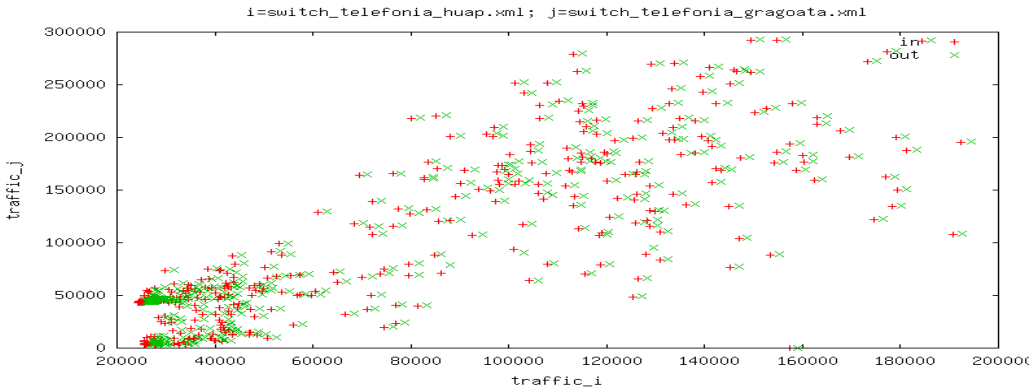
além do Campus da Praia Vermelha (onde se situam os maiores grupos de usuários como Física, Engenharias e Computação), apresentam links redundantes, ao passo que outros possuem apenas um caminho, o que cria switches com alta centralidade (o link NTI-Praia Vermelha é um exemplo). Como exemplo crítico de centralidade, nossa única saída para o mundo exterior é o link com o CBPF, pela Rede Rio. O simulador de guerra cibernética terá que ser capaz de criar redes aleatórias mas que guardem semelhanças com a rede da UFF, por exemplo, como exemplo de rede acadêmica. O operador do simulador deverá escolher, por exemplo, onde os agentes invasores serão colocados.

A simples caracterização por switches e links não é suficiente para o propósito de um simulador (Guillaume et al., 2006). Usando ainda o exemplo da UFF, verificamos que a Reitoria é grande utilizadora de banda e tem um link de alta velocidade. Na figura, estão ligados diretamente à Reitoria, a Editora da UFF, a Perícia Médica e o setor de Transporte. São setores de baixa utilização

mas com links de alta velocidade apenas porque estão geograficamente localizados próximo ao centro administrativo. Um melhor indicativo das correlações entre os pontos da rede estão mostrados na fig. 2.31.



(a)



(b)

Figura 2.31: *Correlações entre as flutuações dos roteadores de VoIP da UFF. As cores diferenciam ligações recebidas e ligações efetuadas.*

A figura mostra que há uma clara correlação entre as flutuações das ligações da Faculdade de Direito e da Reitoria, enquanto a correlação não é tão clara quando consideramos o Hospital Universitário e o Campus de Ciências Humanas. Isto significa que Reitoria e Faculdade de Direito têm o mesmo perfil de uso de telefonia: por exemplo, grande número de ligações em certos horários dentro do

horário comercial, enquanto o Hospital Universitário não apresenta esta relação tão claramente comparada com o Campus de Ciências Humanas. Do ponto de vista de um invasor, o Hospital seria um local apropriado para coletar as informações. Como outro ponto curioso, a telefonia da UFF emprega o sistema VoIP, e este é um sistema muito poderoso do ponto de vista de guerra cibernética, já que a maioria das ligações é em redes próximas (até mesmo dentro da mesma repartição). Por outro lado, sistemas com o Skype, são mais utilizados para ligações fora das redes, diminuindo sua efetividade do ponto de vista de um ataque.

2.10 Conclusões

Neste capítulo apresentamos o método de Monte Carlo, de utilização comprovada em diversas áreas. Apresentamos o modelo de Ising, pois o mesmo é base para a maioria das simulações que apresentamos neste capítulo. Nossa intenção foi de apresentar as ferramentas comuns, para que ficassem claras as conexões entre os trabalhos.

Mais uma vez, reforçamos que a intenção deste trabalho é mostrar como é possível realizar trabalhos interdisciplinares, utilizando ferramentas computacionais poderosas. Esta é uma característica que nos segue desde o doutoramento há vinte anos: ao invés de especializar em um assunto, somos mais motivados a conhecer um número maior deles e tentar dar alguma contribuição, exatamente por não estar tão ligado aos problemas tratados.

Boa parte dos modelos apresentados, neste capítulo, pertencem à classe dos “toy-models”, isto é, modelos bastante simplificados em que tentamos retirar a essência do fenômeno para compreender sua dinâmica. Isto parece paradoxal no estudo de sistemas complexos, pois as partes não reproduzem o comportamento do todo e remover partes pode significar a retirada de vários fatores

importantes. A utilização de técnicas de caracterização de fenômenos universais em Física estatística, como os expoentes críticos, por outro lado, contribuem neste aspecto, visto que são grandezas bastante robustas quanto à detalhes do problema.

Ao menos um problema discutido neste capítulo está ligado ao problema de Inovação. Enquanto é comum encontrarmos ligações entre físicos experimentais e assuntos de inovação tecnológica, procuramos mostrar que também teóricos (ou uma bifurcação destes, os "computacionais") também podem contribuir para o processo de Inovação.

3

Envelhecimento Biológico

"Condenados à morte,condenados à vida,
eis duas certezas"
Alfred de Vigny

3.1 O que é o Envelhecimento

O envelhecimento de um organismo corresponde ao acúmulo de mudanças que ocorrem neste organismo ao longo do tempo. O termo "senescência" tem significado próximo, porém enfatiza a deterioração do organismo devido a este acúmulo de mudanças, que acaba levando à morte. A palavra vem do latim "*senex*", que significa "de idade avançada". Estamos usando o termo "envelhecimento biológico" para distinguir o processo de mudança que vários materiais apresentam em suas propriedades ao longo do tempo. Este processo também é conhecido na língua inglesa por "aging", principalmente em Ciências dos Materiais e Física.

Os sinais de envelhecimento incluem a diminuição da capacidade de recuperação aos danos nos tecidos ou sistemas, declínio na capacidade reprodutiva, redução da mobilidade e tantos outros. Muitas doenças são fortemente correlacionadas com o processo de envelhecimento como o câncer, artrite, ataques cardíacos, etc. que

são objetos de uma grande fração da pesquisa em medicina, atualmente. Nem todos os sintomas do envelhecimento são ruins: cabelos grisalhos, ou mesmo a perda de cabelos, não diminuem a viabilidade do indivíduo, enquanto a perda de elasticidade das artérias pode levar ao estreitamento das mesmas e, em consequência, ao entupimento. Este processo pode causar a falta de suprimentos no cérebro ou no coração, causando os ataques.

É conhecido que vários fatores contribuem para o processo de envelhecimento ou senescência, entre eles: fatores fisiológicos, genéticos, comportamento e mesmo culturais, como a dieta, por exemplo (Ekerdt, 2002). O envelhecimento aparece então como fator limitante na expectativa de vida de uma população (fig.3.1).

Figura 3.1: *Jeanne Louise Calment (21/02/1875–4/08/1997), 122 anos e 164 dias, a pessoa mais velha do mundo, segundo comprovações oficiais. Embora a expectativa de vida humana tenha aumentado nos últimos 100 anos (de 40 anos, no início do século XX, até 64 anos, em 2009) principalmente pela redução dos índices de mortalidade infantil, a máxima expectativa de vida – calculada pelos 10% mais longevos de uma população – subiu apenas 1.8% desde 1960.*

Diferente das doenças que afetam nossa longevidade, o envelhecimento possui as seguintes características: (i) ocorre em todos os animais multicelulares que alcançam um tamanho fixo na maturidade sexual, (ii) ocorre em todos os membros de uma espécie ape-

nas nas idades além da maturidade, (iii) ocorre em praticamente todas as espécies (iv) ocorre em animais mesmo sobre proteção e (v) tem a mesma causa molecular. Nenhuma doença conhecida apresenta estas propriedades. Por isto, estudar o envelhecimento apenas através das doenças que atingem os organismos não poderá resolver ou mesmo ajudar na total compreensão do problema do envelhecimento, daí a necessidade de uma teoria geral.

Outro ponto é que a expectativa de vida é extremamente dependente da espécie, isto é, espécies que são parecidas em vários aspectos podem ter diferentes longevidades. Plantas podem ser anuais, como as ervilhas, ou atingem quase 5000 anos, como o pinheiro Methuselah, de 4841 anos que ainda vive nas White Mountains da Califórnia, ou Prometheus, o pinheiro de aproximadamente 5000 anos, cortado em 1964.

Um fator fisiológico bastante importante para o sucesso na manutenção da espécie é o tamanho do corpo. Corpos maiores exigem maior quantidade de energia para manter em equilíbrio homeostático. Existe uma clara relação entre as taxas metabólicas e o tamanho dos organismos (Speakman, 2005), ver fig. 3.2. Em geral, animais maiores vivem mais, porém animais de dimensões bastante diferentes, como o papagaio e o elefante, têm expectativas de vida parecidas (por volta de 70 anos). Por outro lado, uma propriedade que parece ser importante para a determinação da longevidade é a idade da maturidade sexual. Espécies que se reproduzem mais tardiamente vivem mais.

Mesmo considerando indivíduos de uma mesma espécie, existem consideráveis variações de longevidades, como mostra a fig. 3.3. Enquanto o sul da África possui a menor expectativa de vida do planeta – devido principalmente ao alto índice de contaminados com o HIV – os de maior longevidade são países desenvolvidos, mas sem concentração geográfica definida. A variação é de 39 anos para a Swazilândia e 81 para o Japão. Em países desenvolvidos, as principais causas de morte são ligadas à doenças que são fortemente

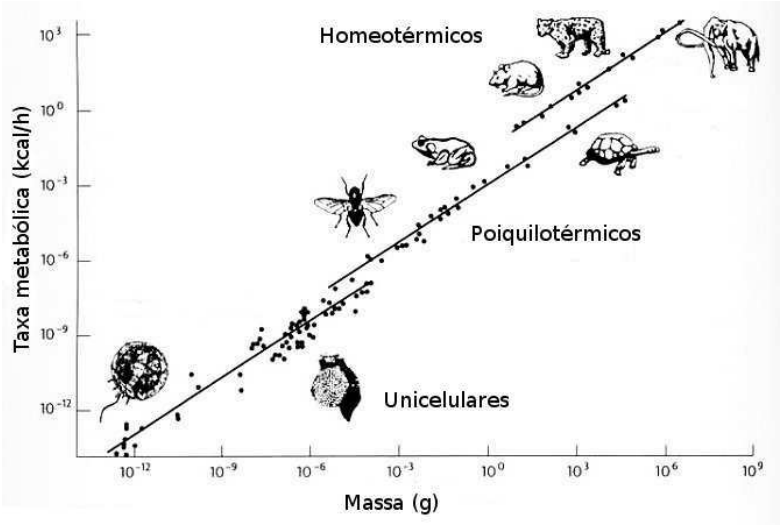


Figura 3.2: *Taxa metabólica (kcal/h) versus massa (g) para diversos organismos, mostrando a lei de potência com expoente* $3/4$ *(Savage et al., 2007) . A lei continua valendo, inclusive para mitocôndrias e suas subunidades (até* 10^{-18}*, na escala vertical). A lei dos* $3/4$ *pode ser obtida considerando a dimensão fractal da rede de transporte metabólica, que adiciona uma dimensão a mais, semelhante ao problema da compactação em teorias das cordas.*

correlacionadas com a idade dos indivíduos.

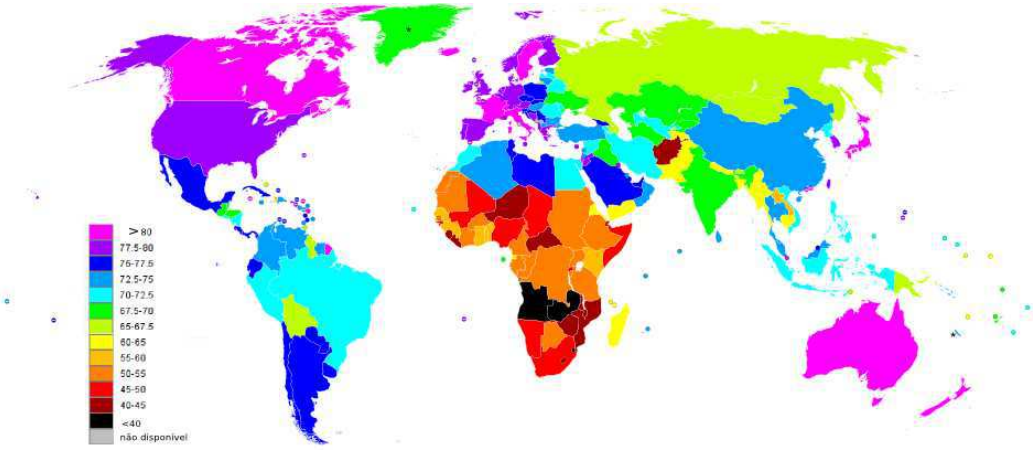


Figura 3.3: *Expectativa de vida média nos diversos países, em 2008. Note que enquanto a região de menor expectativa está concentrada na África, em particular no sul do continente, países com maior expetativa estão espalhados.*

Além dos fatores de epidemias e níveis de desenvolvimento, outros fatores comportamentais podem modificar a expectativa de vida dos humanos: dietas e exercícios diminuem o ritmo com que envelhecemos. Experimentos em ratos e outros animais pequenos sugerem que dietas com restrição calórica podem aumentar a expectativa de vida. O mesmo ocorre em populações com baixos níveis de colesterol e outros fatores. Uma visão mais positiva sobre o próprio envelhecimento também parece aumentar a longevidade, conforme estudo recente (Levy et al., 2002).

Com tantas causas e fatores influenciando o processo, é natural que apareçam várias teorias sobre o envelhecimento. Vamos apresentar algumas delas e classificá-las na próxima seção. Devemos ressaltar que embora o envelhecimento de populações humanas, por óbvias razões, seja o principal motivo de estudo da área, devemos procurar por um teoria ainda mais geral, envolvendo espécies com estratégias de vida bastante diferentes.

3.2 Como Medir o Envelhecimento

Dada a importância do assunto e multiplicidade de fatores influenciando no processo de envelhecimento, esta é uma área de pesquisa bastante ativa. Antes de apresentarmos as teorias, precisamos de quantidades que possam ser medidas e que validem os resultados das mesmas. A definição de envelhecimento então segue três vertentes: uma fisiológica, em que o envelhecimento é caracterizado pelo declínio das capacidades do indivíduo; outra de riscos (ou atuária) em que o envelhecimento é o aumento da mortalidade com a idade; e uma outra mais recente, a evolucionária, em que o envelhecimento é retratado como o declínio da adaptação (ou "fitness") que envolve a probabilidade de sobrevivência mas também leva em conta a capacidade reprodutiva.

Vamos considerar a taxa de mortalidade com a idade como me-

dida principal do envelhecimento. A taxa de mortalidade em uma dada idade representa a probabilidade que um indivíduo que está vivo em uma dada idade morra antes de atingir a idade posterior. Por exemplo, para jovens americanos e europeus, com 15 anos de idade, a probabilidade de morte é em torno de 0,05%. Para a idade de 105 anos, a mortalidade é mil vezes maior. Este crescimento exponencial foi primeiro notado por Benjamin Gompertz (Gompertz, 1825). A lei de Gompertz–Makeham diz que a taxa de mortalidade em uma idade depende de um fator que não é dependente da idade (termo de Makeham) e outro que é dependente da idade (termo de Gompertz). Em situações de controle como em laboratórios ou em países desenvolvidos, por exemplo, o termo de Gompertz é o principal responsável pelas taxas de morte. Gompertz propôs o termo da forma

$$N(t) = N(0)e^{-c(e^{at}-1)} \tag{3.1}$$

onde $N(t)$ é o número de indivíduos, t é o tempo e a e c são constantes. O que Gompertz chamou de "lei" ainda é objeto de controvérsia (Golubev, 2009), se é um resultado baseado em leis naturais ou apenas uma ferramenta útil para tratar taxas de mortalidade.

Uma das dificuldades da aceitação da lei Gompertz aparece porque observações recentes com moscas e os "supercentenários" (indivíduos com mais de 110 anos, um em cada mil centenários), sugerem um declínio nas taxas de mortalidade para idades mais avançadas (Rose et al., 2006). Apesar destas observações, a lei de Gompertz já foi bastante testada em problemas populacionais e mostrou ser bastante robusta, independendo da raça, condições sociais, etc. e valendo mesmo para diversas espécies. Na fig. 3.4 mostramos um gráfico das mortes nos Estados Unidos, em 2006, construído a partir de dados retirados de `http://www.disastercenter.com`. A mortalidade chega a diferir por quase uma década dependendo das condições e da idade, porém os comportamentos são semelhantes e bastante próximos em idades avan-

çadas (o efeito da mortalidade reduzida não aparece pois a curva está truncada em 85 anos).

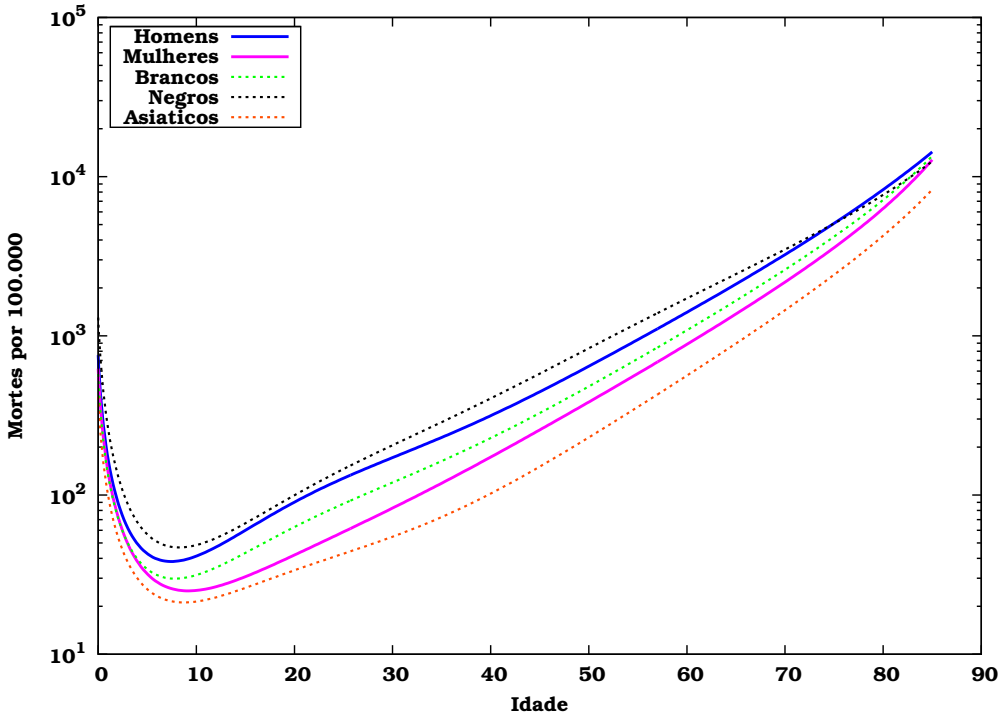


Figura 3.4: *Mortes por 100.000, nos Estados Unidos da América em 2006. As linhas contínuas representam as mortes, separadas por sexo e as pontilhadas, pela ascendência. Apesar das diferenças no número de mortes, o comportamento das curvas é semelhante.*

Outro ponto que comprova a robustez da lei de Gompertz é que a mesma vale para diferentes épocas, como mostramos na fig.3.5. Os avanços da medicina têm ajudado principalmente na diminuição da mortalidade infantil. A expectativa de vida dos países tem crescido principalmente por este fator e não pela extensão da longevidade, como já comentamos anteriormente.

Um parâmetro que comprova a universalidade da lei de Gompertz é o tempo de duplicação da taxa de mortalidade, ou MRDT ("mortality rate doubling time"). Para os humanos, o MRDT é de cerca de 8 anos, praticamente independente do país e de suas par-

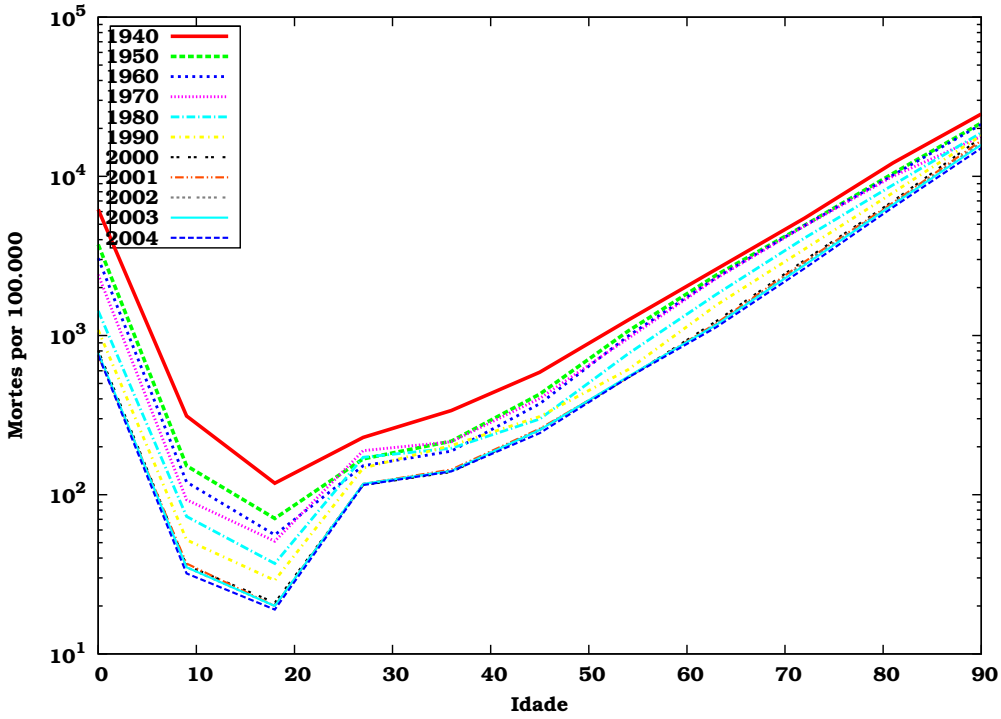


Figura 3.5: *Mortes por 100.000 indivíduos nos Estados Unidos da América, desde 1940. A redução da mortalidade é maior para as primeiras idades.*

ticularidades. Por exemplo, a incidência de câncer de mama no Japão é quase 10 vezes menor que nos Estados Unidos, mas ainda assim a MRDT é a mesma. Na figura 3.6, mostramos as curvas de mortalidade para alguns países em diversas épocas e mais uma vez, temos uma confirmação da validade da lei de Gompertz e seu caráter universal.

A maioria dos dados de envelhecimento se referem a humanos e moscas. Além de Drosophilas serem utilizadas com frequência em experiências genéticas, seu tempo de vida curto (cerca de 20 dias) permite que várias gerações sejam analisadas em um tempo razoavelmente curto. Um problema que aparece nas experiências com moscas é o fato da mortalidade obtida em laboratório não reproduzir a mortalidade na vida selvagem, não só pela proteção mas porque a dieta também não é a mesma. É preciso tomar cuidado

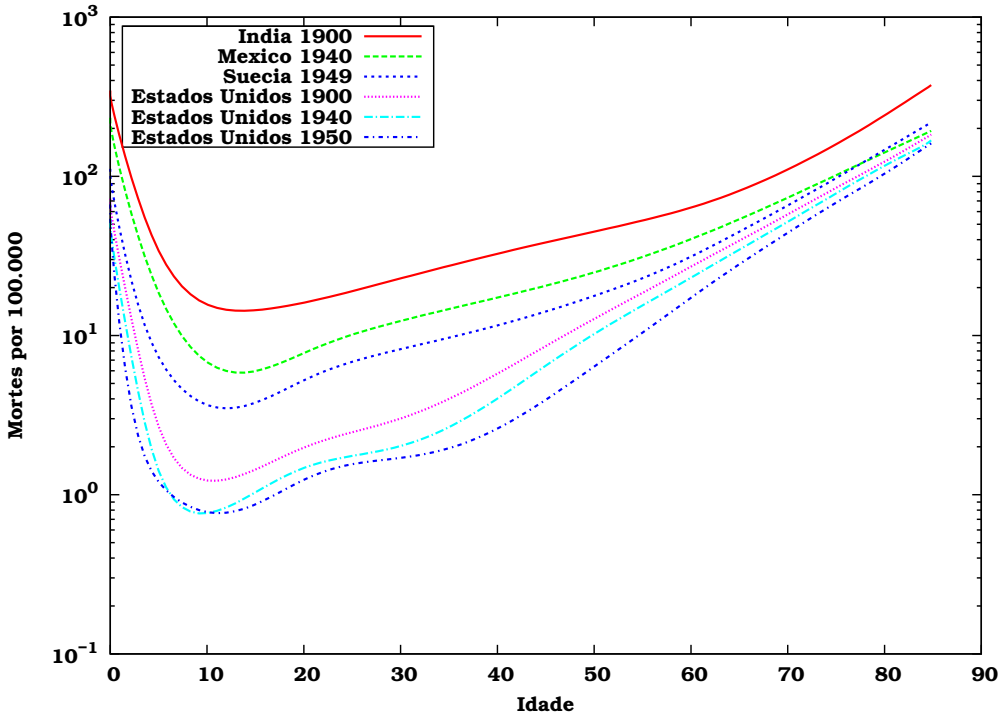


Figura 3.6: *Apesar do valor das taxas de mortalidades diferirem bastante no tempo e em diferentes países, principalmente na puberdade, as mesmas se aproximam em idades mais avançadas.*

para que efeitos de supernutrição (ou subnutrição) não influenciem os resultados, já que as moscas não informam quando estão satisfeitas. Os experimentos são realizados com um número grande de moscas (da ordem de milhões delas). Na fig. 3.7 apresentamos a curva de mortalidade para moscas, apresentada em Carey et al. (1992), mas cuja tabela de dados está disponível em `http://lib.stat.cmu.edu/DASL/Datafiles/Medflies.html`. O experimento foi realizado com mais de um milhão de moscas, e podemos ver claramente o comportamento da lei de Gompertz nos primeiros dias (até a idade 15), com uma pequena desaceleração até 20 dias e uma faixa em que a mortalidade é praticamente constante. Apesar do grande número de moscas, é preciso notar que esta fase de mortalidade constante é experimentada por menos de 10% das moscas, as mais longevas.

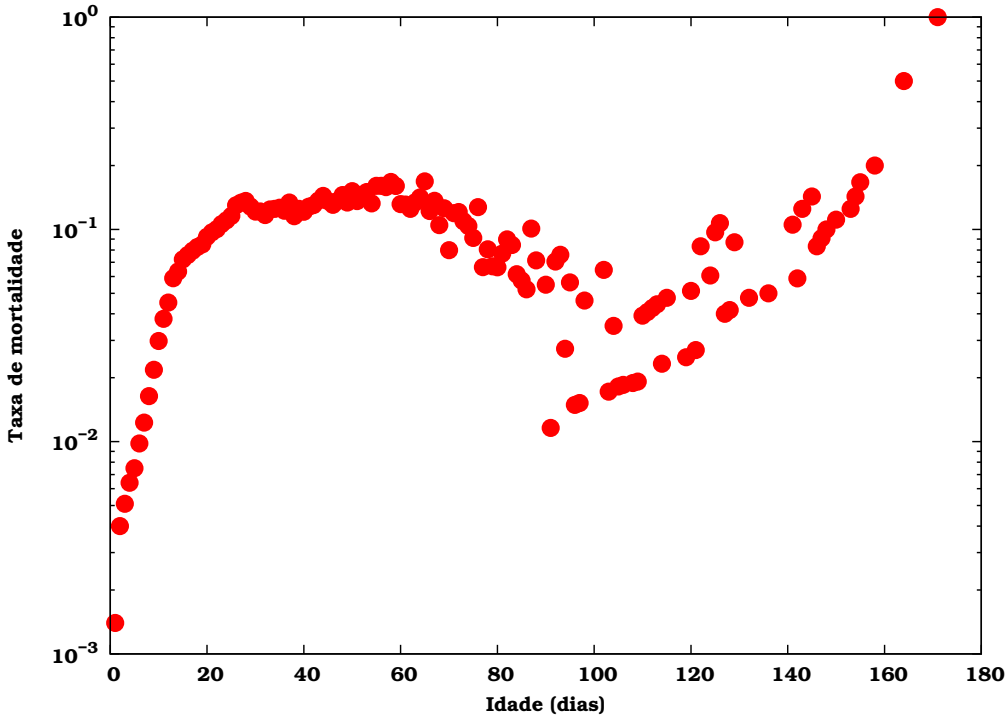
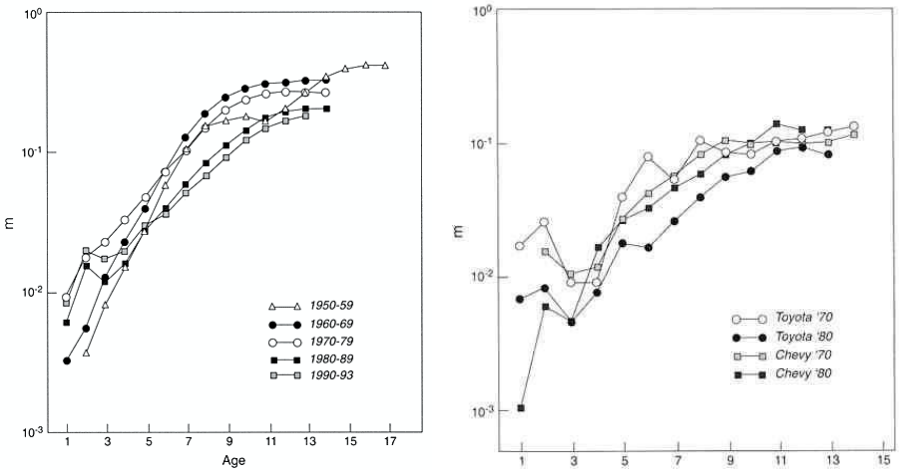


Figura 3.7: *A curva de mortalidade para moscas exibe um comportamento como o da lei de Gompertz para até 15 dias, quando a taxa parece constante e chega a diminuir. 90% da população de 1,2 milhões de moscas morrem antes de 30 dias.*

Em casos gerais, o comportamento das curvas de mortalidade não é determinado apenas pelo envelhecimento. Por exemplo, em humanos, existe um mínimo por volta de 10 anos, quando o sistema imunológico está amadurecido e com grande repertório. O aumento da mortalidade por volta dos vinte anos tem uma grande contribuição de acidentes de trânsito. Também entre os animais, outros fatores influenciam as curvas de mortalidade: a disputa por fêmeas, logo após a maturidade pode envolver combates e aumento da mortalidade dos machos, como ocorre com os alces, por exemplo. Fêmeas também se encontram em maior risco durante o parto e os primeiros anos de cuidado parental.

É curioso notar que o conceito de expectativa de vida pode ser estendido para sistemas inanimados. Vaupel e Owens coletaram

os dados de licenciamento de veículos nos Estados Unidos, em diversas épocas. Mesmo considerando automóveis de uma mesma marca, as curvas de "mortalidade" se assemelham às de Gompertz. Também se nota a diminuição na velocidade de envelhecimento em idades mais avançadas. Algumas hipótese sobre este comportamento incluem: automóveis velhos andam menos que os novos, portanto são sujeitos a menor desgaste; os donos de automóveis mais velhos são mais cuidadosos, etc. Estas hipóteses sugerem que a população de carros seja heterogênea, na fig. 3.8(b) vemos que carros de marcas diferentes têm longevidades diferentes. Carros que atingem idade mais avançadas fazem parte de uma "elite".



(a) (b)

Figura 3.8: *Curvas de mortalidade de automóveis em vários períodos. O automóvel é considerado morto, quando não aparece no próximo registro. Em (b), são mostradas as mortalidades para automóveis de uma mesma marca. Dados de Vaupel e Owens, retirados de Wachter and Finch (1997).*

Agora que temos uma grandeza, a taxa de mortalidade, que representa o processo de envelhecimento e, mais importante para nós, físicos, com um comportamento quase universal, vamos apresentar algumas teorias de envelhecimento.

3.3 Como Envelhecemos

Como apresentado na seção anterior, apesar de vários fatores alterarem os valores das taxas de mortalidade de populações, mesmo em espécies tão diferentes quanto humanos e *Drosophilas*, encontramos um comportamento que parece universal: o crescimento exponencial das taxas de mortalidade com a idade. Existem várias perguntas a serem respondidas mas vamos utilizar duas delas para classificar as teorias existentes: um parte das teorias é preocupada com a questão "como" envelhecemos, que fenômenos são responsáveis pela perda da capacidade regenerativa ou de certas habilidades com a idade. Uma outra parte das teorias tenta responder "por que" envelhecemos, se o envelhecimento é mesmo uma consequência natural de estarmos vivos.

Vamos iniciar pelas teorias do "como": as causas do envelhecimento. Nesta linha vamos apresentar as teorias por ordem de complexidade do nível em que elas são baseadas: vamos iniciar com teorias atômicas/moleculares, passando pela célula e tecidos. Uma das primeiras tentativas de explicação do processo de envelhecimento foi curiosamente formulada pelo físico húngaro Leó Szilárd (Szilard, 1959), mais conhecido pela descoberta da reação nuclear em cadeia, que possibilitou a construção da bomba atômica, dentro do Projeto Manhattan e pela patente de um refrigerador, junto com A. Einstein. Szilárd propôs que exposição às radiações levariam a erros na replicação do DNA que, acumulados, poderiam matar os indivíduos. Esta hipótese de mutações somáticas foi inspirada em experiências realizadas em ratos expostos à radiação, que apresentavam alguns sintomas de envelhecimento, como atrofia e agrisalhamento dos pelos. Como a radiação também afeta as células reprodutivas, as mutações poderiam se acumular nas gerações futuras.

Posteriormente, foi mostrado que o próprio DNA sofre mutações ao longo da vida de um indivíduo, sem necessidade de agentes

externos (Orgel, 1963). Como também não foram encontradas proteínas que tivessem funções alteradas em indivíduos mais velhos, apesar da procura que esta ideia desencadeou, e a observação que sobreviventes de Hiroshima e Nagasaki não tiveram sintomas de envelhecimento precoce, esta teoria foi abandonada. A ideia de mudanças no DNA estarem relacionadas ao envelhecimento, porém, permaneceu.

A procura por modificadores do DNA levou a uma outra teoria para o envelhecimento: a dos radicais livres, de Harman (Harman, 1956). Harman observou que radicais livres (parte de uma molécula que possui um elétron desemparelhado) são altamente reativos. Radicais livres são instáveis – o que levou a alguma dificuldade de aceitação da hipótese na época – e têm forte tendência de atrair elétrons de outros átomos ou moléculas próximas, a fim de atingir o estado de menor energia. Este tipo de ligação pode induzir uma reação em cadeia, com moléculas tentando compartilhar elétrons, umas com as outras. Quando as moléculas do DNA participam destas reações, podem ser modificadas e, em consequência, as proteínas que deveria produzir. Da observação que radiação poderia levar a câncer, mutações e envelhecimento, e que os radicais livres são os principais responsáveis pelos danos nestes casos, Harman sugeriu que radicais livres, produzidos na respiração, poderiam acabar sendo responsáveis pelos danos no DNA e pelo subsequente envelhecimento.

Radicais livres, por outro lado, também fazem parte do metabolismo, inclusive desempenhando importante papel no sistema imunológico, onde macrófagos utilizam-nos como armadilhas para células invasoras. O nosso corpo também apresenta defesas contra os radicais livres: substâncias como as vitaminas C e E absorvem estes radicais evitando a propagação das reações através do organismo. Harman posteriormente tentou utilizar os antioxidantes como substâncias antienvelhecedoras. Apesar de algum sucesso na expectativa de vida em ratos e no nematodo *"Caenorhabditis*

elegans" , nenhum efeito foi encontrado na máxima expectativa de vida. Harman reformulou a teoria, propondo que as mitocôndrias estariam tanto produzindo como sendo atacadas por radicais livres e que os antioxidantes não chegam à elas, justificando a ineficácia do tratamento. Foi lançada então a teoria de envelhecimento das mitocôndrias (Harman, 1972).

Passando a um nível organizacional mais complexo, existem teorias associadas ao envelhecimento celular. A base destas teorias é que algumas células e tecidos têm uma capacidade limitada de reposição ou regeneração. Neurônios não são repostos ou regenerados. Por outro lado, células epiteliais têm grande capacidade de substituição, mesmo em idades mais avançadas. Em 1961, L. Hayflick notou que células em cultura se reproduziam um número finito de vezes (Hayflick, 1965): o limite de Hayflick. Esta descoberta foi importante pois até então se imaginava que células eram imortais. As células eram fibroblastos, do tecido conjuntivo e responsáveis pela síntese de colágeno e elastina. Os fibroblastos dividiam cerca de 60 vezes. As células não necessariamente morriam após o número de divisões, apenas paravam de reproduzir. Por outro lado, neurônios não se dividem e nem por isto estão em processo de senescência.

Algumas células parecem ter a capacidade infinita de reprodução como as células cancerosas. As células HeLa, de Henrietta Lacks, que morreu de câncer em 1951, continuam a se dividir (Masters, 2002). O limite de Hayflick depende da função da célula e da espécie. O número de divisões de fibroblastos fetais para variam de 14 a 28 para camundongos a mais de 100 para tartarugas, como mostra a figura 3.9. Embora possa fornecer uma explicação para a queda da eficiência do sistema imunológico em idades avançadas, esta teoria de morte programada não explica a variação de idades de mortes em uma dada espécie.

Células humanas possuem 23 pares de cromossomos ou 46 cromossomos. Nas extremidades de cada cromossomo existe um pe-

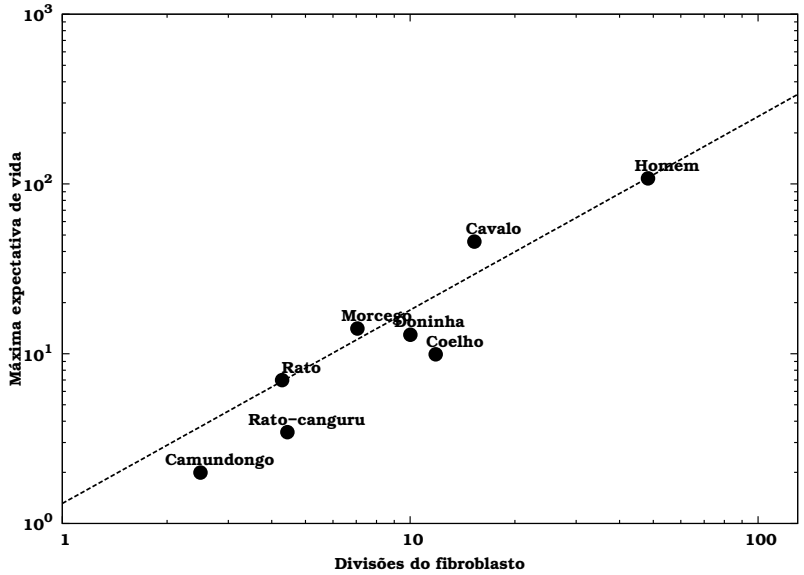


Figura 3.9: *Máxima expectativa de vida para alguns mamíferos contra o número máximo de divisões de fibroblastos (Masters, 2002). O resultado é semelhante para eritrócitos, ao invés de fibroblastos.*

daço de DNA chamado telômero. Estes pedaços não codificam informações, embora sejam importantes para a estabilidade do cromossomo, e são pedaços longos que contém uma sequência que se repete. A sequência do telômero varia em espécies diferentes: são seis nos vertebrados e a sequência é TTAGGG, porém maiores nas leveduras, por exemplo nas "Saccharomyces cerevisiae" a sequência é TGTGGGTGTGGTG. A cada divisão, uma parte do telômero é perdida. O número de vezes que uma célula pode se dividir é determinada pelo comprimento do telômero. Por exemplo, para células humanas jovens, o telômero contém cerca de 5.000 pares de bases (contra 130 milhões do cromossomo inteiro).

Apesar das evidências do encurtamento dos telômeros como fator importante na determinação da vida da célula, não é clara a relação com o envelhecimento: células epiteliais podem ser afetadas por este efeito, mas não os neurônios, por exemplo. Por um lado, um limite no número de divisões celulares pode evitar dis-

funções como o câncer: se uma célula se reproduz mesmo após a perda do telômero existe a possibilidade de uma anormalidade. Camundongos não apresentam o encurtamento dos telômeros, devido à telomerase somática (Mathon et al., 2001), mas mesmo sem encurtamento dos telômeros, as células do rato param de se dividir, enquanto em outros animais, as células costumam realizar a apoptose (ou "morte celular programada") após atingido o limite de Hayflick.

Passando agora para um nível ainda mais complexo, podemos investigar as causas do envelhecimento em órgãos, tecidos ou no indivíduo. Vários hormônios sofrem a influência da idade: DHEA, melatonina, hormônios da tireoide, o hormônio do crescimento GH; mulheres experimentam a menopausa com a diminuição de progesterona e estradiol; no cérebro há diminuição de neurotransmissores como a dopamina, acetilcolina, norepinefrina, GABA e serotonina. Embora a ideia de reposição hormonal pareça sugestiva, devido a alguns dos fatores já citados acima, hormônios frequentemente elevam o risco de câncer em homens e mulheres, apesar dos hormônios diferentes. É possível que o declínio de produção hormonal contribua para a sobrevivência, diminuindo o risco de câncer.

Também o sistema imunológico é afetado pelo envelhecimento. Alguns efeitos do envelhecimento são devido ao declínio na capacidade do sistema imunológico em distinguir entre corpos estranhos e corpos nativos. Com o envelhecimento não só o corpo fica menos resistente às doenças específicas da idade, como aumenta o risco do próprio organismo ser atingido pelo sistema imunológico.

O efeito da restrição calórica prolongando a expectativa de vida é conhecido já há bastante tempo (McCay and Crowell, 1934). Vários trabalhos apareceram na literatura sugerindo que uma restrição calórica poderia retardar o processo do envelhecimento em leveduras, vermes, ratos e macacos (Anderson et al., 2009). O estudo inclui macacos que estão em dieta restritiva já há 20 anos.

Ratos e camundongos que comem entre 40% e 60% das calorias que outros que comem tanto quanto queiram tem a máxima expectativa de vida aumentada em até 50% e a expectativa de vida é aumentada em 65%. Animais jovens sujeitos à restrição calórica tem sua maturidade sexual retardada, sugerindo que o efeito da restrição calórica é a redução da taxa de envelhecimento.

O mecanismo pelo qual a restrição calórica age não é bem compreendido apesar dos vários estudos realizados. Um dos possíveis mecanismos seria a redução dos níveis de insulina, o que diminuiria a autofagia, mas este efeito reportado em ratos, não foi encontrado em humanos (Fontana et al., 2008). Por outro lado, a restrição calórica diminui sinais precursores do Mal de Alzheimer em micos (Qin et al., 2006). E mesmo uma hipótese baseada na Evolução e Seleção Natural já foi proposta (Holliday, 1989): em vários períodos da História, em épocas de privações, por exemplo, foi mais importante investir na sobrevivência do que a reprodução, pois a prole não seria mantida. Para isto a expectativa de vida deve ser ampliada, para permitir que o indivíduo reproduzisse em períodos posteriores. Esta justificativa vale para outras espécies, em escala de tempos diferentes (como as estações do ano, por exemplo).

Em resumo, uma plêiade de fatores são importantes e decisivos no processo de envelhecimento. Algumas ideias explicam alguns resultados mas falham em um aspecto mais geral de compreensão do envelhecimento. Os fatores aparecem em diversas escalas, desde atômicas até todo o indivíduo e seus hábitos. Nenhuma das teorias acima é capaz de prover alguma pista sobre a lei de Gompertz e o crescimento exponencial da taxa de mortalidade em populações de espécies variadas. As teorias acima também não explicam como organismos fisiologicamente parecidos possam ter tão diferentes expectativas de vida ou taxas de mortalidade. Como citado no início da seção, existe uma outra vertente de teorias, mais preocupadas em saber porque envelhecemos. Descreveremos algumas delas na seção seguinte.

3.4 Por que Envelhecemos ?

As teorias de "como envelhecemos" tratam de uso e desgaste, mutações somáticas, radicais livres, hábitos, resposta hormonal, etc. As teorias de "por que envelhecemos" lidam com fatores ligados à genética, evolução e seleção natural (Darwin, 1859). Um dos primeiros a considerar o problema de envelhecimento foi Wallace, que sugeriu que a sobrevivência muito além da idade de reprodução seria uma desvantagem para a espécie (Wallace, 1889), pois os pais iriam competir com os filhos pelos recursos disponíveis. A teoria de morte programada foi proposta por Weismann (Weismann, 1889), já em 1889. Outras vantagens de uma expectativa de vida limitada seriam: evitar a superpopulação, maior pressão para evolução sobre os indiv duos mais velhos por competição com os mais novos e aumento da variabilidade genética ao impedir o domínio genético dos primeiros indivíduos (Goldsmith, 2008).

Duas questões teleológicas aparecem com relação à esta teoria de morte programada: a primeira é que temos uma ideia para o propósito, porém ainda não temos o mecanismo. O outro problema é que o raciocínio é circular: a senescência existe para que indivíduos jovens assumam, porém se não existisse senescência, não haveria necessidade de reposição. Outro ponto a ser esclarecido é que, segundo esta hipótese, os jovens só deveriam ser beneficiados quando os mais velhos fossem retirados da população, o que está em desacordo com várias observações de cuidado parental. Outro problema é que o envelhecimento pode ser vantajoso para a linhagem, mas não para o indivíduo. Como indivíduos são substituídos mais rapidamente que as famílias, é de se esperar que a seleção agisse mais fortemente no indivíduo que nas famílias deste. Portanto, este efeito, se existente, deveria ser fraco.

Estas questões ficaram em aberto até 1952, quando Sir Peter Medawar tratou do problema em *"An Unsolved Problem in Biology"* (Medawar, 1952). Medawar nasceu em Petrópolis e viria a

ganhar o Prêmio Nobel de Medicina em 1960 pelos seus trabalhos de tolerância e rejeição de órgãos transplantados. A ideia original de Medawar é que a pressão evolutiva é maior no período anterior à idade de reprodução e menor depois dela pois a informação genética (traços genéticos) já teriam sido passados adiante. Doenças de origem genética e que diminuem a probabilidade de um indivíduo permanecer vivo, que ocorrem antes da idade de reprodução, tem maior chance de serem removidas por seleção natural do que aquelas que se manifestam em idades mais avançadas.

A hipótese original tornou-se a teoria do acúmulo de mutações, como conhecemos hoje. Uma importante consequência, segundo esta teoria, é que além da presença do gene, é importante o tempo (idade) em que este gene vai se manifestar, ou se expressar. O envelhecimento é, então, uma competição entre a criação de mutações maléficas (que tem efeito negativo no fenótipo e que diminuem o fitness do organismo), sua remoção pela seleção natural, o tempo de sua expressão (que também pode depender de fatores genéticos) e a idade da reprodução.

Algumas experiências com moscas (Charlesworth, 2001; Gong et al., 2006; Pletcher et al., 1999) têm sido explicadas por esta teoria. Nestas experiências, mutações são induzidas e as mesmas podem ou não se acumular. É medida então a mortalidade das moscas. A comprovação é obtida se as taxas de mortalidade são maiores que a do grupo controle, veja fig 3.10. Outro estudo com *Drosophila melanogaster* verificou o acúmulo de mutações através do aumento da mortalidade em populações que se reproduziam a partir de suas próprias linhagens, ou "inbreeding" (Snoke and Promislow, 2003). Os resultados foram confirmados também em pardais (Keller et al., 2008). Diferente das outras experiências, esta última, com pardais, foi realizada em ambiente selvagem e não em laboratório, o que aumenta a confiança na teoria.

Uma outra teoria evolucionária para o envelhecimento foi proposta por Williams (1957): a teoria da pleiotropia antagônica. Plei-

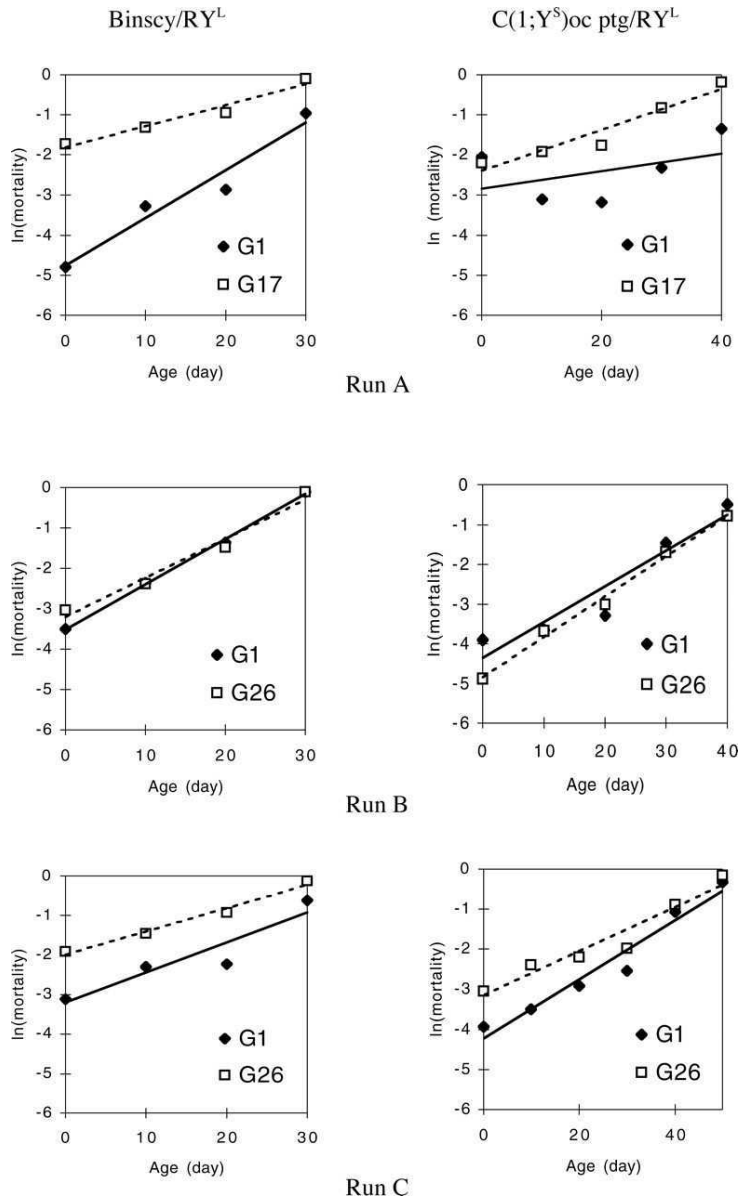


Figura 3.10: *Taxas de mortalidade de moscas, em função da idade em dias, obtidas de Pletcher et al. (1999). Foram realizadas três experiências com moscas em que o cruzamento era selecionado para favorecer o acúmulo (Binscy/RY^L) ou não (C(1;Y^S)) de mutações. A mortalidade foi aumentada em todas as experiências devido ao "inbreeding", mas as mortalidades foram maiores para os conjunto com acúmulo de mutações. Esta experiência mostra o efeito do acúmulo de mutações na expectativa de vida de uma população.*

otropia é a propriedade de um gene que se expressa em mais de uma característica do indivíduo. Um exemplo dramático de gene pleiotrópico é o gene MyD, da distrofia miotônica, ou doença de Steinert. A distrofia miotônica é uma doença neuromuscular dominante (basta uma cópia do gene) caracterizada por atrofia muscular progressiva frequentemente envolvendo as mãos, antebraços e face, podendo causar ainda calvície frontal, cataratas, diabetes, atrofia testicular, anormalidades nos batimentos cardíacos, fraqueza do diafragma e um aumento da incidência de retardo mental. O gene MyD é pleiotrópico pois pode atingir um número grande de órgãos, com diferentes efeitos.

Williams notou que alguns genes pleiotrópicos podem ser benéficos nas primeiras idades e maléficos em idades mais avançadas, daí o antagonismo. Por afetarem um número maior de traços, a pressão evolutiva sobre estes genes é grande (Barton, 1990). Um exemplo deste tipo de gene é o que controla a produção de testosterona nos homens: enquanto tem efeitos positivos nas primeiras idades, inclusive aumentando a chance de reprodução, a maior quantidade de hormônios em idades mais avançadas pode induzir o câncer de próstata. Outro gene é o p53, que regula células danificadas a parar de reproduzir ou induzir a apoptose. Este gene previne o câncer em idades mais jovens mas pode ser responsável pelo envelhecimento ao diminuir a capacidade de regeneração em idades avançadas (Rodier et al., 2007). Outro exemplo relacionado às teorias de "como envelhecemos" é a regulação de enzimas Nox (Lambeth, 2007). Estas enzimas favorecem o aparecimento de radicais livres em funções fisiológicas normais. No entanto, a presença destas em grandes quantidades, em idades avançadas, são relacionadas com um grande número de doenças.

Algumas evidências da teoria da pleiotropia antagônica são:

- maior longevidade deve estar relacionada com menor fertilidade

- senescência será mais rápida em espécies em que a fertilidade diminui com a idade
- se houver diferenças sexuais, o sexo com a maior mortalidade será o de menor taxa de crescimento da fertilidade
- desenvolvimento individual rápido implica em maior velocidade de senescência.

Uma outra teoria evolucionária é a "disposable soma" ou corpo descartável. Esta teoria não deixa de ser um caso especial de pleiotropia antagônica. Kirkwood (1977) propõe que os organismos fazem um balanço energético para manter o corpo ("soma") ou se reproduzirem. Organismos que investem na maturação, acumulam mais danos pois o corpo não pode repará-los. Espécies, como os ratos, que são presas, investem mais energia na reprodução do que na longevidade. Humanos, por outro lado, podem investir mais recursos na vida após a maturidade pois alocam mais recursos na reparação dos danos. Neste caso, a fertilidade é menor. Esta teoria também é confirmada por experimentos com moscas (Orr and Sohal, 1994). Nesta experiência, *Drosophilas* que carregam cópias extras do gene SOD para a enzimas superóxido dismutase (que removem o super-reativo O_2^-, convertendo para o menos reativo H_2O_2) vivem até 30% a mais que as que carregam uma simples cópia. As que possuem cópias extras porém consomem mais oxigênio logo terão custos metabólicos maiores e só alcançarão a maturidade mais tarde, comparadas com as outras. A teoria do corpo descartável lembra as leis de conservação na Física, em particular a Primeira Lei da Termodinâmica.

Em resumo, existem algumas teorias evolucionárias para o envelhecimento. Todas parecem ser compatíveis com alguns experimentos mas falham em outros. De certa forma isto não é surpreendente já que estas teorias não são excludentes e o envelhecimento pode ser a associação de algumas das causas apresentadas. Este

já era o panorama em 1993, quando Partridge e Barton escreveram em seu artigo de revisão "Optimality, mutation and the evolution of ageing", para a Nature (Partridge and Barton, 1993):

> *"Evolutionary explanations of ageing fall into two classes. Organisms might have evolved the optimal life history, in which survival and fertility late in life are sacrificed for the sake of early reproduction and survival. Alternatively, the life history might be depressed below this optimal compromise by deleterious mutations: because selection against late-acting mutations is weaker, these will impose a greater load on late life. Evidence for the importance of both is emerging, and unravelling their relative importance presents experimentalists with a major challenge."*

Este artigo me foi apresentado em 1994, pelo prof. Dietrich Stauffer, da Universidade de Colônia, na Alemanha, na ocasião de sua primeira visita ao Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense. Foi após a leitura do mesmo que comecei a trabalhar nas simulações que descreverei na próxima seção. Alguns modelos computacionais para simulações de envelhecimento já existiam na época, alguns baseados neste artigo de revisão, como o de Jan (1994), baseado em um modelo de Stauffer e Jan e o modelo de Heumann and Hötzel (1995). Para uma revisão destes modelos, veja Moss de Oliveira et al. (1999).

3.5 Um Modelo Computacional para Simulação do Envelhecimento

O modelo que vamos apresentar é fortemente inspirado nas ideias de Medawar (1952). Como citado no final da seção anterior, segundo Partridge and Barton (1993) é interessante descobrir a contribuição das teorias de acúmulo de mutações e pleiotropia an-

tagônica. O modelo é um baseado em tiras de bits, comum em modelagem computacional, como o de Eigen (1971) e o de Farmer et al. (1986), para o sistema imunológico.

Vamos considerar uma população de indivíduos, cada um representado por uma tira de bits, isto é, uma sequência de 0's e 1's. A descrição apresentada aqui será fiel ao modelo original (Penna, 1995). Cada bit representa um intervalo de tempo na vida do indivíduo. A tira de bits é, às vezes, chamada de genoma mas ela representa uma leitura do genoma levando em conta o tempo em que uma mutação ruim vai se expressar. O valor "1" do bit em uma posição representa a expressão de uma mutação ruim naquela idade e que a mesma vai diminuir a probabilidade do indivíduo permanecer vivo. Note que a história do indivíduo está praticamente determinada no nascimento.

Na fig. 3.11, mostramos um exemplo para um indivíduo com até oito idades. O tamanho da tira de bits pode ser qualquer, desde que maior do que o número de vezes em que o indivíduo vai ser "recenseado": no exemplo da fig. 3.11, se a tira representasse humanos que vivem até 96 anos, cada posição deveria corresponder a 12 anos. Se quiséssemos incluir Jeanne Louise Calment nesta simulação, deveríamos adicionar mais três bits (com mais dois iríamos a 120, com três até 132). Como veremos adiante, o tamanho da tira de bits também define uma outra escala de tempo, a de ocorrência de novas mutações.

Idade	7	6	5	4	3	2	1	0
Valor	1	0	1	1	0	0	0	0

Figura 3.11: *Exemplo de tira de bits. Cada posição representa um intervalo de tempo na vida do indivíduo. Neste exemplo, mutações deletérias irão se manifestar nas idades 4,5 e 7. A leitura é feita da direita para esquerda e iniciando em zero, inspirada pela representação dos bits no computador.*

A cada intervalo de tempo (correspondendo a um bit na tira), o indivíduo envelhece. O indivíduo permanece vivo se o número de

mutações que se expressaram até a idade corrente for menor que um limite T (de "threshold"). Na versão original do modelo, este limite é o mesmo para toda a população.

A etapa mais importante é a reprodução. Caso o indivíduo permaneça vivo até a idade da maturidade sexual R, ele poderá gerar um descendente. O descendente terá a mesma tira do pai, exceto por M bits, o que representa novas mutações. A grande maioria das mutações são neutras, mas para efeito do tempo de simulação vamos considerar mutações que alteram o que acontece na tira. Uma posição da tira é escolhida ao acaso e o estado do bit naquela posição ou idade é alterado (invertido). Portanto podemos ter mutações boas $1 \to 0$ (ou reversões), ou ruins $0 \to 1$. A probabilidade de ocorrências de mutação, na concepção, será então M/B, onde B é o tamanho da tira. A cada intervalo de tempo, após a maturidade sexual, o indivíduo pode gerar b descendentes. No modelo original, não foi acrescentado nenhum dado para modelar a queda da fertilidade com a idade.

Se o número de descendentes por unidade de tempo b for alto e/ou a idade de maturidade sexual R for baixa, a população poderia crescer rapidamente tomando toda a memória do computador (em 1994, isto não era tão difícil). Para evitar a superpopulação e para incluir a competição entre os indivíduos, foi adicionado um termo logístico (Verhulst, 1838) para dar conta da capacidade do ambiente (competição intraespecífica): o ambiente possui uma capacidade máxima N_{max}. Se a população em um dado instante t é $N(t)$, então o indivíduo será retirado da população com probabilidade $N(t)/N_{max}$.

A dinâmica do modelo pode ser reduzida às seguintes etapas, para cada indivíduo:

1. se já tiver atingido a maturidade sexual, reproduz;
2. teste de morte por fatores genéticos (depende da idade);
3. teste de morte por competição (independe da idade);

4. envelhece.

Um intervalo de tempo terá decorrido após todos os indivíduos passarem pelas etapas acima. As grandezas de interesse são a população total e o número de indivíduos com uma dada idade. Partindo de uma configuração inicial que pode ser indivíduos com tiras aleatórias ou tiras "limpas", isto é, inicialmente sem mutações, realizamos vários passos e depois da termalização, armazenamos as grandezas de interesse para o cálculo das médias. Os primeiros resultados estão na fig. 3.12. A primeira constatação é que o modelo leva a população a um estado de equilíbrio com tamanho de população constante. Como esperado, a introdução de mutações leva o sistema mais rapidamente à situação de equilíbrio.

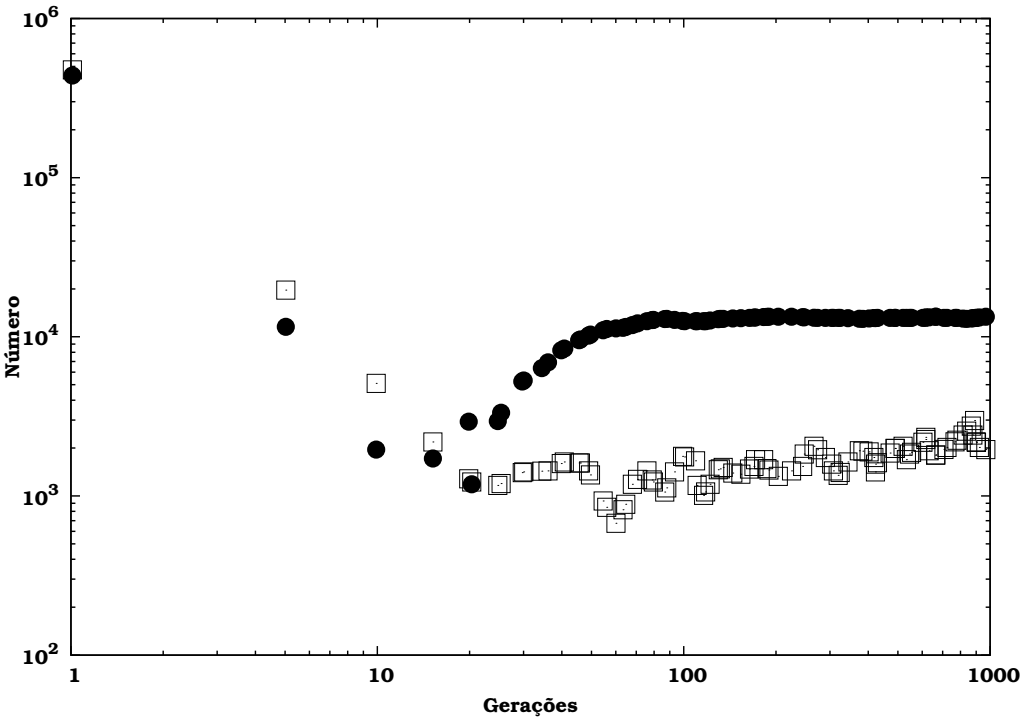


Figura 3.12: *Evolução temporal partindo de uma população de 450.000 indivíduos, inicialmente com tiras aleatórias. Os resultados são para o caso sem mutações (□) e para $M = 2$ (•). Note como a presença de mutações favorece a ida para o equilíbrio.*

Na fig. 3.13 apresentamos a frequência de indivíduos com uma

dada idade, em um população. Variando a idade da maturidade sexual, encontramos diferentes expectativas e máximas expectativas de vida. Penna (1995) ainda mostra que a reprodução mais tardia aumenta a longevidade porém a população se estabiliza em tamanhos menores, portanto expectativas de vida maiores não é a melhor estratégia para manutenção da espécie, considerando apenas a competição intra-espécie.

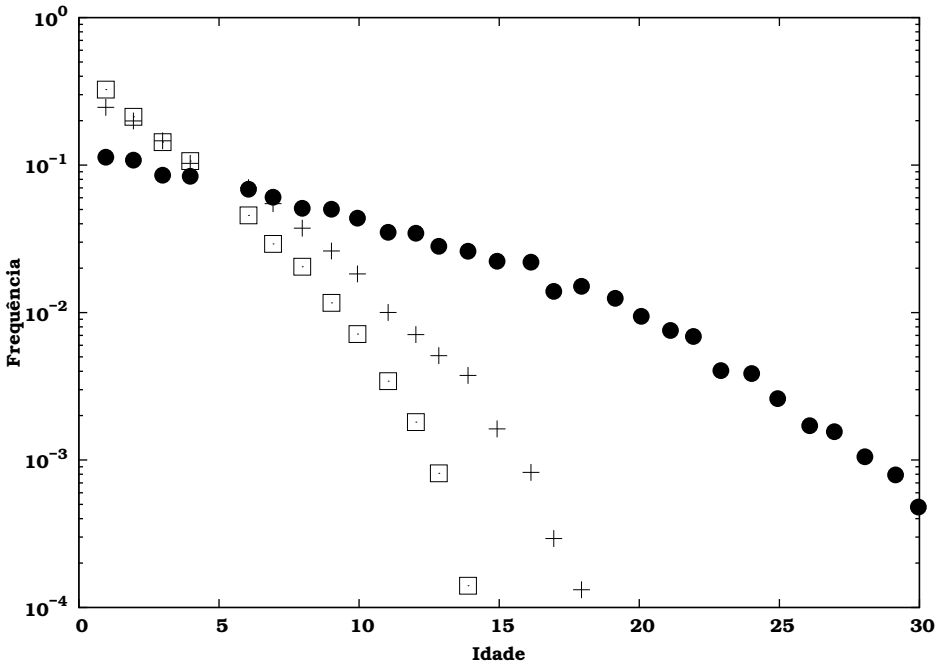


Figura 3.13: *Frequência de indivíduos com uma dada idade na população para diferentes idades de maturidade sexual:* $R = 2$ *(□),* $R = 4$ *(+) e* $R = 8$ *(•). Os parâmetros para esta simulação foram* $T = 4, M = 1$ *e* $b = 1$.

Como podemos ver na fig. 3.13 a população vai, ao máximo, até a idade 32, tamanho de palavra típica dos processadores da época. É fácil aumentar o tamanho das tiras. Na época, os modelos disponíveis simulavam três ou quatro idades, e a introdução de um nova idade aumenta o custo computacional como adicionando uma nova dimensão a uma matriz. Este modelo demanda um esforço linear no aumento da tira, isto é, $O(n)$. A importância de um maior

número de idades é justificável: a intenção é reproduzir a lei de Gompertz-Makeham.

Na primeira publicação, o efeito de mutações entre o pai e o filho era dependente da manifestação de mutações na tira do pai (a mutação invertia o estado do pai). Após vários intervalos de tempo, é mais provável encontrar mutações deletérias após a idade de reprodução do que antes – compatível com a teoria do acúmulo de mutações. Portanto a probabilidade de gerar uma nova mutação deletéria é maior antes da idade de reprodução do que depois dela. Seguindo uma sugestão do prof. Moysés Nussenzveig, Penna and Stauffer (1995) simularam o modelo onde somente mutações ruins eram adicionadas. Mesmo com esta modificação, a população atingia o equilíbrio com um tamanho diferente de zero. O processo de acúmulo de mutações deletérias em populações assexuadas que pode levar à extinção das mesmas é chamado de catraca de Muller (Muller, 1932) (o termo "catraca" só aparece em Muller (1964)).

Nos primeiros trabalhos com o modelo, era comum utilizarmos a taxa de sobrevivência $N_{i+1}(t)/N_i(t)$, onde $N_i(t)$ representa o número de indivíduos com a idade i, no tempo t. A primeira tentativa de usar o modelo para ajuste de populações humanas reais e diretamente comparada com a lei de Gompertz foi realizada por Penna and Stauffer (1996), onde dados reais da população alemã, em 1987, foram utilizados.

Na fig. 3.14 é mostrada uma comparação dos resultados de uma simulação do modelo original, pela primeira vez com até 128 idades, e a população alemã. Podemos ver que o modelo apresenta comportamento compatível com a lei de Gompertz-Makeham para idades além da idade de reprodução. No algoritmo original, com $M = 1$, um bit da tira é alterado, portanto a probabilidade de um bit 1 aparecer na primeira idade é M/B. Para obter baixas taxas de mortalidade ($< 10^{-4}$) nas primeiras idades, aumentamos o tamanho da palavra para 128 e diminuímos M, deixando de ser um número inteiro para ser a probabilidade de mutação. Portanto, M e

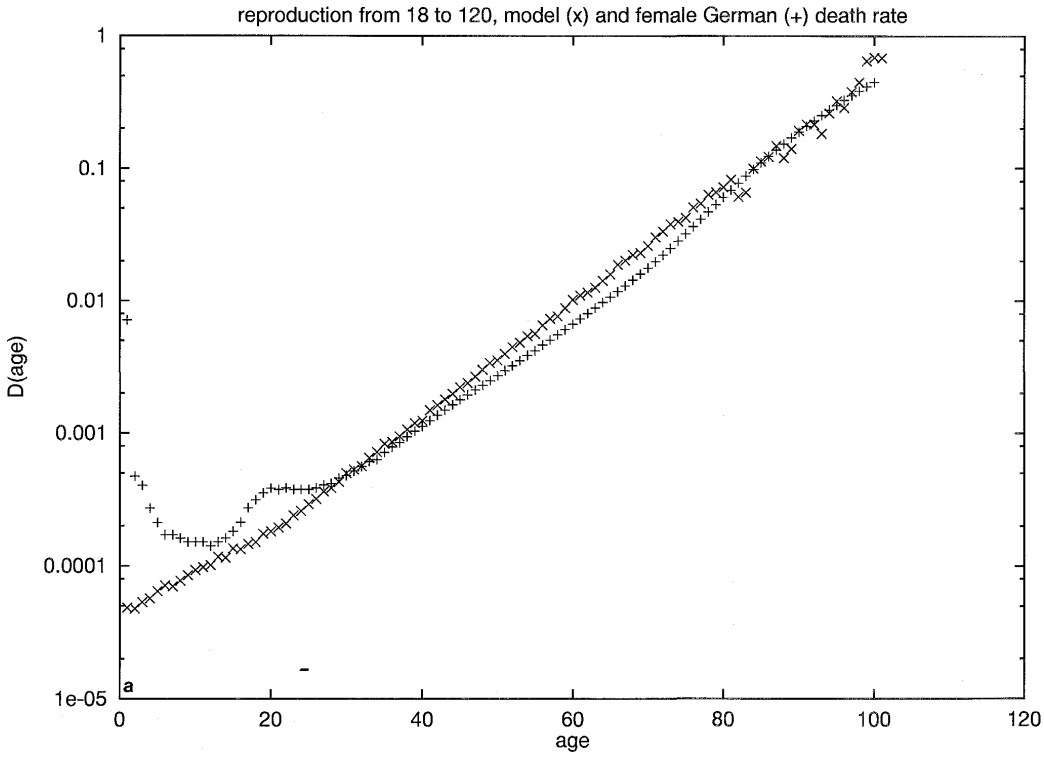


Figura 3.14: *Taxa de mortalidade* $D(age)$ *contra a idade (age). Os dados são para a população de mulheres alemãs, em 1987 (+), e uma simulação com* $T = 2$ *e* $N_{max} = 10^6$ *indivíduos. Retirado de Penna and Stauffer (1996).*

B podem ser facilmente extraídos dos dados experimentais. Como dito anteriormente a razão M/B é que define a escala em que mutações deletérias serão adicionadas às tiras. Os outros parâmetros também foram baseados nos dados: $R = 18$ e $b = 0.08$.

O modelo computacional acima sugere que a lei de Gompertz-Makeham (Gompertz, 1825) seja, então, compatível com a teoria do acúmulo de mutações de Medawar (Medawar, 1952). A ligação entre qualquer das teorias citadas anteriormente e o crescimento exponencial da taxa de mortalidade não é direta. O modelo é simples e não tem a ambição de explicar toda a curva de mortalidade, mas servir de ferramenta para verificar a contribuição do efeito do acúmulo de mutações em populações. Na seção seguinte vamos

testar o modelo quanto a uma outra lei para o envelhecimento.

3.6 Teoria Fenomenológica da Mortalidade

Embora a reprodução da lei de Gompertz-Makeham seja um resultado notável, podemos ainda validar o modelo com outros resultados fenomenológicos de envelhecimento. Azbel (1996) propôs uma lei universal para populações humanas e, com alguma modificação dos parâmetros, para moscas. Humanos e moscas são as únicas populações para as quais existem registros abundantes, confiáveis e com boa estatística. Segundo Azbel, a mortalidade humana se reduziria a um parâmetro, dependente de fatores históricos, geográficos, culturais, etc. e outros dois parâmetros, iguais para todos os indivíduos da espécie. Estes parâmetros determinariam a mortalidade da população e são derivados da lei de Gompertz (3.1). Definindo $q(x)$ como a mortalidade na idade x, a lei de Gompertz pode ser escrita como:

$$q(x) = -\frac{1}{N}\frac{dN}{dx} = a^* e^{bx} \tag{3.2}$$

Definindo o nível de Gompertz $a = \ln a^\star - \ln b$, podemos reescrever a grandeza adimensional q/b como

$$\ln \frac{q(x)}{b} = ax + b \tag{3.3}$$

Utilizando uma grande coleção de dados de diversas populações: japoneses (1894-1990), suecos (1780-1900 e 1970-1991) e alemães (1987), Azbel obteve um par (a, b) para cada curva de mortalidade. Todos os dados utilizados alcançam alguns bilhões de homens e mulheres em diferentes países, em um período de dois séculos. A coleção dos pontos está na fig. 3.15.

A impressionante relação linear da fig. 3.15, entre os parâme-

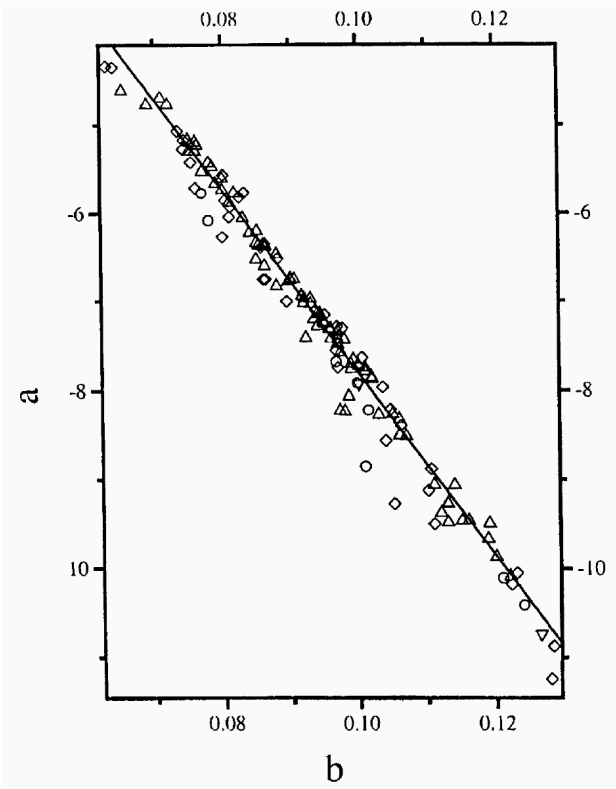


Figura 3.15: *Nível de Gompertz contra a inclinação b das curvas de mortalidade para japoneses 1891-1990 (◇), suecos 1780-1900 e 1968-1991 (○), alemães 1987 (▽) e algumas tabelas mundiais (△). Extraído de (Azbel, 1997).*

tros a e b da eq.(3.3), pode ser descrita como

$$a = \ln A - Xb \tag{3.4}$$

com os valores $\ln A = 2.4 \pm 0.2$ e $X = 103 \pm 1$. O parâmetro X é o mesmo para toda a espécie. Como mostramos na fig. 3.6, as curvas de mortalidade têm se modificado ao longo dos anos, porém assim como modificamos o coeficiente angular, é modificado o intercepto, de tal maneira que temos o ponto fixo em X. Portanto X não representa um limite para a longevidade humana, mas uma idade onde a taxa de mortalidade praticamente não se altera. Esta relação já havia sido prevista teoricamente por Strehler and Mildvan (1960).

Em populações heterogêneas, como as de moscas ou automóveis, b varia entre os indivíduos, mas A e X devem ainda ser os mesmos para toda a espécie. Se a heterogeneidade é suficientemente alta, $b \to 0$, então para as idades maiores que X, deve aparecer uma dependência linear entre o inverso do número de indivíduos e a idade x.

$$\frac{1}{N_x} \propto \frac{(x - X_2)}{N_0}. \tag{3.5}$$

Este resultado é confirmado na fig. 3.16.

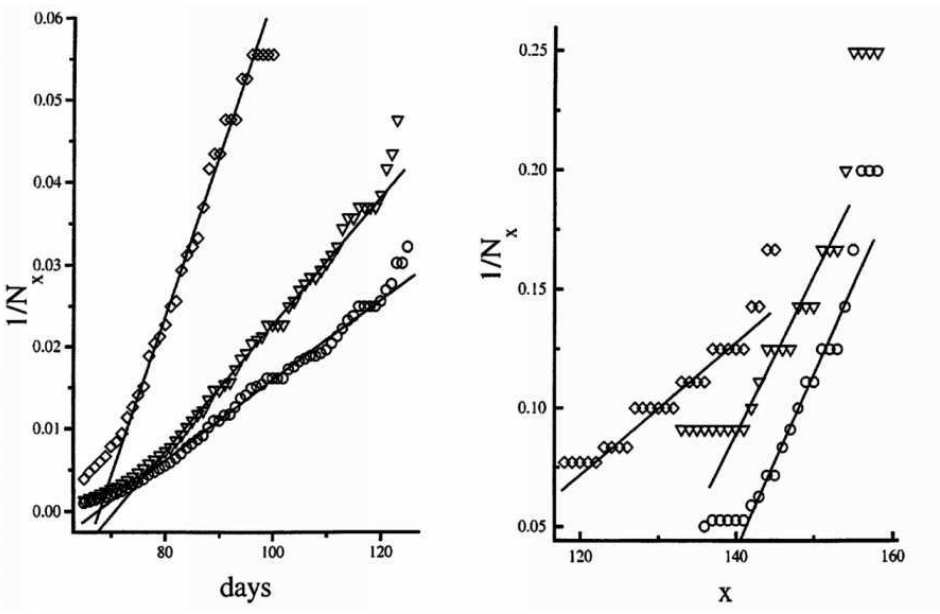


Figura 3.16: *Inverso de sobreviventes $1/N_x$ na idade x. Os dados representam os machos ($\diamond$), fêmeas (∇) e para o conjunto ($\circ$). Na figura (a) idades até 130 dias, na (b) destacam-se as idades mais avançadas. Extraído de Azbel (1997).*

A teoria fenomenológica de Azbel trata diferentemente populações homogêneas e populações heterogêneas. Vamos apresentar aqui as propostas para a simulação destes tipos de populações e verificar se a teoria do acúmulo de mutações é compatível com os resultados de Azbel. Para reproduzir o efeito da história em populações homogêneas, vamos simular populações com as mesmas características genéticas, representadas no modelo pelos parâme-

tros R, T, M e B, porém com diferentes números aleatórios. Este procedimento representa histórias diferentes pois, por exemplo, indivíduos com boa carga genética, mas que foram retirados da população, antes da idade de reprodução, pelo fator logístico com uma determinada sequência de números aleatórios, poderão gerar descendentes com uma outra sequência.

Os fatores a e b são retirados das curvas de mortalidade, como na fig. 3.14. Simulamos 20 diferentes sementes com os parâmetros $M = 0,4$, $B = 0,5$, $T = 3$, $b = 0.5$ e $R = 12$. Os ajustes da curva de Gompertz foram feitos para as idades superiores a 15, onde já se pode considerar uma fase adulta, considerando os últimos 5 mil passos de tempo, de um total de 150 mil passos, para garantir a convergência e a homogeneidade da população (considerando gerações, este número de passos é da ordem do aparecimento do *Homo Sapiens*, embora a população seja significativamente menor que a da Terra). Para simular diferentes espécies, alteramos o valor M que determina a taxa de novas mutações deletérias. Os resultados estão na fig. 3.17 e correspondem aos dados de Racco et al. (1998).

Pelo menos para populações homogêneas o modelo de tira de bits e, por consequência, a teoria do acúmulo de mutações, parecem estar em concordância com os resultados fenomenológicos de Azbel. Para simularmos uma população heterogênea, vamos permitir a coexistência de populações com características diferentes. No modelo original, esta seria um situação correspondendo a um transiente: a população mais adaptada e que gerasse mais dependentes logo dominaria e a população se tornaria homogênea. Racco et al. (1998) mostraram que os resultados de Azbel para populações heterogêneas podem ser encontrados no modelo, se considerarmos os primeiros passos da simulação, quando a população ainda não se encontra no equilíbrio. Nestas situações é mais difícil conseguir uma estatística razoável, o que significaria populações muito maiores, já que o grau de heterogeneidade muda a cada instante.

Vamos mostrar aqui um procedimento alternativo, que consiste

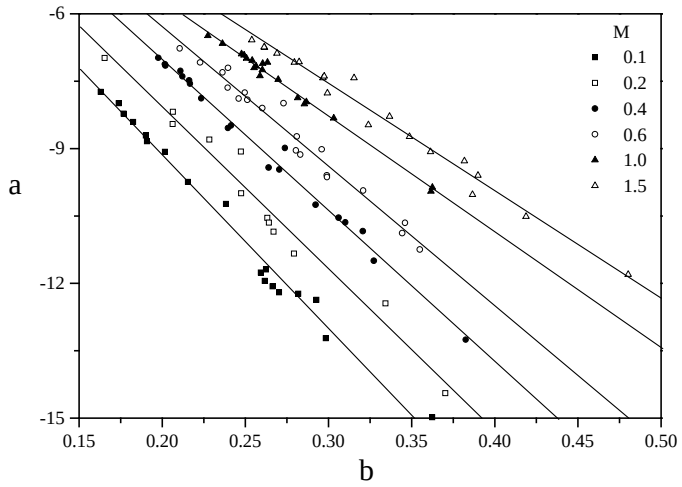


Figura 3.17: *Comprovação da relação linear entre a e b para simulações realizadas com o modelo computacional. Cada ponto do gráfico corresponde a uma simulação com uma semente aleatória diferente mas mantendo os mesmos parâmetros, exceto a taxa de novas mutações deletérias M , que corresponderiam à espécies diferentes.*

em modificar o fator logístico de forma a permitir a coexistência de populações. O novo fator, para um indivíduo com taxa de mutação M_C será

$$V_{mod} = \frac{(1/2)N_c + (3/4)N_{total}}{N_{max}} \tag{3.6}$$

onde N_c é o número de indivíduos com taxa de mutação M_c, N_{total} é o número total de indivíduos existentes na população e N_{max} o tamanho máximo da população definido no início da simulação. Os pesos foram escolhidos arbitrariamente. As taxas de mutação serão passadas no nascimento.

Realizamos uma simulação com a população com os mesmos parâmetros da simulação anterior, porém com quatro valores diferentes para as taxas de mutação. A curva de mortalidade está

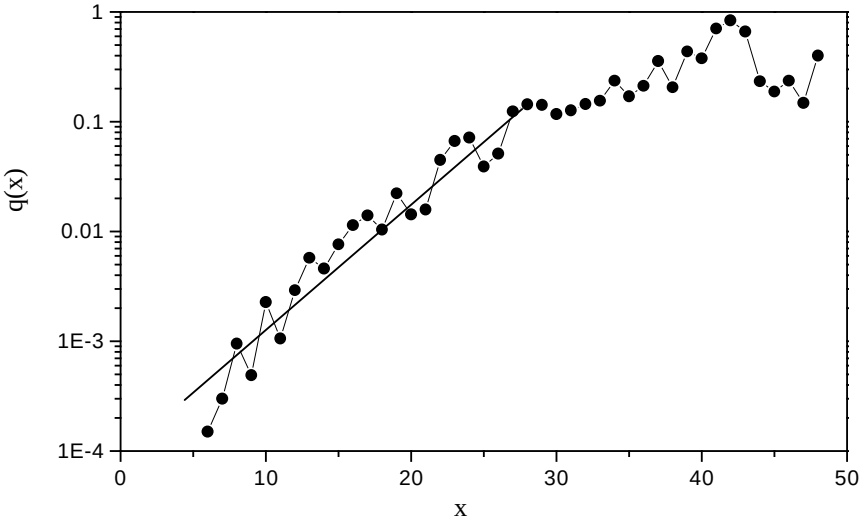


Figura 3.18: *Taxa de mortalidade para uma população heterogênea com quatro diferentes valores para as taxas de mutação ($M = 0,10; 0,25; 0,40$ e $0,55$). Para idades avançadas, é possível ver a redução da derivada da taxa de mortalidade. Note que também as flutuações na mortalidade são maiores que no caso anterior.*

representada na fig. 3.18.

A relação linear entre $\ln(N_0/N_x)$ e a idade, como observada por Azbel, também foi reproduzida, como mostra a fig. 3.19.

Em resumo, o modelo de tira de bits é compatível com a lei de Gompertz e a lei unitária de mortalidade de Azbel. O modelo consegue reproduzir o resultado tanto para populações homogêneas quanto heterogêneas. Nas seções seguintes apresentaremos algumas contribuições ao estudo de dinâmica de populações com estrutura de idades, realizadas com este modelo. Não pretendemos realizar uma completa revisão dos trabalhos que foram realizados utilizando o modelo de tira de bits, já que este trabalho está

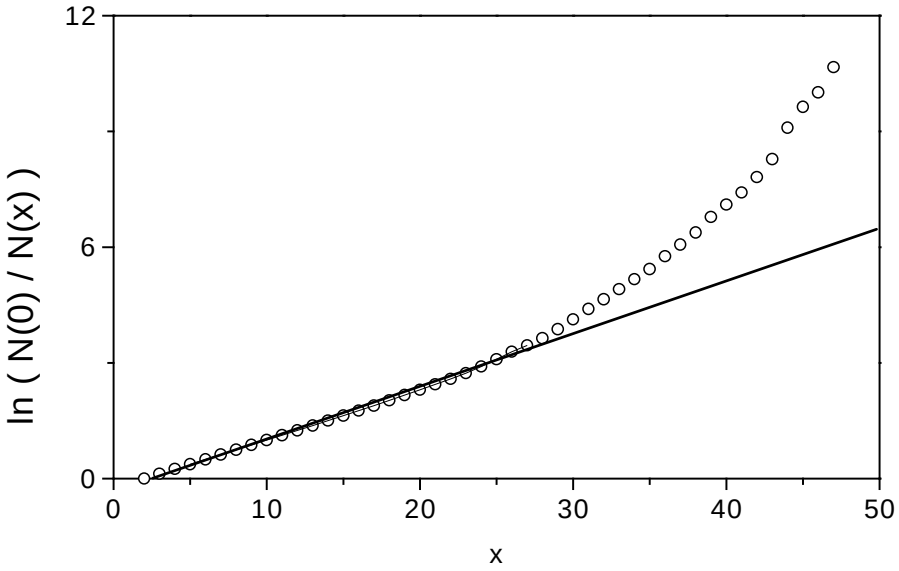


Figura 3.19: *$\ln(N_0/N_x)$ versus a idade s, para o caso da figura anterior. O comportamento é o mesmo das populações de moscas, como notado por Azbel (ver fig. 3.16).*

disponível em outras referências (ver, por exemplo, Stauffer et al. (2006)).

3.7 Avanços da Medicina

Na seção anterior descrevemos como o modelo reproduzia os resultados conhecidos das curvas de mortalidade. Até agora, trabalhamos com resultados das curvas de mortalidade em espécies, épocas e povos diferentes. Esta seção trata da evolução dinâmica das curvas de mortalidade, em particular a partir do século XX. Devido ao intervalo curto, em escalas de evolução, podemos atribuir estas mudanças aos avanços da Medicina. As razões por termos esco-

lhido esta aplicação para apresentação nesta tese são as seguintes: é um trabalho que ainda não foi publicado e é uma simples modificação no modelo original.

Voltemos à relação (3.4) que propõe uma correlação entre a inclinação e o intercepto das curvas de mortalidade (em escalas logarítmicas). Em uma revisão mais recente, Yashin et al. (2001) descobriram mudanças de comportamento no gráfico $\ln a$ contra b, como podemos ver na figura 3.20. Os ganchos que aparecem nas curvas, e que se referem a períodos mais recentes, foram associados ao aumento da longevidade, deslocando as curvas de sobrevivência e alterando o ponto fixo X, como proposto por Azbel.

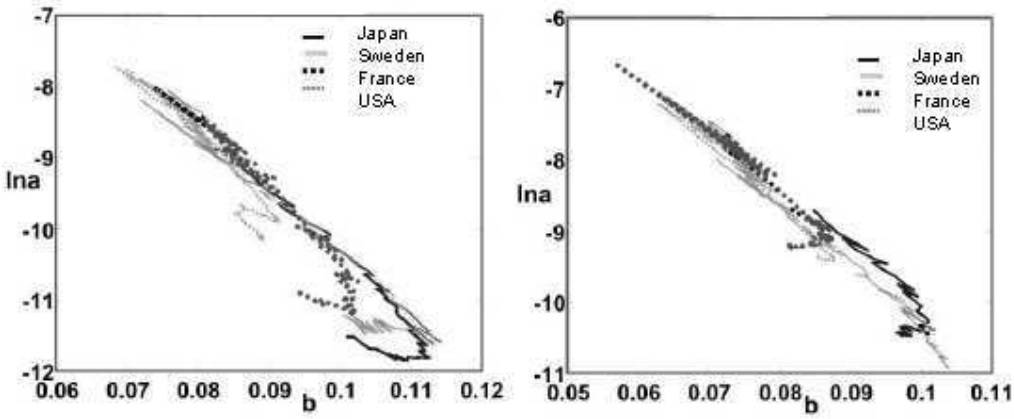


Figura 3.20: *$\ln a$ vs. b, para mulheres (esquerda) e homens (direita) na França, Suécia, Japão e Estados Unidos. A maioria dos pontos que pertencem à diagonal são do início do século XX. Extraído de Yashin et al. (2001).*

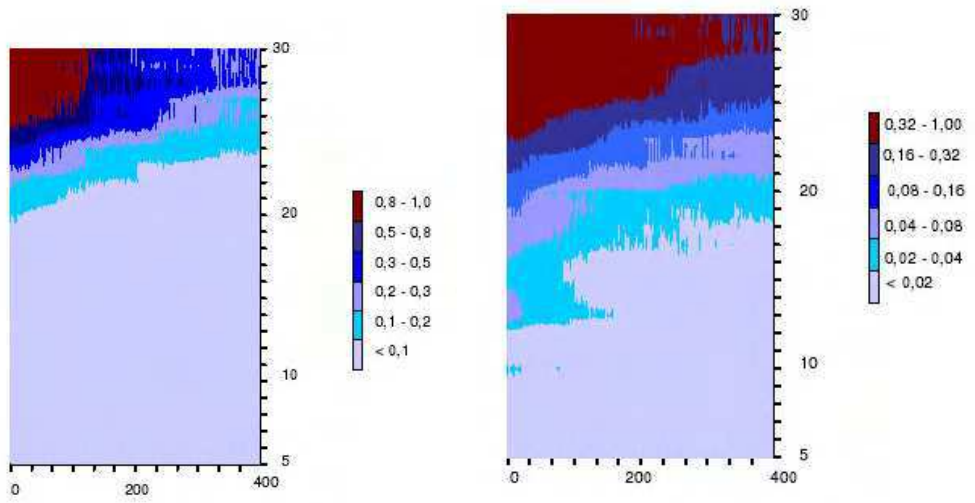
A literatura reporta pelo menos duas tentativas de incluir os avanços da Medicina nas simulações do modelo de tiras de bit: de Oliveira et al. (1999) e Niewczas et al. (2000). Ambos alteram o valor de T, o número de expressões de mutações deletérias que um indivíduo pode sofrer antes de morrer. de Oliveira et al. (1999) ainda incluem mutações somáticas. As curvas de mortalidade são alteradas e algumas alterações mantém o ponto fixo de Azbel. No entanto, em ambas as mudanças na mortalidade são maiores em

idades intermediárias e não perceptíveis em idades menores. O observado é que idades menores costumam ser mais beneficiadas que as mais avançadas, além de ganhos nas idades mais jovens repercutirem na expectativa de vida.

Nossa modificação é simples: a Medicina atua anulando os efeitos letais de certas doenças geneticamente transmitidas. Em intervalos de tempos regulares, uma idade será sorteada e todos os indivíduos que possuírem uma mutação naquela idade, se verão livres dela. Esta modificação não significa que uma mutação genética foi revertida mas, dentro do espírito do modelo, esta mutação não afeta mais a sobrevivência do indivíduo (ou da população)· Assim, avanços ocorrerão em várias idades e em uma taxa maior que a real, pois o objetivo é apenas entender como isto poderia se refletir nas curvas reais de mortalidade. O resultado dinâmico está apresentado na fig. 3.21(a) e 3.21(b), para um período de 400 passos com avanços ocorrendo a cada 10 passos.

Precisamos agora determinar como os parâmetros de Gompertz se comportam com a modificação introduzida e se esta é capaz de reproduzir os comportamentos observados nas curvas experimentais. Fizemos os ajustes lineares do logaritmo das taxas de mortalidade para diferentes instantes da simulação, após ter sido iniciado o processo de cura, obtemos o padrão de correlação SM para a nossa população. Como podemos ver na figura 3.22, surgem curvas, como as que foram apelidadas de "ganchos" por Yashin et al. (2001) .

Os resultados obtidos na simulação indicam que os avanços na área de saúde podem causar uma redução na taxa de mortalidade e interferir no padrão de mortalidade da população, fazendo com que ela saia do seu equilíbrio e aumente a sua longevidade máxima, causando um desvio no padrão de correlação dos parâmetros da curva de Gompertz, como observado em populações reais, principalmente a partir da metade do século XX. Ainda precisamos definir, com clareza, as escalas de tempo envolvidas: a frequência



(a) (b)

Figura 3.21: *Taxa de mortalidade para simulações do efeito da Medicina, introduzindo probabilidade de cura em mutações em intervalos regulares. O eixo vertical representa a idade (de 0 a 32) e as cores representam faixas de mortalidades. O eixo horizontal representa o tempo de simulação. Em a) a escala é linear e em b) é logarítmica. Notem que não há avanços graduais e contínuos mas saltos. Algumas idades podem temporariamente ter mortalidades menores que outras menores, mas o efeito é temporário. As mortalidades são diminuídas consistentemente em idades menores.*

do aparecimento de novas mutações e a frequência com que aparecem os avanços da Medicina. Esta informação poderia ser extraída, observando os resultados como os da fig. 3.22 e comparando com dados reais.

3.8 Bacalhaus, Salmões e Lagostas

Uma das primeiras aplicações do modelo em populações reais, foi a simulação do excesso de pesca do bacalhau do Atlântico Norte (*Gadus morhua*) (Rose, 1993). Em 1992, o Canadian Department of Fisheries and Oceans (CDFO) proibiu a pesca do bacalhau na

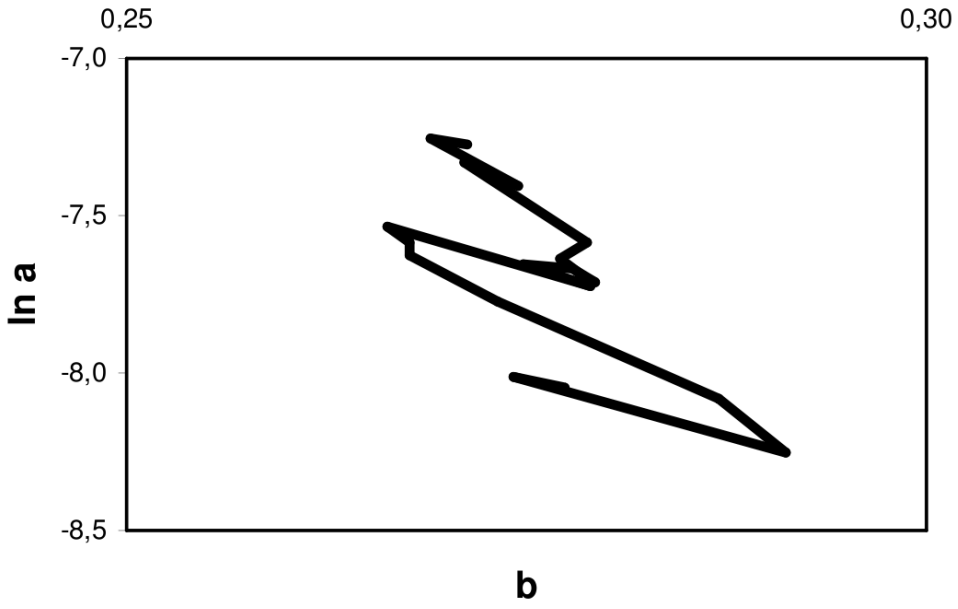


Figura 3.22: *Dinâmica dos parâmetros de Gompertz, utilizando avanços da Medicina, que reduz a mortalidade devido a fatores genéticos. Como o processo de cura se estende por um longo período (400 passos) observamos claramente o desvio no padrão de correlação, formando diversos "ganchos" ao longo de sua trajetória. A curva é propositadamente exagerada, com excesso de "ganchos".*

costa leste canadense. Em 1995, foi reaberta a caça à foca, por esta ser um predador natural do bacalhau. Em 1997, a pesca foi parcialmente reaberta, embora os estoques de bacalhau ainda estivessem baixos: a recuperação foi mais lenta do que se esperava (Hutchings, 2000). Segundo a WWF, se a pesca fosse mantida nos níveis de 2005, os estoques deveriam desaparecer em 15 anos.

Nossa intenção foi testar se um ligeiro aumento na pesca poderia levar à extinção da população. A simulação foi realizada da seguinte maneira: após alguns passos de simulação, a população se estabiliza. A pesca é então introduzida, onde uma fração dos peixes é pescado (ou os indivíduos são retirados da população). Depois de algum tempo, a pesca é ligeiramente aumentada. Os resultados para uma simulação envolvendo centena de milhões de

peixes é mostrada na figura 3.23. O estado final é a extinção da população.

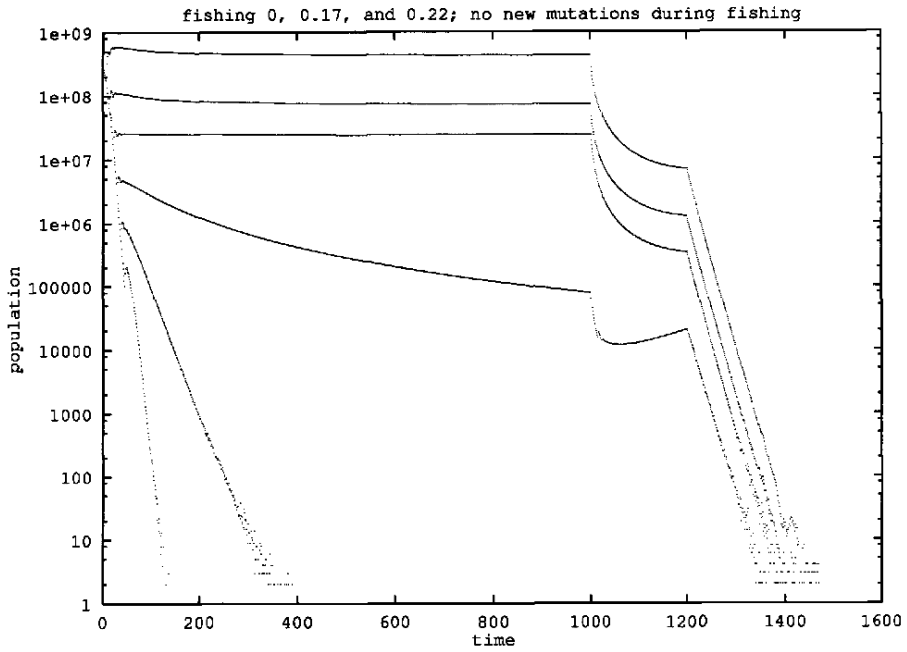


Figura 3.23: *Tamanho da população em função do tempo. Começando com mais de 300 milhões de indivíduos, a pesca é introduzida no tempo 1000 (17%) e aumentada no tempo 1200 (+5%). As curvas, de cima para baixo, representam a população total e as idades de 1,8,16,24 e 32 anos. Nesta simulação, a pesca foi introduzida quando a população estava estável, mas não a distribuição de idades. Extraído de de Oliveira et al. (1995).*

Para os parâmetros da figura 3.23, se introduzirmos a regra de não pescarmos os peixes menores que a idade de reprodução, então a população se estabiliza, ainda que em níveis bastante baixos. Porém podemos ver que a estabilidade da população é frágil e um pequeno aumento pode levar à extinção (de Oliveira et al., 1995).

Uma interessante característica de peixes não foi levada em conta na simulação da pesca do bacalhau: alguns peixes como o esturjão, tartarugas e lagostas, exibem senescência desprezível. Estes envelhecem muito lentamente (tartarugas levam até 50 anos para atingirem a maturidade) e têm uma expectativa de vida bas-

tante elevada - até 200 anos. Árvores chegam a 10.000 anos (há controvérsia pois boa parte da árvore apenas mantém extremidades vivas que se renovam periodicamente. Estas espécies têm a fertilidade crescente com a idade (de Menezes et al., 1996). Assim, se preservarmos os mais velhos, além dos mais jovens, também teremos uma recuperação mais rápida dos estoques.

Para a lagosta verde (*Panurilus laevicauda*, comum no Norte e Nordeste brasileiros, o comprimento $L(x)$ e o peso $P(x)$ crescem com a idade x segundo:

$$\begin{aligned} L(x) &= 38 * (1 - e^{0,171x}) \\ P(x) &= 2,006 * (1 - e^{0,171x})^{2,86} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Nesta simulação (Penna et al., 2001) vamos considerar a fertilidade proporcional ao peso. As curvas que descrevem o crescimento e o peso em função da idade estão mostradas na fig. 3.24.

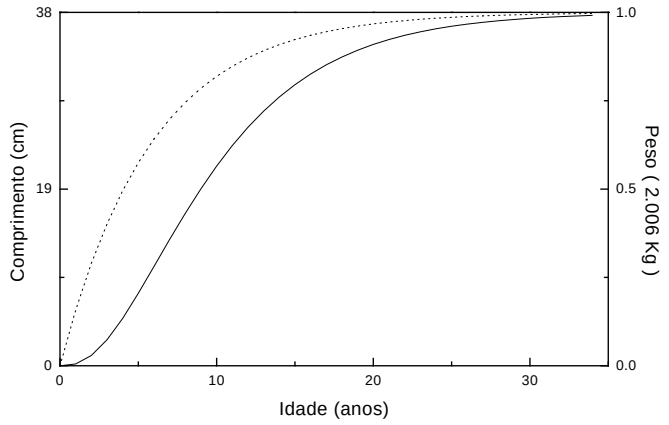
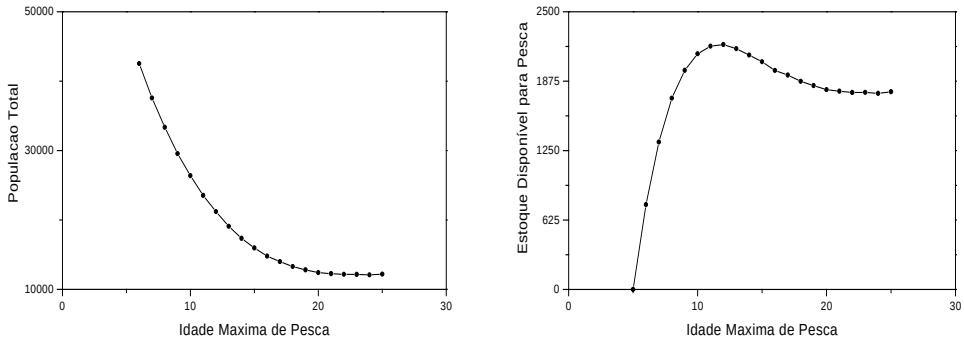


Figura 3.24: *Comprimento da carapaça e o peso da lagosta verde, em função da idade.*

A maturidade da lagosta ocorre por volta dos 17cm, que corresponde a 3,5 anos de idade. Os parâmetros do modelo foram

estimados de tal maneira que a lagosta sobrevivesse até os 34 anos ($T = 3, M = 0.3$ e $b = 0.5$). Após 50.000 passos, introduzimos a pesca, correspondendo a 25% das lagostas entre 6 e uma idade máxima de pesca. Depois de alguns passos, calculamos o estoque disponível para pesca, como mostrado na fig. 3.25(b). O estoque é definido como o peso das lagostas disponíveis para a pesca (consideramos que o interesse é no peso final das lagostas e não no número delas).

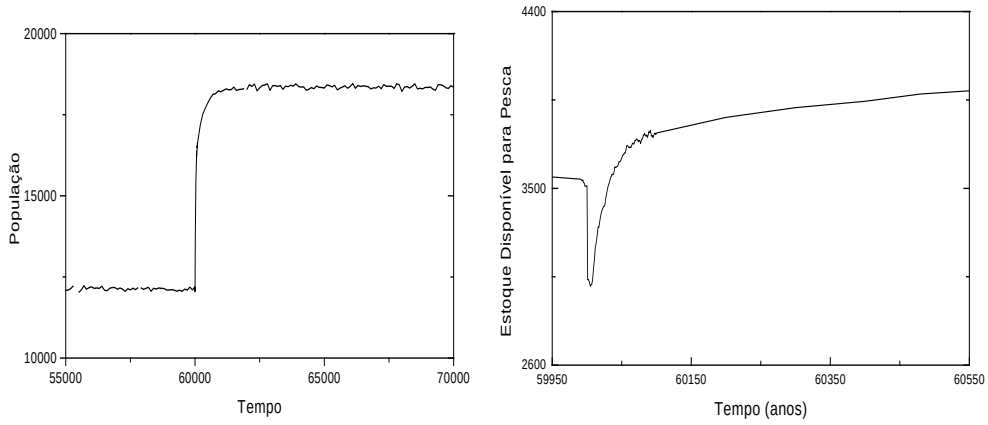


(a) (b)

Figura 3.25: *a) População total b) estoque disponível em função da idade máxima de pesca estabelecida.*

É possível imaginar que exista uma idade ótima para o tamanho máximo da pesca da lagosta. Para demonstrar a efetividade desta medida, mostramos a população de lagostas e o estoque afetado, quando aplicamos a nova regulamentação (figs. 3.26(a) e 3.26(b)).

O aumento do estoque disponível não é a única vantagem da utilização da regra da limitação do tamanho máximo de pesca. As lagostas que conseguem chegar às idades mais avançadas têm, segundo a teoria do acúmulo de mutações, melhor genótipo. A instituição da regra aumenta a longevidade das lagostas de 18 para 24 anos, mesmo com a pesca de 25% delas. Segundo o IBAMA, a pesca da lagosta no Brasil é responsável pela sobrevivência de



(a) (b)

Figura 3.26: *a) População e b) estoque disponível quando é introduzido um limite superior para o tamanho das lagostas pescadas. A população dobra, quase que imediatamente e o estoque logo se recupera e, em pouco tempo, é 15% maior que o anterior, sem a limitação.*

11 mil famílias, e há a exportação de três toneladas de caudas, gerando cerca de 60 milhões de dólares anuais.

Um peixe que tem uma história de vida totalmente diversa dos que apresentamos é o salmão. O salmão reproduz apenas uma vez em toda a sua existência. Quando está no auge da juventude, nada rio acima por até 5000 km, para voltar ao local onde nasceu, reproduz e morre poucos dias depois, servindo de alimento para os descendentes.

A quantidade de corticoesteroides liberados durante a viagem para a reprodução desencadeia uma sucessão de mudanças no salmão, no formato, na cor, etc. em tão pouco tempo que diz-se que este é um exemplo de senescência catastrófica. Outras espécies como o polvo, o rato marsupial e a mosca de maio também são exemplos de animais semélparos, isto é, que reproduzem apenas uma vez. Qualquer teoria evolucionária de envelhecimento tem

que dar conta destas espécies que possuem histórias de vida como esta.

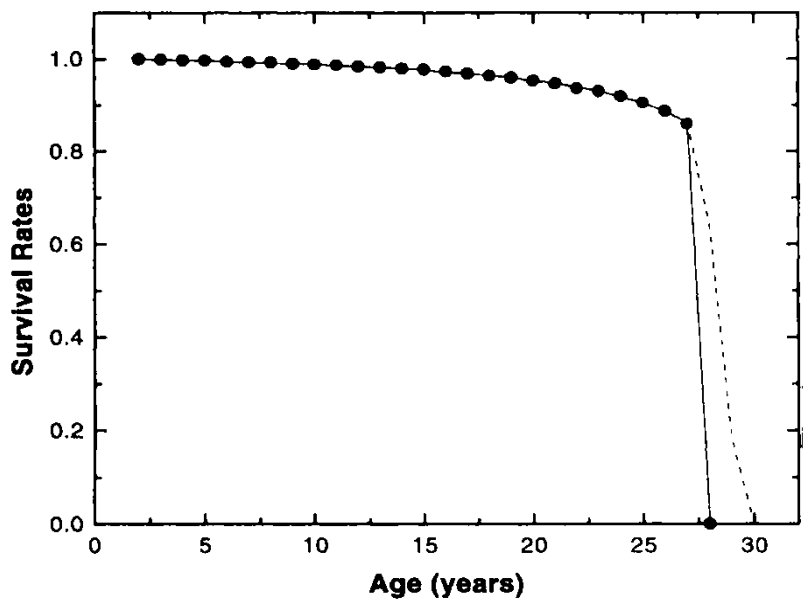


Figura 3.27: *Taxas de sobrevivência em função da idade para uma estratégia de reprodução semélpara (○) e outra iterópara. É evidente a senescência catastrófica (R = 26). Extraído de Penna et al. (1995b).*

Para simular a estratégia do salmão, modificamos (Penna et al., 1995b) o modelo original de maneira que o indivíduo reproduzisse apenas uma vez. O resultado está mostrado na fig. 3.27.

A estratégia acima permite a obtenção da solução exata para a taxa de sobrevivência(Penna and de Oliveira, 1995). Vamos considerar o caso $T = 1$, ou seja, apenas uma mutação é suficiente para matar o indivíduo. Se $M = 1$, então a probabilidade de um filho ter uma mutação deletéria na primeira idade é $1/B$. No equilíbrio o tamanho da população é constante, e o fator logístico também. Vamos considerar V, como o valor do fator logístico. Logo o número de indivíduos na idade 1 é

$$N_1 = N_0 V \left(1 - \frac{1}{B}\right) = N_0 V \left(\frac{B-1}{B}\right) \tag{3.8}$$

Na idade 2,

$$N_2 = N_1 V \left(1 - \frac{1}{B-1}\right) = N_0 V^2 \frac{(B-2)}{B} \tag{3.9}$$

Na uma idade da maturidade R:

$$N_R = N_0 V^R \left(\prod_{i=1}^{R} \frac{B-i}{B-i+1}\right) = N_0 V^R \frac{(B-R)}{B} \tag{3.10}$$

Como cada indivíduo na idade R gera b descendentes, teremos na idade zero:

$$N_0 = bN_R = bN_0 V^R \frac{(B-R)}{B} \tag{3.11}$$

A condição de estacionaridade é

$$bV^R \frac{(B-R)}{B} = 1 \tag{3.12}$$

Para idades $i > R$, nenhuma mutação pode ter aparecido em qualquer dos ascendentes, antes da idade i. Após t passos, esta probabilidade é

$$\left(\frac{B-a}{B}\right)^t \tag{3.13}$$

Como a base é menor que 1, para tempos longos, este termo vai a zero. Portanto não teremos ninguém com idades $i > R$.

Juntando as condições (3.12) e uma semelhante à (3.10) para idades menores que R teremos para a idade $i < R$

$$N_i = N_0 \left(\frac{B}{b(B-R)}\right)^{a/R} \frac{B-a}{B} \tag{3.14}$$

Lembrando que $V = 1 - N_{tot}/N_{max}$, teremos

$$N_{tot} = N_{max} \left[1 - \left(\frac{B}{b(B-R)}\right)^{1/R}\right] \tag{3.15}$$

A condição para evitar a extinção da população é $N_{tot} > 0$ ou

$$b_{min} = \frac{B}{B-R} = \frac{1}{1-R/B} \tag{3.16}$$

onde fica claro, mais uma vez, que o tamanho da tira B é uma escala de tempo. A taxa de sobrevivência na idade i é obtida de (3.14)

$$S_i = \frac{N_{i+1}}{N_i} = \left(\frac{B}{b(B-R)}\right)^{1/R} \frac{B-a-1}{B-a}. \tag{3.17}$$

3.9 Conclusões

Neste capítulo apresentamos um modelo para envelhecimento de populações, que é baseado na teoria do acúmulo de mutações de Medawar. O modelo é capaz de mostrar que a teoria é compatível com a lei de Gompertz, conhecida desde 1825.

Além da reprodução da lei de Gompertz, o modelo reproduz resultados compatíveis com uma teoria fenomenológica, que funciona para populações homogêneas e heterogêneas. O modelo também consegue reproduzir resultados que são atribuídos ao avanço da Medicina nos últimos 60 anos.

Algumas aplicações simples, incluindo a solução exata para um problema interessante em Ecologia: a estratégia de vida do salmão do Pacífico.

Este modelo conta, na data da redação deste texto, com 221 citações. A maior parte delas consiste na utilização do modelo para explicar ou prever situações que ocorrem na Natureza. Não é propósito deste trabalho fazer uma revisão destes resultados, mas apenas apresentar e justificar o uso deste modelo, que começa a ser aceito em revistas de ecologia (de Souza et al., 2009).

4

Análise de Séries Temporais

"Time present and time past
Are both perhaps present in time future,
And time future contained in time past."
T. S. Eliot

4.1 Introdução

Uma série temporal é um conjunto de observações, ordenadas no tempo. Séries temporais são comuns em física, estatística, economia, fisiologia, etc. Os objetivos do estudo de séries temporais são vários:

(a) descrever o comportamento da série (categorização); neste caso procuramos por tendências, comportamento das variações, etc.;

(b) estudar o mecanismo gerador da série, problema comum em física;

(c) fazer previsões dos valores futuros, a curto e longo prazos, como no mercado financeiro;

(d) procurar periodicidades, para entender o comportamento dinâmico (muito comum em séries fisiológicas, por exemplo).

Uma das suposições mais comuns acerca de um série temporal é a sua estacionaridade (Box et al., 1994). Uma série estacionária é aquela em que características estatísticas, como média e variância, por exemplo, não variam no tempo. Podemos estabelecer um critério mais fraco para a estacionaridade, onde exige-se apenas oqie s dois primeiros momentos sejam constantes. Várias ferramentas de análise de séries – principalmente no domínio das frequências – exigem a estacionaridade da série. No entanto, em sistemas reais como os citados acima, as séries são frequentemente não-estacionárias. Algumas não-estacionaridades são tratáveis, como tendências sazonais ou lineares. Filtros simples como médias móveis podem dar conta de algumas destas não estacionaridades. Séries reais podem apresentar diferentes tendências e processos, o que torna o processo de filtragem mais complicado.

Sistemas caóticos são sistemas dinâmicos que apresentam sensibilidade às condições iniciais. O estudo de caracterização de sistemas caóticos é assunto de grande interesse em sistemas dinâmicos, dada a frequência com que estes ocorrem na Natureza. A caracterização de sistemas caóticos é frequentemente realizada através da análise de uma série temporal. Para estes sistemas novos métodos de caracterização foram propostos e até tentativas de predição, a curto prazo, é claro, foram feitas (Farmer et al., 1986).

Neste capítulo vamos apresentar algumas contribuições ao estudo de séries temporais. Os exemplos variam desde aplicações de métodos em sistemas físicos, como a torneira gotejante e materiais magnéticos, fisiológicos, como o controle da pressão arterial em ratos; a descoberta de analogias em sistemas diferentes, como a torneira gotejante e o coração saudável, ou armazenamento de informações em um meio magnético e o DNA; até o desenvolvimento e teste de novos algoritmos, como a retirada de tendências pela transformada de Fourier, e a aplicação destes métodos em sistemas de interesse tecnológico, como os das séries temporais do setor de tratamento de óleo de uma plataforma petrolífera e dos

mecanismos de localização de robôs autônomos.

4.2 A torneira gotejante e o coração saudável

Shaw (1984) foi o primeiro a propor a torneira gotejante como um exemplo de sistema caótico. Na primeira versão do experimento, Shaw mediu o intervalo de tempo entre gotas sucessivas que caíam em um prato de alumínio, usando um microfone para gravar os sons. Os atratores encontrados foram comparados com um modelo simples, tipo massa-mola (Martien et al., 1985), com equações dadas por

$$\frac{d}{dt}\left(m\frac{dy}{dt}\right) = mg - ky - b\frac{dy}{dt} \tag{4.1}$$

onde m é a massa da gota, e y é a posição vertical do centro de massa. g, k e b são constantes. A massa depende linearmente do tempo, representando o fluxo, e a gota é quebrada quando atinge um valor crítico.

Embora não fizesse estudo sistemático das diversas condições que levassem ao caos e, principalmente, pelas dificuldades do experimento, Robert Shaw esperava uma rota do tipo duplicação de período para o sistema, o que parecia ser confirmado pelo modelo massa-mola. Nesta rota, o sistema vai ao caos, através de bifurcações, como as que aparecem na 4.1(a). Uma versão simplificada do experimento está mostrada na 4.1(b).

Posteriormente o experimento foi repetido (Yépez et al., 1989) utilizando lasers e fototransistores para a detecção dos intervalos, com os dados sendo enviados diretamente para a porta paralela de um microcomputador. Com frequências de até 100kHz, uma riqueza muito maior de comportamentos foi observada, incluindo períodos três e cinco, descartando a rota das bifurcações.

Em 1994, Sartorelli et al. (1994), da USP, repetiram o experi-

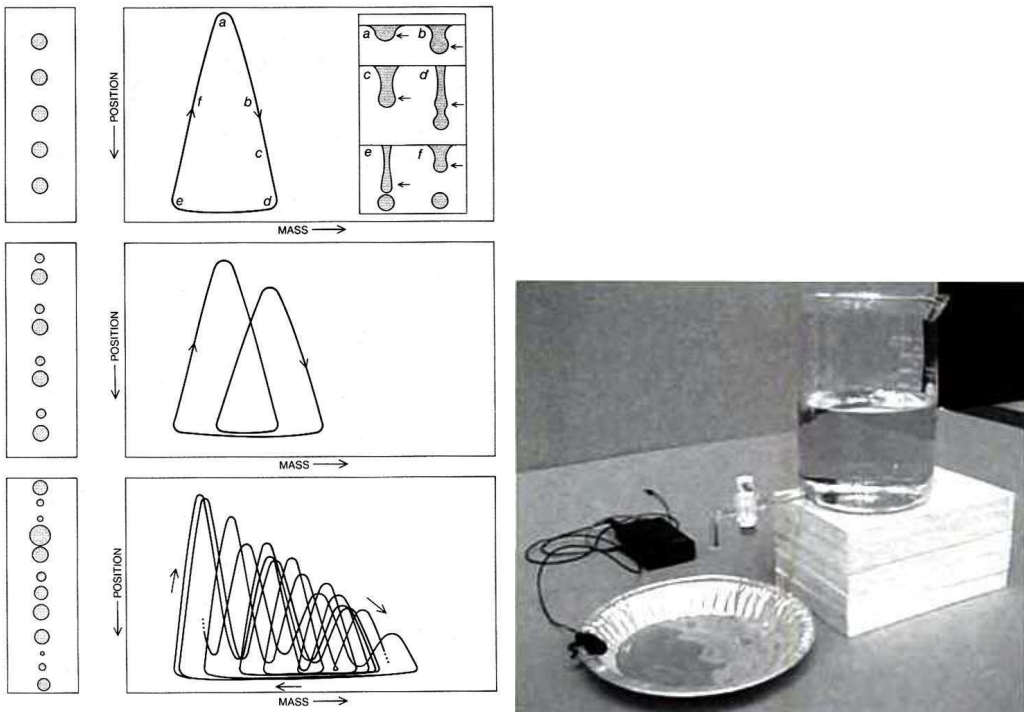


Figura 4.1: *(a) Comportamento caótica da torneira gotejante, de Shaw. À medida que o fluxo aumenta as gotas passam de um comportamento periódico para um comportamento caótico. (b) Arranjo experimental da primeira experiência.*

mento encontrando crise e intermitência na torneira gotejante. O experimento era mais elaborado que os anteriores, incluindo o uso de água destilada, recipientes maiores para o líquido e sistema de amortecimento. As experiências foram realizadas de madrugada, no IFUSP, já que o movimento das pessoas faziam vibrar a torneira (na realidade, uma pipeta) adicionando ruído aos dados experimentais. O laboratório de Física Não Linear do IFUSP publicou quinze artigos sobre caos na torneira gotejante, de 1994 até 2002, incluindo a "catástrofe do céu azul", com o desaparecimento do atrator caótico, dependendo do fluxo (Pinto and Sartorelli, 2000).

Manna et al. (1992) propuseram um modelo estocástico para a simulação de uma gota, sujeita à gravidade, em uma parede (Poz-

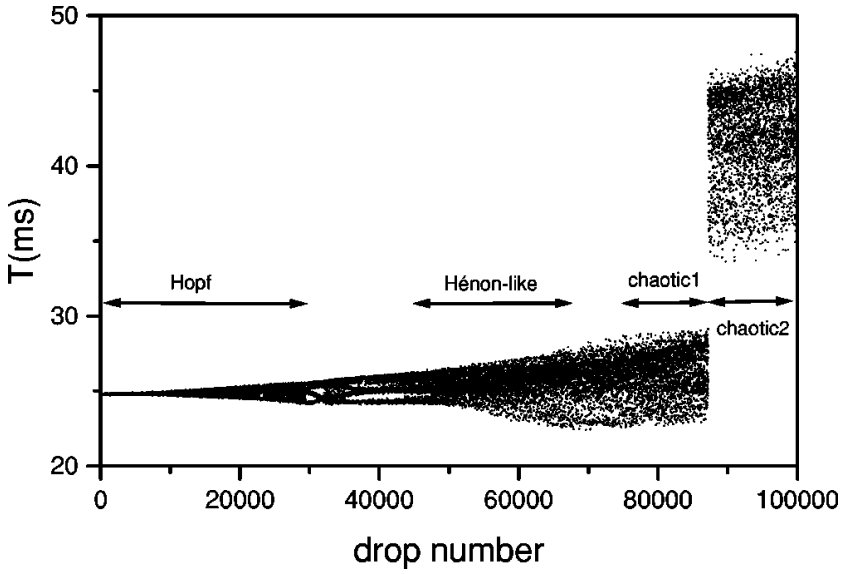


Figura 4.2: *Diagrama de bifurcações obtido deixando o nível de um reservatório de 50 l baixar naturalmente. Foram obtidas 100.000 gotas neste experimento. Extraído de (Pinto and Sartorelli, 2000).*

rikidis, 1990), veja fig. 4.3. Eles encontraram uma transição entre suspensão e escorregamento e foram capazes de caracterizar a transição através dos expoentes críticos. A simulação é baseada no modelo de Ising (Ising, 1925) para o ferromagnetismo.

Na simulação de (Manna et al., 1992), partimos de uma rede quadrada, onde cada sítio da rede contém uma variável que pode assumir os valores 0 ou 1, equivalendo no caso do modelo de Ising aos spins $\pm 1/2$. Os valores 0,1 representam o ar e o fluido, respectivamente. A configuração inicial é um grupo de spins 1, colado à uma das paredes da rede quadrada, ver fig. 4.4. A dinâmica é a chamada dinâmica de Kawasaki, que conserva massa: são sorteados um spin da fronteira interna (fluido) e outro da fronteira externa (ar). Eles são tentativamente trocados. É definida a energia do sistema como

$$H = -J \sum_{nnn} S_i S_j + \sum_{i=1}^{N} h_i S_i \tag{4.2}$$

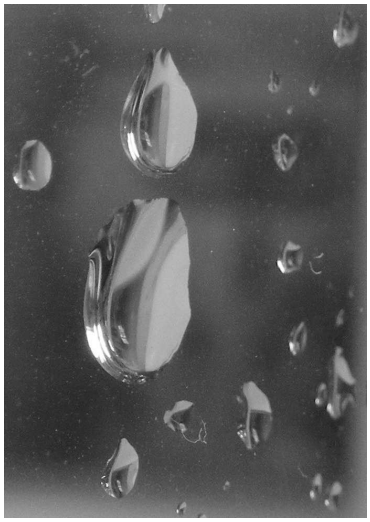


Figura 4.3: *Gotas no vidro. A gota escorre dependendo do ângulo de contato com a superfície, que por sua vez depende da viscosidade do líquido, do coeficiente de atrito líquido-superfície e da condição inicial.*

onde o primeiro somatório é sobre primeiros e segundos vizinhos (na diagonal), S_i representa o estado da variável no sítio i (0,1 ou ar, fluido); h_i representa a altura do sítio, contando a partir da linha mais baixa da rede e J dá conta da atração entre as moléculas de mesmo tipo. Portanto, o segundo somatório dá conta do campo gravitacional e o primeiro das forças atrativas e da tensão superficial (o estado de menor energia corresponde à situação do líquido coeso). Se a nova configuração (com os spins permutados) possui energia menor que a anterior, então a troca é aceita.

Nossa primeira contribuição consistiu em adaptar o modelo para reproduzir a torneira gotejante (de Oliveira and Penna, 1993, 1994). As modificações são simples: para simular a torneira, a coluna que antes representava a parede, no modelo de Manna, passa a ser uma linha de tamanho definido, representando a largura da torneira e a adição de uma linha de spins a cada número de possíveis trocas. O fluxo seria representado então pela adição destas linhas: se novos pontos de fluido fossem adicionados antes que a gota atin-

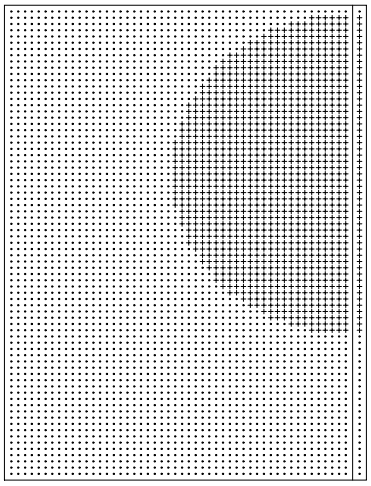


Figura 4.4: *Configuração inicial para o problema da gota na parede. O fluido é representado por +. A coluna mais à direita representa a parede e não é atualizada na dinâmica.*

gisse o estado de equilíbrio, então o fluxo deveria ser alto. O fluxo é adicionado e relaxações são realizadas até que alguma parte da gota esteja desconectada da gota principal, como na fig. 4.5.

Para verificar a validade do modelo, fizemos diversos estudos (de Lima et al., 1997) comparando nossos resultados com alguns resultados experimentais do laboratório de fenômenos não-lineares do grupo do prof. Sartorelli, conforme mostrado na fig. 4.6. A semelhança entre os resultados é notável. Para estes experimentos, além da montagem com laser e fototransistores, foi utilizada uma câmera de alta velocidade para a obtenção dos parâmetros geométricos das gotas.

Um dado curioso sobre nossas simulações: enquanto as simulações citadas no capítulo anterior são muito mais rápidas que os efeitos da evolução e seleção natural em populações, as simulações da torneira gotejante, mesmo usando um modelo extremamente simplificado são muito mais lentas que a obtenção de dados experimentais – considerando, é claro, o experimento já montado. Enquanto gotas reais são tridimensionais, embora geralmente simétricas em relação a um eixo vertical, e vibram, nossas gotas são

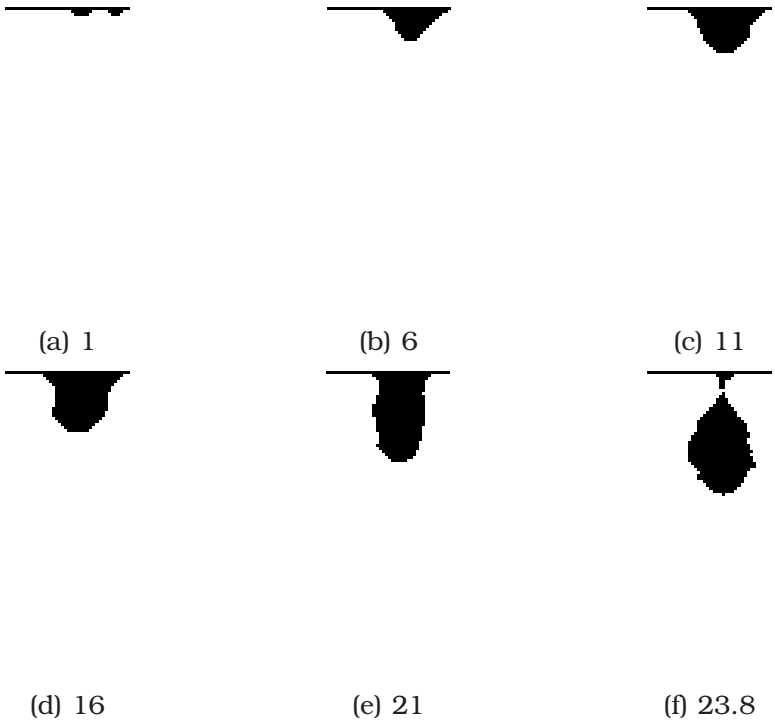


Figura 4.5: *Diversos estágios de formação de uma gota segundo o modelo de de Oliveira and Penna (1993). A parte inteira dos tempos se refere ao número de injeções efetuadas. A parte fracionária corresponde à fração de atualizações em que ocorreu a ruptura da gota.*

bidimensionais e rugosas. No entanto, ainda há utilidade para este tipo de modelo: até então se atribuía o comportamento caótico das gotas ao movimento vibracional das mesmas. O modelo simplificado mostra que mesmo sistemas mais simples, sem incluir graus de liberdade vibracionais, podem apresentar comportamento complexo. O que determina o período da próxima gota é a condição inicial de formação da mesma que é, por sua vez, determinada pelas gotas anteriores.

Variações deste modelo já foram usadas para estudar multifragmentação nuclear (de Oliveira et al., 1997) e processos de amassamento (Mota and de Oliveira, 2008). O sistema da torneira gotejante também serve de inspiração para sistemas superconduto-

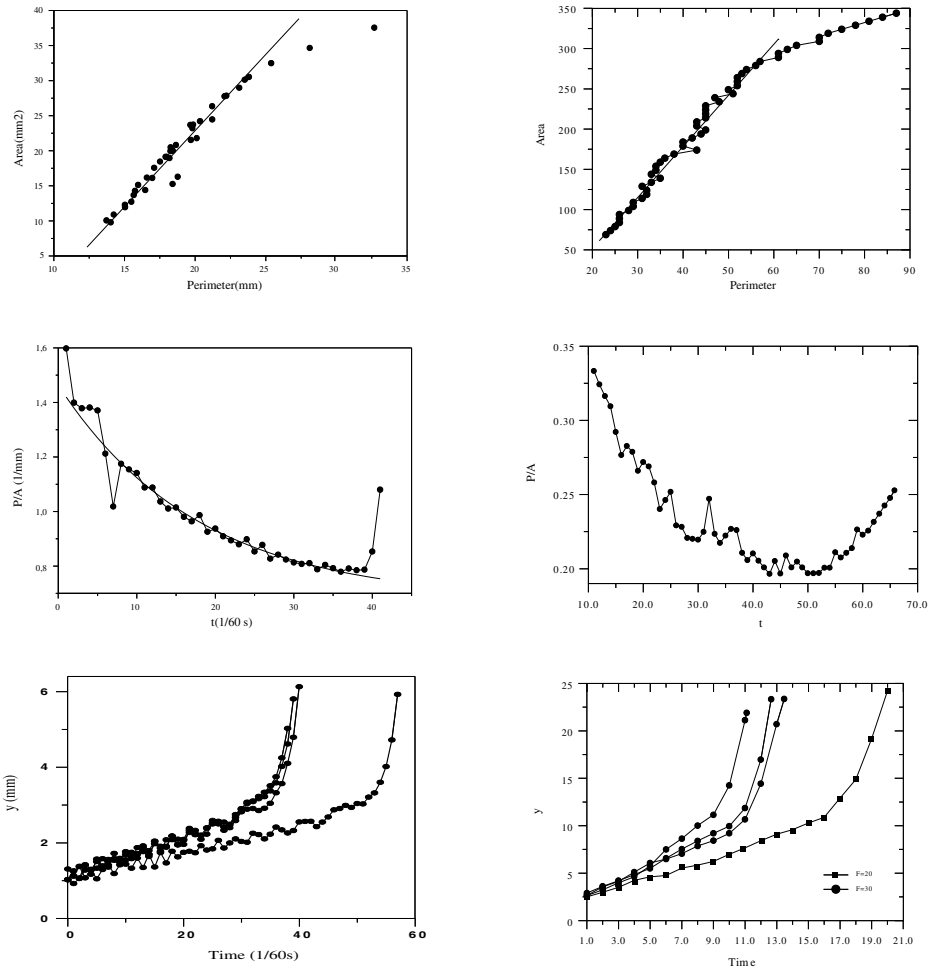


Figura 4.6: *Comparação entre gotas de torneiras reais (esquerda) e o modelo simples bidimensional (direita). Os resultados são para área em função do perímetro, razão perímetro/área e altura do centro de massa em função do tempo, para diversos fluxos.*

res (Field and Stan, 2008), além de interesse tecnológico, como no caso das impressoras jato-de-tinta (Shi et al., 1994), veja na fig. 4.7.

Para analisar o efeito de memória na sequência de gotas, decidimos analisar as flutuações nos incrementos dos intervalos entre gotas sucessivas (Penna et al., 1995a), ver fig. 4.8.

Figura 4.7: *Formação de cascata em uma torneira gotejante em que o líquido é mais viscoso que a água. O estudo dos pontos de quebra é de interesse tecnológico, como na fabricação de impressoras jato-de-tinta.*

A ideia de se estudar as flutuações como indicativo de um processo com memória vem dos resultados do caminhante aleatório. Processos markovianos seguem a lei de Einstein do movimento browniano. Para estes, a flutuação média, definida como:

$$F(n) = \overline{\left|B(n'+n) - B(n')\right|} \tag{4.3}$$

onde a barra significa média sobre todos os valores de n', deve crescer como

$$F(n) \propto n^{\alpha} \tag{4.4}$$

com $\alpha = 0.5$.

Para remover efeitos de não-estacionaridades das séries utilizamos a técnica do DFA (Peng et al., 1994), ou "detrended fluctuation analysis". A técnica consiste em remover as tendências em janelas de tamanho diferente. O expoente da flutuação, para as séries integradas e com as tendências removidas, segue uma lei com a eq.

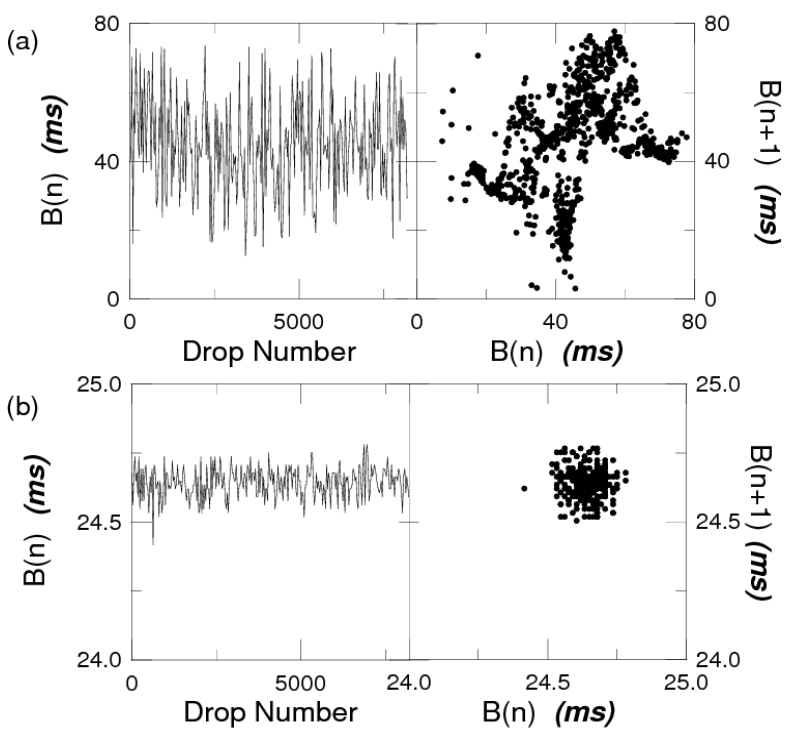


Figura 4.8: *Mapas de retorno para os intervalos de tempo entre gotas sucessivas $B(n)$. Estas são séries experimentais para fluxo médio igual a 25 gotas/s (acima) e 40 gotas/s (abaixo). Extraído de Penna et al. (1995a).*

(4.4).

Nós realizamos o cálculo (4.3) para 54 séries experimentais e simuladas e encontramos $\alpha \in [-0.08, 0.09]$ para todos os fluxos e todos os tamanhos de torneira. Este resultado robusto mostra que a série dos intervalos tem memória e que a dinâmica apresenta anticorrelação, isto é, a tendência dos próximos movimentos é contrária ao que ocorreu recentemente. É uma situação típica onde mecanismos de controle atuam.

O mais interessante é que este comportamento anticorrelacionado já havia sido reportado na literatura para séries de batidas dos corações de pacientes saudáveis (Peng et al., 1993). Por outro lado, pacientes com miocardiopatia dilatada apresentam $\alpha = 0.5$.

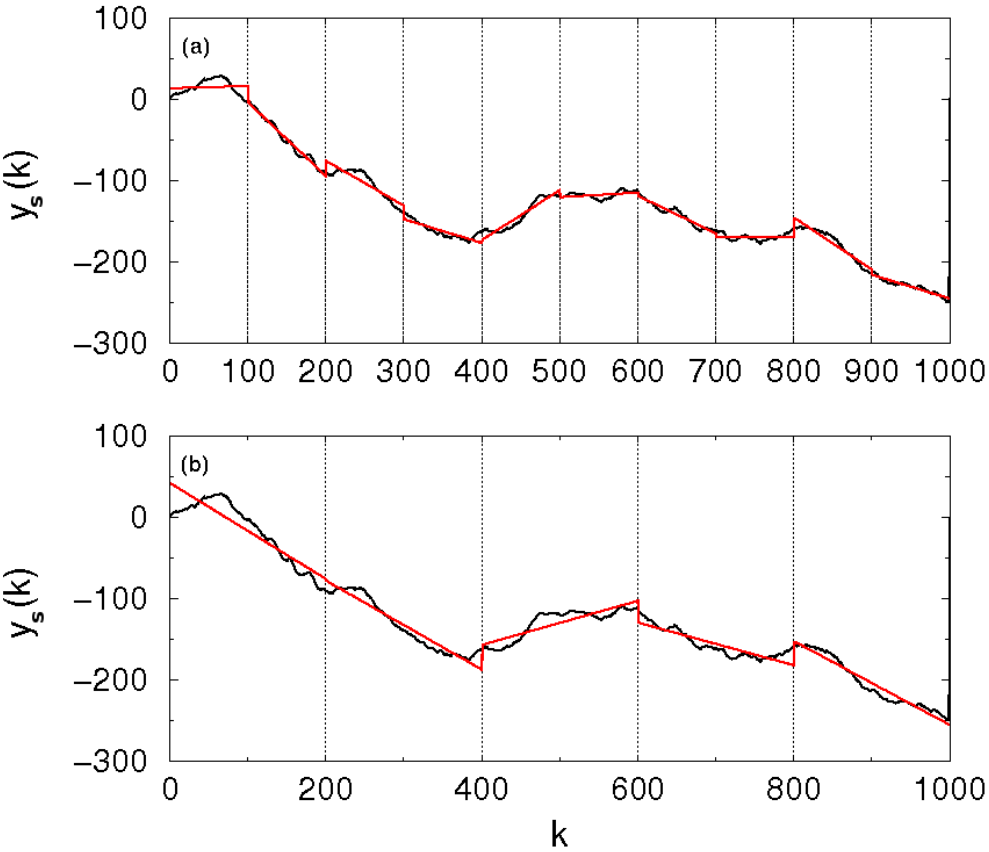


Figura 4.9: *DFA: a série a ser analisada é integrada gerando a série $y_s(k)$. A série é dividida em janelas de tamanho variável l. Dentro de cada janela é ajustada uma reta correspondendo à tendência naquela janela. A flutuação é calculada segundo a eq. (4.3) mas a partir da série integrada menos a tendência em cada janela. O procedimento é repetido para janelas de tamanhos diferentes. O expoente α é definido como $F(l) \propto l^{\alpha}$. As figuras representam a série original, as janelas e em vermelho as tendências ajustadas em cada uma delas, para dois tamanhos de janelas diferentes.*

Peng et al. (1993) sugeriram que o comportamento anticorrelacionado do coração poderia ter uma origem evolutiva: mesmo em repouso o coração alterna batidas longas com batidas curtas. Isto favoreceria a adaptação em situações de risco e esforço (frequência cardíaca mais alta) ou de privações (frequências cardíaca mais baixa). É óbvio que esta ideia não deve ser aplicadas às torneiras

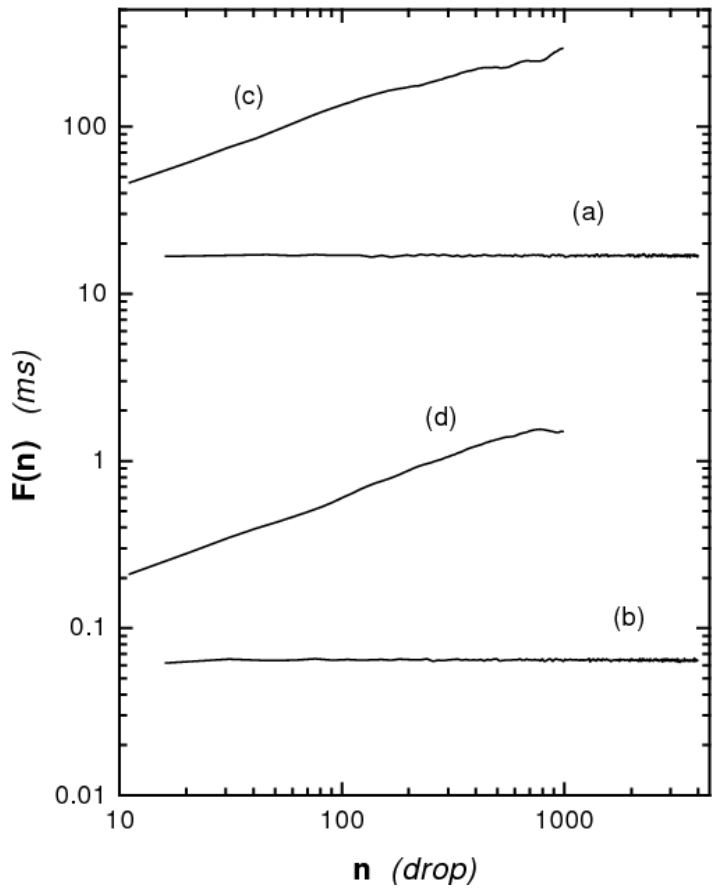


Figura 4.10: *Flutuação média dos intervalos contra a distância entre gotas. (a) e (b) correspondem aos casos mostrados na 4.8, enquanto (c) e (d) são as séries embaralhadas.*

gotejantes, mas algo mais básico deve estar por trás destas similaridades. Em ambos os processos existem duas escalas de tempo diferentes: uma lenta que corresponde à carga e uma rápida, correspondendo à descarga, que no caso da gota, corresponde à vida curta da gota, a partir do momento que o "pescoço" é formado, como mostrado nas figs. 4.5 e . 4.6.

Não só o coração saudável e as torneiras gotejantes apresentam anticorrelações em suas séries temporais. Bonabeau et al. (1998) realizam um experimento semelhante utilizando formigas famintas onde o alimento se encontrava na ponta de um arame suspenso. O

aglomerado de formigas formavam gotas que também "pingavam". Os resultados para α foram os mesmos obtidos para a torneira gotejante e o coração saudável.

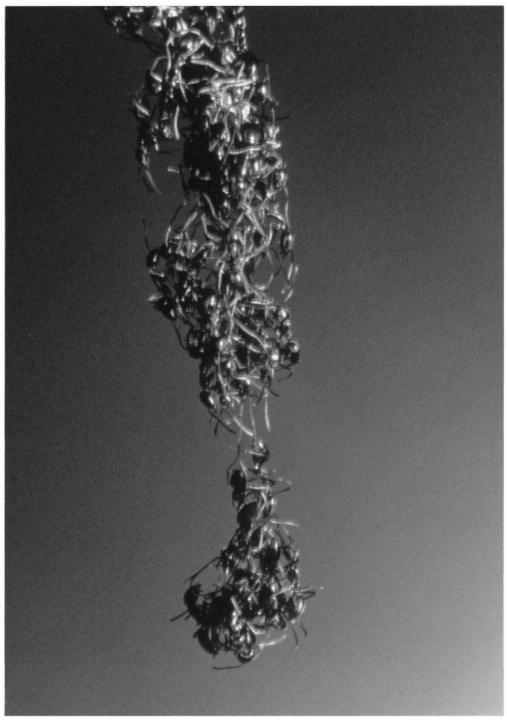


Figura 4.11: *"Gotas de formigas" que se formam na extremidade de um pedaço de fio, onde se encontra alimento. As formigas ficaram um tempo sem serem alimentadas. As gotas de formigas pingam sucessivamente e apresentam o mesmo expoente da torneira gotejante.*

As semelhanças entre a torneira gotejante, o coração saudável e aglomeração de formigas não se resumem ao mesmo expoente α para flutuações. Os três sistemas também estão relacionados através das distribuições de Lévy. Distribuições de Lévy aparecem no problema do movimento browniano quando calculamos o tempo de primeira passagem por um ponto diferente da origem. Também são comuns em processos de forrageamento, isto é, quando animais procuram por comida. Processos de Lévy foram visto em Drosophilas (Reynolds and Frye, 2007) e, mais recentemente, em

abelhas (Reynolds et al., 2007). Existe também uma relação entre as distribuições de Lévy e a estatística generalizada de Tsallis (Tsallis, 1988; Tsallis et al., 1995). O fato dos sistemas serem descritos por distribuições de Lévy não está ligado diretamente ao fato de termos encontrado $\alpha = 0$. O expoente das flutuações é obtido de uma série temporal, mantido o ordenamento dos dados, já a distribuição de Lévy é a distribuição de possíveis valores das séries e, portanto, não depende da ordem em que os valores aparecem.

O problema da torneira gotejante é de interesse da área de sistemas dinâmicos, pois ao mesmo tempo apresenta uma riquíssima variedade de fenômenos típicos de sistemas caóticos, como efeitos de memória ou correlações de longo alcance. Além disto apresenta anticorrelações como um sistema fisiológico tão complexo e importante quanto o coração. Mesmo sistemas agregados, cujo comportamento coletivo é difícil de inferir, como grupos de formigas apresentam este comportamento. Além disto, a determinação dos pontos de quebra das gotas é de grande interesse tecnológico, para a permitir a fabricação de impressoras jato-de-tinta econômicas e de grande resolução.

4.3 Mecanismos de controle da pressão sanguínea

Na seção anterior, mostramos alguns sistemas cuja a dinâmica é determinada por fenômenos que agem em escalas de tempo diferentes e que competem: seja a tensão superficial e a gravidade nas gotas e nas formigas, ou os sistemas simpático e parassimpático no caso do coração. As similaridades entre estes sistemas puderam ser comprovadas através da análise das série temporais dos eventos. Nesta seção vamos apresentar nosso trabalho mais recente (Galhardo et al., 2009), em que aplicamos algumas das definições apresentadas anteriormente e outras interpretações alter-

nativas para um sistema de grande interesse: o controle da pressão sanguínea. Este trabalho é o primeiro de uma colaboração com o Instituto Biomédico da Universidade Federal Fluminense, na área de Fisiologia do Esforço. Como discutiremos no final desta seção, a colaboração já desencadeou interesses além da análise de dados experimentais.

O processo chamado de homeostase (Guyton and Hall, 2000) refere-se à capacidade de um organismo manter as condições de seu ambiente interno quase constantes, perto das condições ótimas. Isto é realizado por uma série de mecanismos de controle retroalimentados. Por exemplo, o ramo simpático do sistema nervoso autônomo, prepara nosso corpo para situações de estresse através, por exemplo, do aumento da taxa de batimentos cardíacos, aumento da pressão arterial, concentração de açúcar no sangue, aumento de adrenalina, etc. enquanto o parassimpático é responsável pelo controle nas situações de calma, como dormir, por exemplo, ver fig. 4.12.

Existem muitos exemplos de sistemas de controle no corpo, como as hemácias que controlam a concentração de O_2 e o sistema respiratório controlando a concentração de CO_2. O principal mecanismo de controle da pressão arterial é o barorreflexo. O mecanismo é de um laço negativo de retroalimentação ("negative feedback loop"), isto é, reage ao aumento de pressão no sentido de diminuí-la e vice-versa. O barorreflexo depende dos barorreceptores, que são neurônios especializados localizados no seio carotídeo e enviam os sinais de controle da pressão para a medula, mais especificamente no núcleo do trato solitário (NTS), ver fig. 4.13.

Uma das ferramentas mais utilizadas para estudos do barorreflexo é a análise das séries de pressão e batimentos no domínio das frequências, isto é, através da análise do espectro de potências. Enquanto esta técnica pode oferecer informações sobre as escalas de tempo envolvidas, a forte não-estacionaridade dos sinais é um complicador para análise mais rigorosas. Para isto vamos utilizar

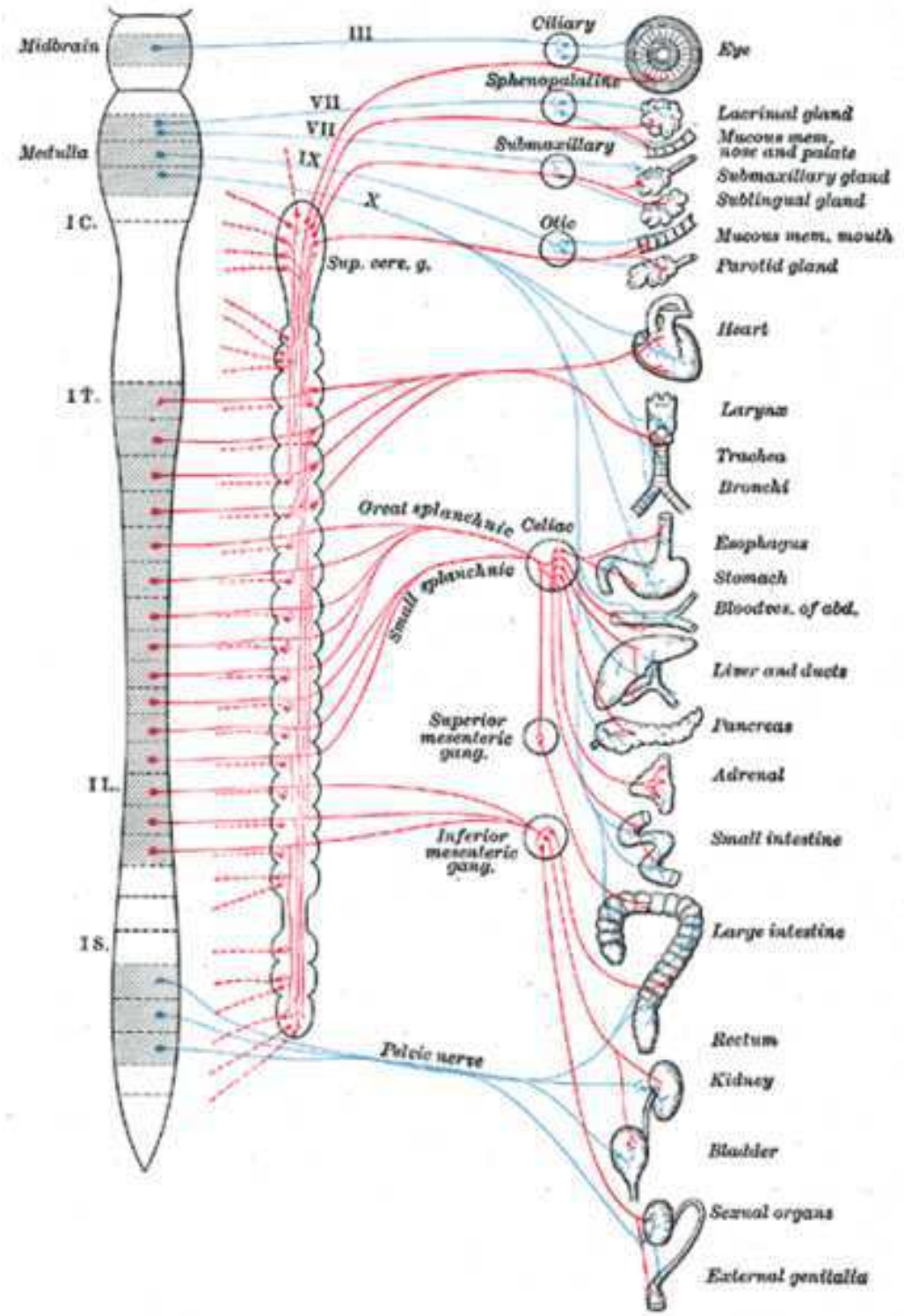


Figura 4.12: *Enervação do sistema nervoso autônomo mostrando o sistema nervoso simpático (vermelho) e o parassimpático (azul).*

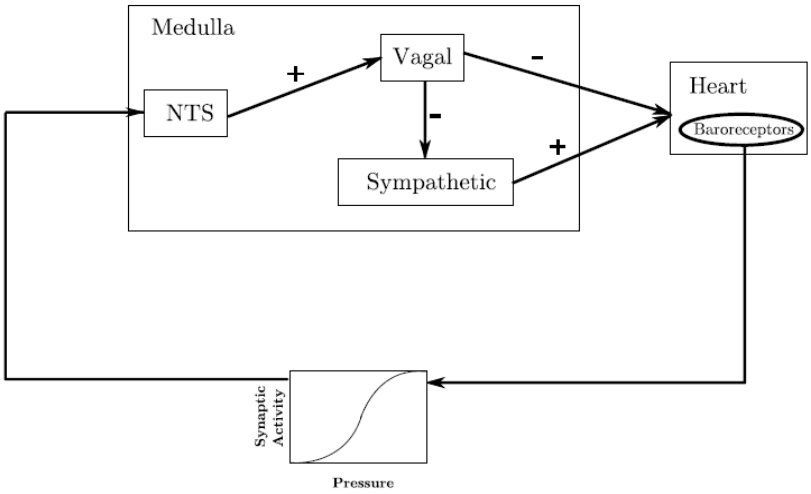


Figura 4.13: *Esquema do laço negativo de retroalimentação responsável pelo controle da pressão arterial, o barorreflexo. Estímulos dos neurônios aferentes excitam o parassimpático ("vagal"), que tende a diminuir a taxa de batimentos. O sistema simpático tende a aumentar os batimentos, mas é inibido pelo parassimpático, levando à queda de pressão.*

a técnica da análise de flutuações sem tendências, ou DFA "detrended fluctuaction analysis", proposta por Peng et al. (1994). A técnica é das mais usadas, junto com "wavelets", na caracterização de processos não-estacionários. Em particular, vamos analisar as séries de pressão sistólica de ratos, isto é, nos picos das séries de pressão, ao invés dos vales (pressão diastólica).

O procedimento para a aplicação do DFA foi o seguinte: a partir dos dados de pressão $P(t)$, criamos a série integrada y:

$$y(t) = \sum_{k=1}^{t} \left(P(k) - \bar{P}\right) \tag{4.5}$$

onde $\bar{P}$ é a média da pressão no intervalo. A série integrada é dividida em caixas de tamanho n e , para cada caixa é subtraído um polinômio de grau l, ajustado por mínimos quadrados (este método é conhecido por DFA-l). Dentro de cada caixa, calculamos

a flutuação como em (4.3). A partir dos valores de $F(n)$, calculamos o expoente α, como em (4.4).

Para $0 < \alpha < 1/2$, o sinal é estacionário e com anticorrelações de longo alcance. Para $\alpha = 1/2$, o sinal é "ruído branco" (e $\alpha = 3/2$ é sua integral, o movimento Browniano). Para $1/2 < \alpha < 1$ temos correlações de longo alcance; $\alpha = 1$ corresponde ao ruído $1/f$. Valores de $\alpha > 1$ correspondem a não-estacionaridades, sendo $\alpha < (>)3/2$ correspondendo aos casos sub- (super-)difusivos.

Os ratos foram divididos em três grupos: o grupo controle, e dois grupos que sofrerão uma desnervação sino-aórtica, isto é, a ruptura das fibras nervosas que conectam os barorreceptores à medula. Um grupo, chamado "agudo", correspondendo aos ratos com até um dia da experiência da desnervação e outro "crônico", com ratos que sobreviveram 20 dias após a desnervação. As séries de pressão para indivíduos dos três grupos são mostradas na fig. 4.14.

Os resultados da aplicação do DFA nas séries temporais apresentaram resultados interessantes: para os grupo controle e crônico, não existe apenas um expoente α, mas dois. Existe uma região de mudança de comportamento ("crossover"), que é a mesma para todos os ratos testados, em que o expoente α muda de um valor correspondente a um processo não estacionário (em curtas escalas de tempo) para o valor $\alpha = 1$, equivalente ao do ruído $1/f$. O crossover não aparece nas séries dos ratos com desnervação aguda. Outro fato relevante é que a posição do crossover muda dos ratos controle para os ratos com desnervação crônica. O crossover dos ratos com desnervação crônica é localizado em intervalos maiores que os dos ratos controle. Isto pode indicar que o processo que agora regula a pressão é mais lento que no caso controle, embora o expoente α seja o mesmo depois do crossover.

Os resultados da aplicação do DFA nos três grupos estão resumidos na figura 4.16. Os valores obtidos foram: para o grupo controle, 116.55 ± 10.15 mmHg para a pressão sistólica média e

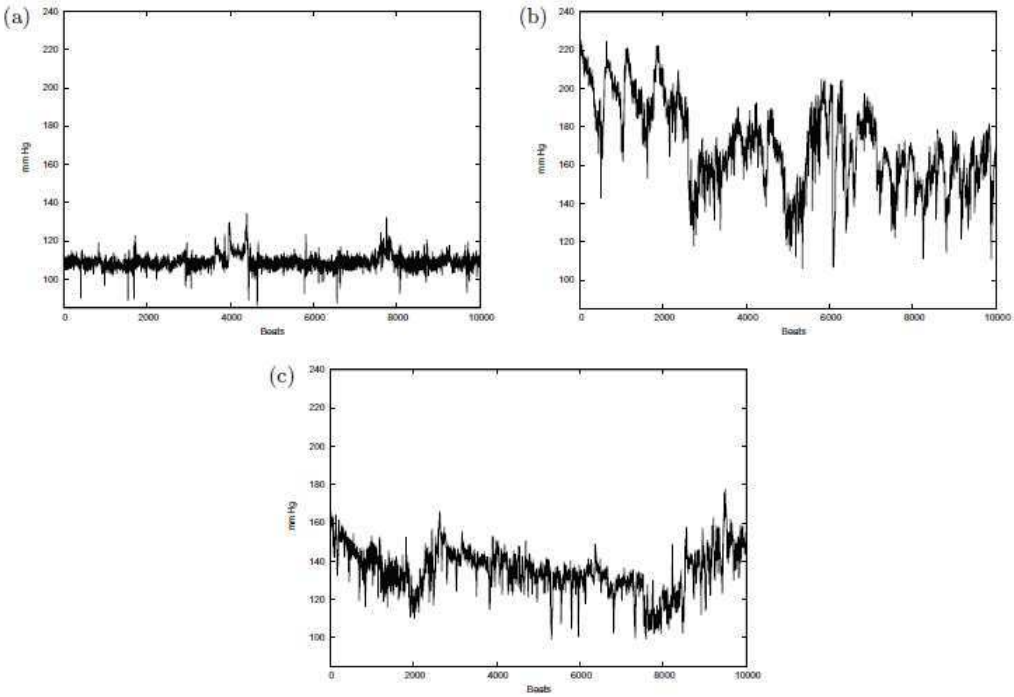


Figura 4.14: *Séries de pressão arterial para ratos do (a) grupo controle; (b) grupo agudo e (c) grupo crônico (20 dias depois da desnervação). A série aguda é altamente não estacionária. As médias da pressão para os diversos grupos são (a)* 116.55 ± 10.15*mmHg, (b)* 178.31 ± 31.15 *mmHg e (c)* 129.95 ± 9.32 *mmHg.*

$\alpha = 0.96 \pm 0.05$ para o expoente da flutuação. Para o grupo crítico, a pressão foi bem superior 178.31 ± 31.15 mmHg e $\alpha = 1.23 \pm 0.09$, caracterizando o comportamento não estacionário. O grupo crônico apresentou os valores 129.95 ± 9.32 mmHg para a pressão e $\alpha = 1.03 \pm 0.05$, estatisticamente equivalentes ao grupo controle.

A presença do crossover em sinais fisiológicos patológicos já havia sido reportada na análise de flutuações por DFA dos níveis de glicose em humanos saudáveis e em pacientes com diabetes melittus (Ogata et al., 2006) e também na perda da capacidade de adaptação de curta duração em pacientes com enxaquecas(Latka et al., 2004). Um modelo simples, apresentado em Galhardo et al. (2009), pode ajudar na compreensão destes resultados. Podemos modelar a competição no NTS por duas sigmoides, correspondendo

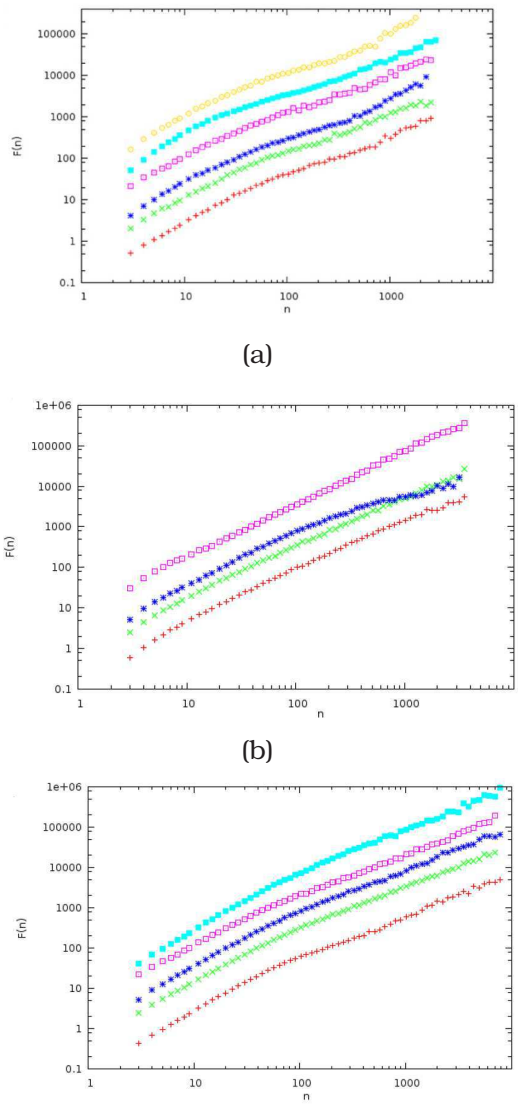


Figura 4.15: *Resultados de DFA para vários ratos do grupo controle, agudo e crônico. Existe uma mudança de comportamento, por volta de* $n \approx 35$ *para os ratos controles: a série é não estacionária para valores menores que estes.A mudança de comportamento não aparece no grupo agudo (b) e voltam a aparecer no grupo crônico (c), embora em uma posição mais avançada (*$n \approx 100$*). Os expoentes* α *serão considerados como sendo os para maiores distâncias, isto é, além do crossover quando for o caso.*

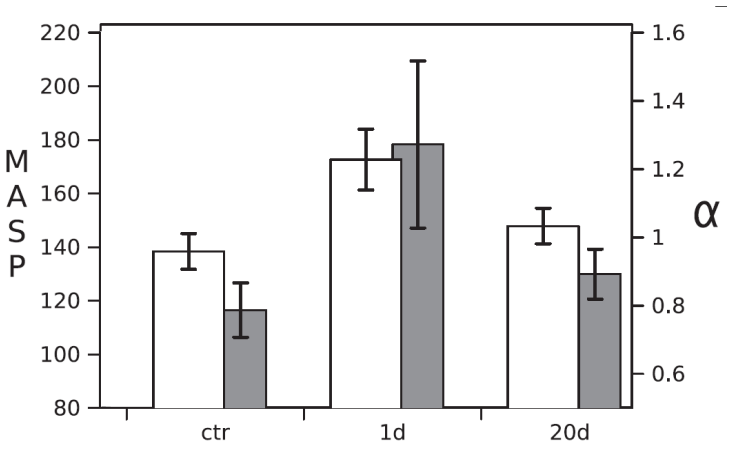


Figura 4.16: *Resultados para a pressão sistólica média MASP e o expoente α das flutuações para o grupo controle (ctr), agudo (1d) e crônico (20d). Os valores para os grupos crônico e controle são estatisticamente os mesmos. O grupo agudo apresenta não-estacionaridades* ($\alpha = 1.23 \pm 0.09$)*.*

às "forças" simpática f_s e parassimpática ou vagal f_v, ver fig. 4.17.

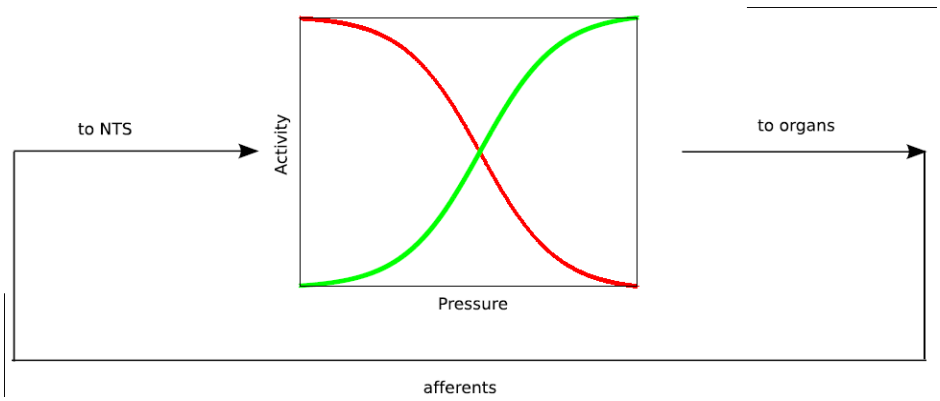


Figura 4.17: *Para modelar o controle da pressão arterial, vamos considerar um modelo de movimento Browniano, dirigido pelas forças f_s (em vermelho) e f_v (em verde). O equilíbrio (homeostase) é atingido para $f_v = f_s$.*

A pressão será dada por

$$p(t+1) = p(t) + (f_s(p + \xi(t)) - f_v(p + \xi(t))) \tag{4.6}$$

onde $\xi(t)$ representa o ruído integrado no NTS. $f_{s,v}$ serão modeladas por sigmoides com diferentes limites $thr_{s,v}$:

$$f_{s,v} = A_{s,v} \pm \frac{1}{B_{s,v} + e^{-(p-thr_{s,v})}} \tag{4.7}$$

Para testar o modelo estudamos, também por DFA, séries aleatórias geradas por estas forças. Nossos resultados indicam que o crossover muda dependendo da diferença de sensitividade $thr_s - thr_v$. Este resultado é compatível com a hipótese de um outro mecanismo mais lento ocorrendo para suprir o papel dos barorreceptores. Os resultados estão apresentados na fig. 4.18.

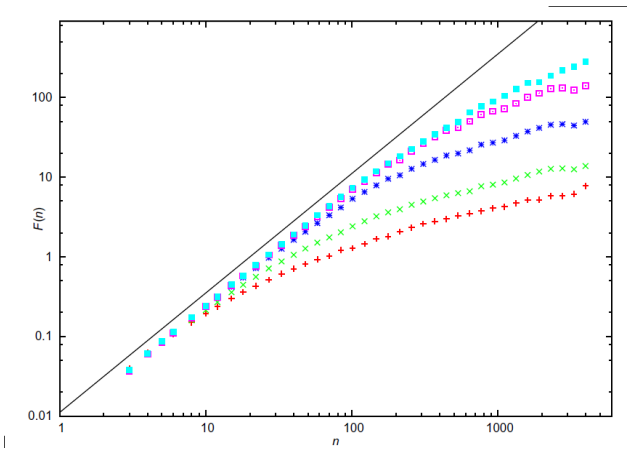


Figura 4.18: *Análise de DFA para séries artificiais de pressão arterial, geradas segundo o modelo de um caminhante aleatório forçado. De baixo para cima, os resultados são para* $thr_s - thr_v = 3, 5, 8, 11$ *e* 15. *A linha cheia representa* $\alpha = 1.5$ *para comparação.*

Em resumo, nós analisamos a dinâmica do barorreflexo, responsável pelo controle da pressão arterial. Utilizamos a técnica do DFA, mas diferente de trabalhos anteriores, não nos concentramos apenas no valor do expoente α, mas buscamos explicações para a mudança de comportamento, em diferentes escalas de tempo, para ratos saudáveis e ratos com desnervação crônica (maior que 20 dias). As séries de ratos desnervados são altamente não-estacionárias, dificultando o controle. Após 20 dias, o sistema

tenta retornar à situação anterior, mas com novos mecanismos, com diferentes escalas de tempo. As séries temporais da pressão sistólica voltam a apresentar comportamento estacionário para escalas maiores de tempo. Um modelo simples é capaz de reproduzir o comportamento do crossover, sugerindo que a plasticidade do NTS pode ser relevante no processo de readaptação.

Como continuidade deste trabalho, estamos analisando séries de ratos drogados (sob a ação da piridostigmina) e desnervados (ou não). A piridostigmina é uma droga parassimpático-mimética que estimula o sistema nervoso parassimpático ao impedir a ação da enzima acetilcolinesterase responsável por realizar hidrólise do neurotransmissor acetilcolina. Dessa forma a acetilcolina potencializa a atuação do simpático. Neste trabalho, o DFA não foi capaz de distinguir a diferença entre ratos drogados e não-drogados, o que já é um resultado interessante, diferente do comportamento dos ratos denervados. Por outro lado, resultados preliminares de análise multifractal têm sugerido diferenças nestes comportamentos. Nosso propósito é entender o papel da multifractalidade neste caso e determinar as escalas de tempo em que estes efeitos ocorrem.

Como consequência adicional desta colaboração, estamos iniciando o desenvolvimento de um software de análise de séries temporais que incorporem estas novas técnicas que utilizamos. No momento, o software LabView é quase onipresente em laboratórios de fisiologia. Nossa ideia é desenvolver um software modular, além das placas de aquisição, de maneira a criar um sistema de análise dedicado, mais leve e eficiente que o LabView. Um de nossos pós-doutores e dois dos nossos estudantes de pós-graduação têm um grande conhecimento de eletrônica modular e esta é mais uma área que pretendemos implementar no nosso grupo. O grupo de Fisiologia do Esforço do Instituto Biomédico também tem experiência nesta área além de colaboração com o grupo de Engenharia Biomédica da COPPE.

4.4 Séries Temporais em Plataformas Petrolíferas

Uma das áreas mais ativas e com grandes perspectivas de aplicações interdisciplinares, em Ciência da Computação é a mineração de dados ou "data mining". O processo consiste em explorar grandes quantidades de dados à procura de padrões ou regras de associações, a fim de detectar relacionamentos entre as variáveis. A mineração de dados é intimamente ligada à estatística e utiliza técnicas de classificação como grafos, dendrogramas e árvores de decisão. O processo consiste basicamente em 3 etapas: exploração; construção de modelo ou definição do padrão; e validação/verificação. Na realidade, a mineração de dados é uma tentativa de solução, através de computadores, para problemas de grande volume de dados, frequentemente criados pelos próprios computadores.

Talvez o exemplo mais conhecido de mineração de dados é o caso da cadeia Wal-Mart. Através da análise das notas fiscais de compra, o software de análise detetou que às sextas-feiras as vendas de cerveja cresciam na mesma proporção que a venda de fraldas. A razão, simples, é que os pais que deveriam ficar com os filhos no final de semana, aproveitavam para abastecer as geladeiras. Depois disto, as cervejas foram deslocadas para perto das fraldas para ampliar o efeito.

Nosso interesse é principalmente a localização de padrões em séries temporais. A oportunidade surgiu quando nos foi proposto a colaboração em um projeto com o ADDLabs/UFF, laboratório de Documentação Ativa e Design Inteligente do Instituto de Computação da Universidade Federal Fluminense, conveniado com a Petrobras. O laboratório desenvolve projetos computacionais nas áreas petrolífera, de gestão e Web. A expressão "Design Inteligente" não está relacionada à ideia contrária à evolução e seleção natural,

mas ligada ao desenvolvimento de programas e interação homem-máquina.

O projeto que estamos envolvidos é o ADDGDPO, assim batizado pela ligação com Gestão de Processos. O setor de tratamento de óleo em uma plataforma é um dos setores cruciais. Uma mistura de óleo e água é extraída e passa por diversos aparelhos, pré-aquecedores, separadores de produção, separadores atmosféricos, tratadores de óleo, etc. Cada um dos aparelhos possui sensores que medem quantidades como temperatura, pressão, nível e corrente. Estes aparelhos são regulados para funcionarem em um valor perto do ótimo ("set point"), dentro de uma faixa de valores. Tanto o valor ótimo como a faixa de operação são determinados manualmente e podem mudar a qualquer momento, dependendo do operador. Um alarme é disparado quando alguma medida ultrapassa os valores da faixa de alerta. Uma segunda faixa de valores, mais ampla, engloba a faixa de alerta, e valores fora dessa faixa causam o desligamento do aparelho ligado ao sensor ("shutdown") ou mesmo o "shutdown da planta".

Nossa participação no projeto começou com o projeto já iniciado. Dois estudantes, um bolsista de iniciação científica e outro no mestrado, também tomam parte no projeto, que envolvem um doutor em Estatística, uma doutora em Computação com ênfase em Programação Paralela, outra doutora em Computação com ênfase em Mineração de Dados e o pessoal técnico para desenvolvimento da versão final do programa, para permitir a utilização pelos usuários (no caso, os operadores na plataforma).

O objetivo inicial do trabalho era prever os eventos do tipo "shutdown", mesmo com pequena antecedência. A ideia consiste em utilizar técnicas de mineração de dados para obter padrões antes dos eventos e monitorar as séries quando os padrões voltassem a aparecer. Nossa experiência em análise de séries temporais deveria servir como instrumento de apoio para a aplicações das técnicas de mineração e, eventualmente, introduzir novas técnicas.

As séries que trabalhamos contém os dados de pressão, temperatura, nível e alarme dos respectivos sensores, com precisão de minutos, pelos últimos três anos, chegando a 1,5 milhões de pontos, por série. O total de sensores ativos, durante o período de coleta de dados, chegou perto de 100. Por questões de contrato de confiabilidade, não somos autorizados a divulgar publicamente alguns dos resultados e informações, sem autorização prévia da Petrobras. Tentaremos, na medida do possível, minimizar estas limitações. As séries apresentadas aqui serão identificadas pelas quantidades medidas (pressão, temperatura, etc.) mas os sensores e aparelhos nos quais os sensores estão colocados não poderão ser identificados.

Um série de medidas de pressão está mostrada na fig. 4.19. Alguns dos eventos que ocorrem corriqueiramente em um plataforma estão representados na figura:

a) a série parece estacionária em várias regiões (até $t = 4000$)

b) existem mudanças na média ou setpoint ($7500 < t < 9500$)

c) existem variações na flutuação ($t > 20000$)

d) a presença de valores distante dos setpoints porém de curtíssima duração ou "outliers" ($t \approx 12500, 16700$);

e) "shutdowns" (três deles antes de $t = 20000$).

f) alarmes seguidos em curto espaço de tempo ($5000 < t < 7500$).

g) não-estacionaridades ($12000 < t < 15000$).

Vários destes eventos possuem explicação direta como, por exemplo, exigência de maior ou menor produção determinando os setpoints e outras intervenções manuais (troca de operadores); shutdowns programados para manutenção periódica; reajustes depois de shutdowns em outros aparelhos (como os alarmes em pequeno espaço de tempo), etc.

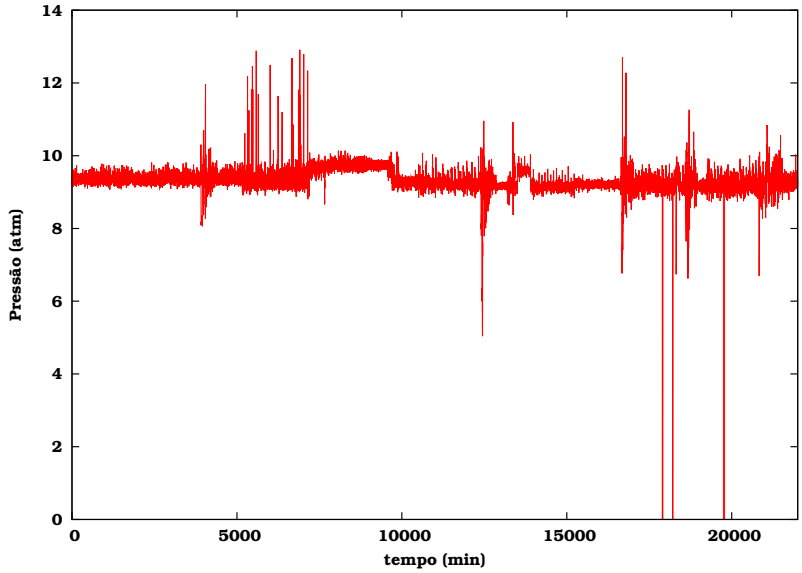


Figura 4.19: *Série temporal para medida de pressão em função do tempo (em minutos) para um dos sensores do tratamento de óleo de um plataforma petrolífera. Note que a série é estacionária em vários momentos, mas existem vários "outliers".*

O período representado na fig. 4.19 corresponde a 15 dias de dados. Precisamos ressaltar que a série acima não é uma série atípica com vários eventos mas é uma amostra do que pode ocorrer no tempo citado. Em particular, pressão e nível são séries mais "comportadas", ao contrário das séries de temperatura. Outro fator complicador é que alguns sensores são desacoplados durante alguns períodos, mas as informações continuam a ser enviadas para o "backlog" (servidor que armazena os dados), dando a falsa impressão de que alguma medida relevante está sendo feita.

Na primeira etapa, tentamos caracterizar as séries apesar das dificuldades acima. Dada a não estacionaridade das séries, optamos por calcular as grandezas usando médias móveis, isto é, ao invés de consideramos as médias em toda a extensão da série, vamos calcular em janelas de tamanho fixo, que depende do tamanho do trecho da série que vamos trabalhar. Dentro de cada janela, calculamos a média, o desvio, a entropia e o expoente α do DFA.

O desvio padr o e a entropia fornecem informações semelhantes e parecem definir regiões de mesmas características nos gráficos de séries temporais. Uma das regiões também é detectada pelo expoente das flutuações α, que por outro lado, parece estender a primeira região, comparada com as técnicas anteriores.

Métodos como janelas móveis e DFA ajudam na retirada de tendências cujo período é da ordem do tamanho das janelas ou menores. Para tendências de períodos longos (como a variação da temperatura ao longo do ano) precisam ser removidas por outros métodos, como o "Fourier Detrended Fluctuation Analysis", de Chianca et al. (2005), descrito na fig..

Uma fração considerável das séries estudadas foi classificada como ruídos, isto é, com expoentes próximos aos valores 0.5 e 1.5. Em particular, séries obtidas de aparelhos próximos à entrada do óleo no setor de produção eram as mais ruidosas. Em uma reunião de aquisição de conhecimento, isto foi confirmado por engenheiros da plataforma, pois depende da porosidade do meio de onde o óleo é extraído e da formação dos reservatórios (eles se referem aos processos como "golfadas"). Isto incluía praticamente todas as séries dos pré-aquecedores e séries de temperatura. Séries relativas aos aparelhos que estavam localizados na saída do setor de tratamento frequentemente apresentam ruído $1/f$ ou correlacionados, o que as tornam mais confiáveis considerando a procura de padrões. Com isto, reduzimos o número de séries a serem pesquisadas.

Como dissemos anteriormente, a mineração de dados consiste em procura de padrões em séries temporais. Se a série é puramente aleatória, então não teremos padrões. Para determinar o grau de determinismo nas séries, montamos os gráficos de recorrência (Eckmann et al., 1987; Marwan et al., 2007). Os gráficos de recorrência indicam as vezes em que um sistema dinâmico passou em pontos próximos no espaço de fases. É baseado no teorema de Poincaré para sistemas conservativos e consiste na projeção de um espaço de fases m-dimensional em uma representação bidimensi-

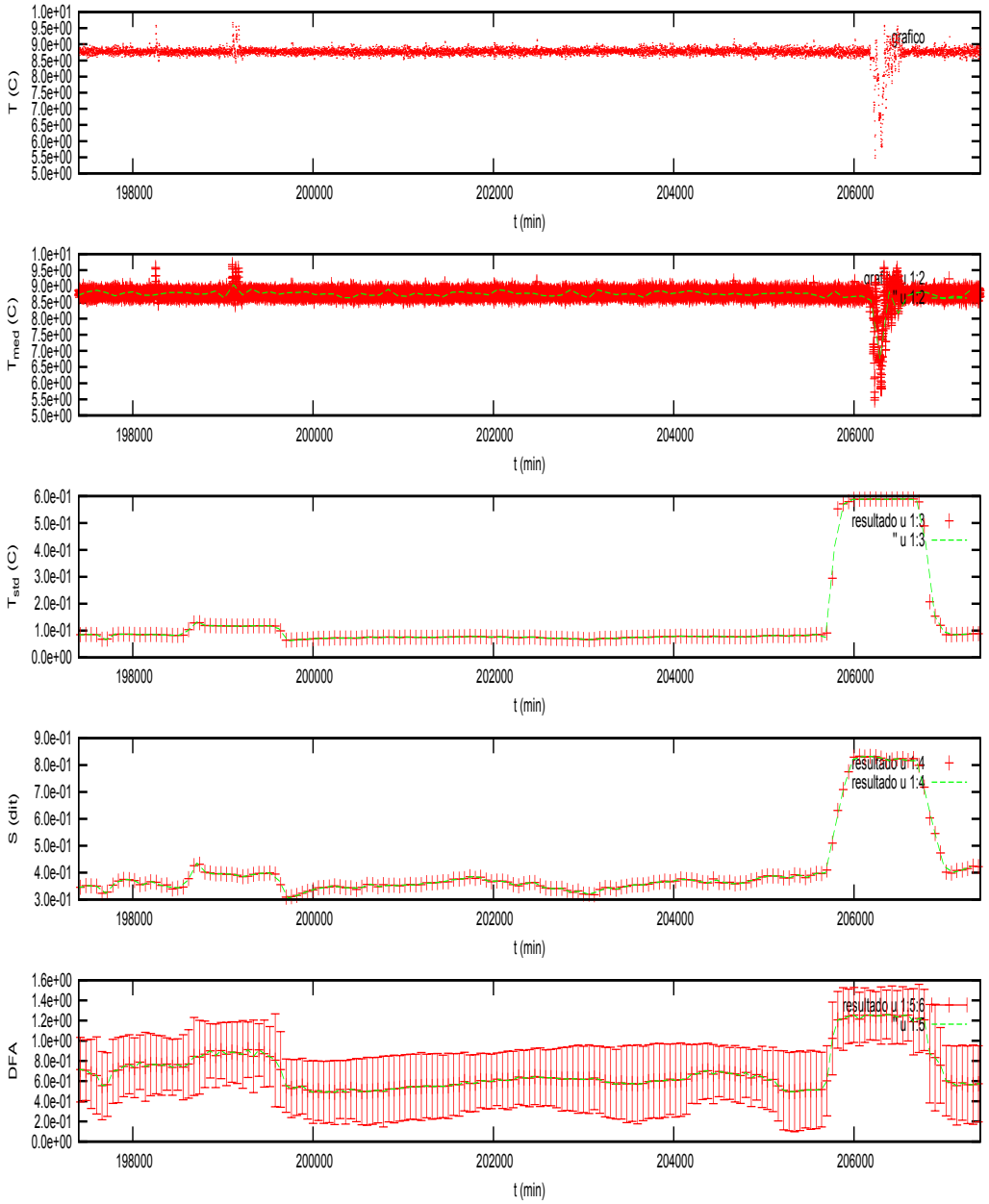


Figura 4.20: *Resultados para uma série de medidas de temperatura. De cima para baixo temos a série original, a média dentro de uma janela, o desvio dentro da janela, a entropia de Shannon e o expoente α do DFA.*

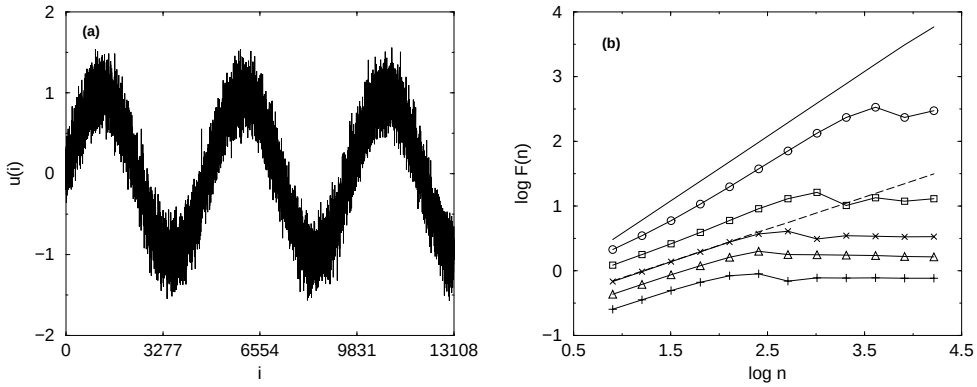


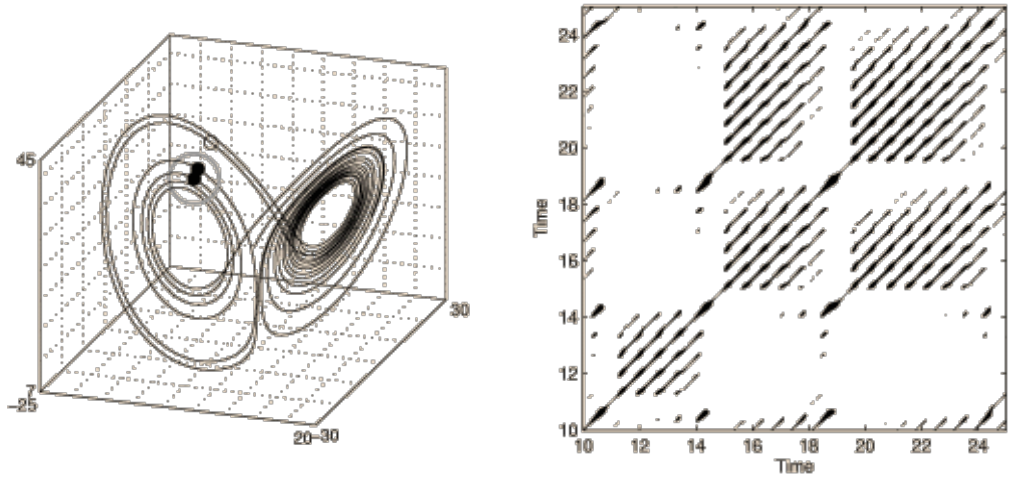
Figura 4.21: *Fourier Detrended Analysis: um método auxiliar na análise do DFA. Em (a) mostramos uma série artificial mas com uma tendência sazonal de frequência muito menor que as frequências típicas das flutuações. Em (b) são mostradas as curvas da flutuação, obtidas através do DFA, para a série original, a série com 10, 50, 100 e 150 termos truncados na expansão de Fourier. O expoente α calculado da série original é maior que o obtido para truncamentos a partir de 50 termos. O valor obtido para α depois do truncamento do 50º termo é numericamente idêntico ao valor utilizado para construir a série original, representado no gráfico pela linha tracejada.*

onal, veja figs. 4.22(a) e 4.22(b) para um sistema determinístico, o atrator de Lorenz.

O teorema de Takens (Takens, 1981) garante a reconstrução a partir de uma série temporal introduzindo atrasos. Os vetores $\vec{\xi}(t)$ m-dimensionais são reconstruídos a partir de uma série experimental $x(t)$ como

$$\vec{\xi}(t) = \big(x(t), x(t+\tau), x(t+2\tau), \ldots, x(t+(m-1)\tau)\big) \tag{4.8}$$

A dificuldade na construção de um gráfico de recorrência consiste na determinação da dimensão de imersão do espaço e na determinação do atraso τ. Na fig. 4.23 apresentamos o gráfico de recorrência para uma das séries de fluxo estudadas. O aparecimento de padrões sugere o determinismo da série, porém a presença de regiões



(a) (b)

Figura 4.22: *(a) Atrator de Lorenz (b) gráfico de recorrência do atrator. Um ponto j do atrator que pertence a uma vizinhança, representada pelo círculo cinza em (a), próximo a um ponto i (i e j representados em (a) pelos círculos pretos), corresponde a um ponto preto em (b), com coordenadas dadas pelos tempos de i e j, respectivamente. Sistemas determinísticos são representados por padrões nos gráficos de recorrência. Um sistema aleatório preencheria o gráfico com densidade praticamente uniforme.*

fora da diagonal mostram que eventos espúrios podem acontecer com certa frequência. Os gráficos de recorrência permitem separar as séries, ou trechos, que apresentam comportamento determinístico, reduzindo ainda mais o universo a ser estudado.

Em seguida, dado que alguns sensores são colocados no mesmo aparelho, porém medindo grandezas diferentes, imaginamos que algumas séries poderiam apresentar comportamento similar e serem redundantes no processo de mineração. Para isto vamos calcular as correlações cruzadas (Yamasaki et al., 2008) entre os sensores. A ideia é construir uma rede de sensores em que as ligações sejam proporcionais às correlações entre eles. A correlação cru-

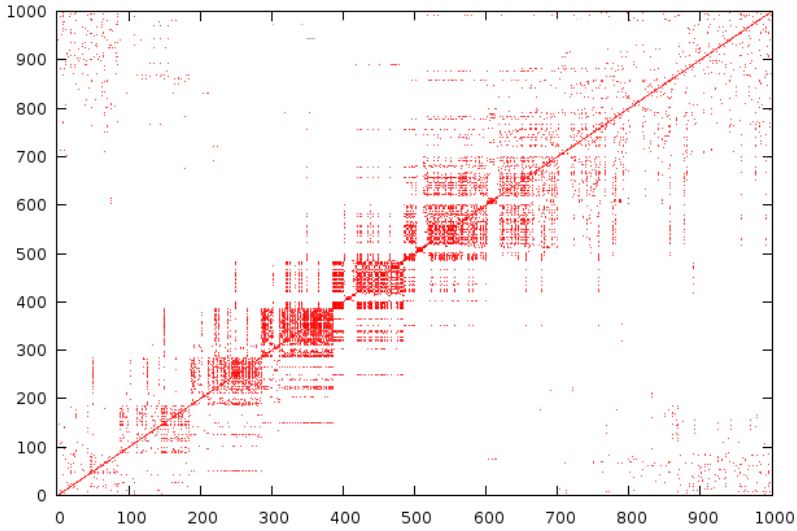


Figura 4.23: *Gráfico de recorrência para uma das séries estudadas. É possível distinguir uma forte componente determinística, representada pelos padrões em torno da diagonal e regiões fora da diagonal, representando eventos aleatórios.*

zada entre duas séries $f(t)$ e $g(t)$ é definida por:

$$[f \star g](t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t-\tau) d\tau \tag{4.9}$$

Porque as séries são não estacionárias, vamos usar a "Detrended Cross-Correlation Analysis" de Podobnik and Stanley (2008). O método consiste em dividir as duas séries integradas R_k e R'_k em caixas e retirar a tendência em cada caixa, exatamente como no DFA (4.3). A covariância dos resíduos em cada caixa de tamanho n é dada por

$$f^2_{DCCA} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=i}^{n} \left(R_k - \tilde{R}_{k,i}\right) \left(R'_k - \tilde{R}'_{k,i}\right) \tag{4.10}$$

onde R_k é o valor da série integrada no tempo k e $\tilde{R}_{k,i}$ é a tendência na caixa i, no tempo k. A covariância será então dada por

$$F^2_{DCCA}(n) = \frac{1}{N-n} \sum_{i=1}^{N-n} f^2_{DCCA}(n,i). \tag{4.11}$$

Para séries cujas autocorrelações sejam leis de potência e os expoentes sejam os mesmos (Podobnik and Stanley, 2008),

$$F^2_{DCCA}(n) \sim n^{\gamma}. \tag{4.12}$$

Seguindo o procedimento de Yamasaki et al. (2008), montamos uma rede de correlações entre os sensores, da seguinte maneira: para cada par de séries, obtivemos a diferença temporal τ para o qual a correlação cruzada fosse a maior possível. Se o maior valor da correlação cruzada for maior que um valor limite (a ser ajustado), então criamos uma conexão entre os sensores. Sensores com um grande número de ligações são redundantes e os sensores que estão isolados devem ser analisados mais cuidadosamente.

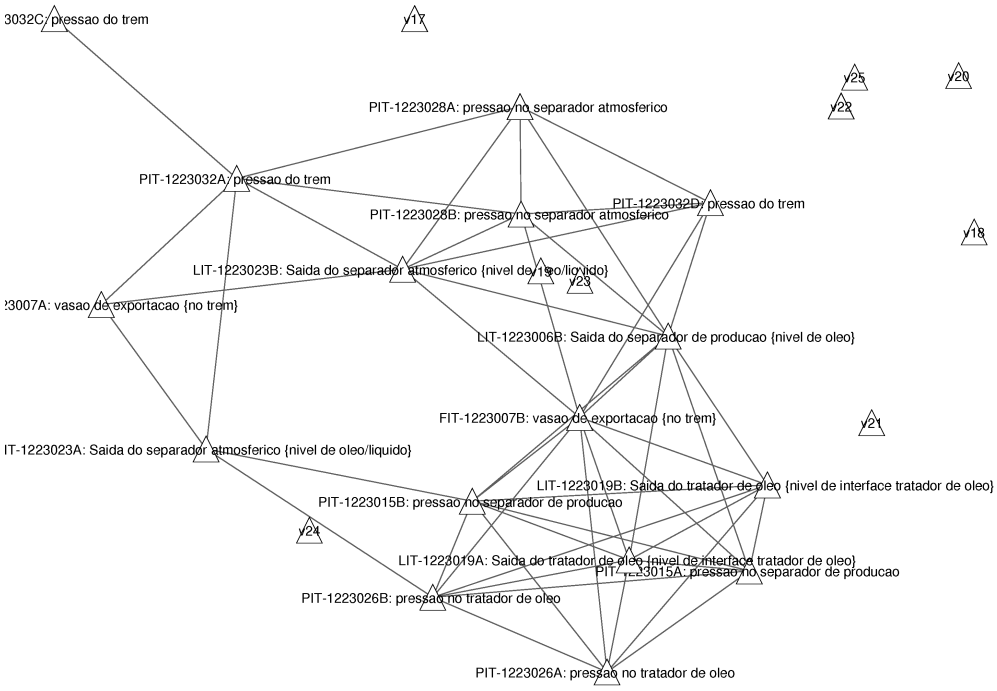


Figura 4.24: *Redes de sensores. As ligações aparecem em sensores que têm valores altos para a correlação cruzada. Sensores que possuem um número grande de ligações são redundantes e mostram as mesmas informações que outros.*

As técnicas descritas até agora servem para obtermos uma maior

compreensão da dinâmica do sistema e reduzir sensivelmente o universo de séries, ou trechos, a serem estudados. O que vamos apresentar, a partir de agora, é a nossa contribuição para mineração de dados e segmentação de séries temporais. O problema de segmentação de séries temporais consiste em localizar períodos ou segmentos em que a série é homogênea com relação a algumas quantidades. As quantidades que caracterizam as séries variam em cada problema: por exemplo, no reconhecimento de fonemas, as frequências fundamentais podem ajudar a caracterizar um som (neste problema, a duração dos fonemas varia pouco). Em outros problemas, a duração de cada intervalo homogêneo pode variar muito, como no caso de interesse da Nokia, fabricante de telefones celulares (Himberg et al., 2001). Para desenvolver um novo modelo de telefone celular, alguns usuários foram monitorados e informações sobre a posição do telefone celular (horizontal, vertical, etc.), umidade, intensidade do sinal, velocidade do usuário, luminosidade, etc. foram gravados e posteriormente deveriam ser identificados para buscar padrões de utilização de mesmos.

A representação mais usada em segmentação é a PLR ("Piecewise Linear Representation"). Os métodos de segmentação (Hunter and McIntosh, 1999) basicamente tratam de três tipos de problemas, na representação PLR:

- dada uma série $x(t)$, qual a melhor representação usando K segmentos.
- dada uma série $x(t)$, qual a melhor representação tal que nenhum dos segmentos ultrapasse um erro máximo.
- dada uma série $x(t)$, qual a melhor representação tal que o erro máximo em toda a série não ultrapasse um valor máximo estipulado.

Nem todos os algoritmos funcionam nas três situações acima. Também as estratégias para segmentação podem ser classificadas em

três categorias:

- janelas móveis: cada segmento cresce até que algum critério é satisfeito;
- hierárquica: as séries são segmentadas recursivamente, até que algum critério seja atingido
- agregação: partindo de uma segmentação inicial restritiva, com um número grande de segmentos, a condição de homogeneidade é relaxada e segmentos vizinhos são unidos.

A determinação dos critérios é a dificuldade na aplicação dos métodos, como mostra a fig. 4.25. O outro problema é a dificuldade em descobrir qual é realmente o melhor resultado.

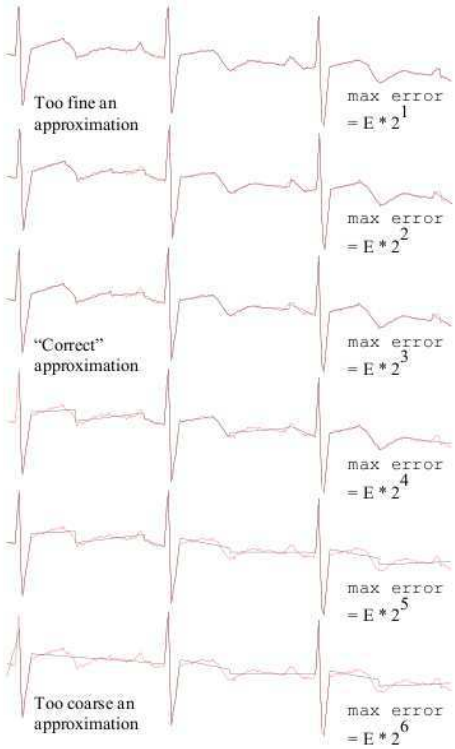


Figura 4.25: *Determinação dos segmentos, a partir de um erro máximo* `max_error`*. O limite do erro determina o número de segmentos e a qualidade da representação.*

Nossa primeira tentativa de segmentação consistiu na determinação por janelas móveis, tomando a média e o desvio como critérios para determinação de janelas. Um dos resultados está apresentado na fig. 4.26.

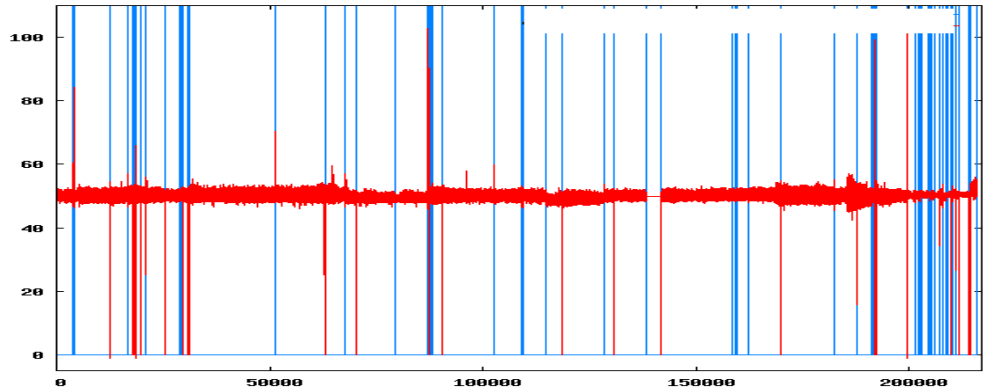


Figura 4.26: *Resultado da segmentação de uma série de fluxo (em vermelho), tomando apenas a média e o desvio padrão como critérios de segmentação (os limites dos segmentos são apresentados em azul). O número de segmentos é fortemente afetado pelos "outliers". A segmentação apresentada aqui não é adequada para efeitos de mineração pois existe um excesso de janelas no final da série e janelas muito estreitas, devido aos outliers.*

Na fig. 4.26 é possível ver a influência dos outliers na segmentação. O problema é saber se tais outliers são sintomas de problemas ou são apenas flutuações causadas por erros do instrumento ou de registro. Outra dificuldade é o que deveríamos adicionar à séries, se decidíssemos retirar os outliers, de modo a não alterar os resultados dos outros métodos. Esta última dificuldade foi satisfatoriamente resolvida com o uso de wavelets.

Para verificar a importância dos outliers, para todos as ocorrências de alarmes e shutdowns, calculamos a probabilidade de ocorrência de um alarme em um tempo t_{as} antes de um shutdown. Surpreendentemente encontramos que não existia nenhuma relação clara entre a maioria dos alarmes e dos shutdowns. Ao contrário do que se acreditava, uma fração considerável de alarmes era registrada logo após um shutdown (quando providências eram

tomadas para restabelecer o funcionamento da planta). Para alguns alarmes, porém, foi encontrada correlações entre a duração do alarme com a ocorrência de um shutdown. Com isto, concluímos que os alarmes não serviram de preditores de shutdowns, mas a duração dos alarmes poderia ser útil.

Paralelamente aos nossos estudos, o outro grupo citado, usava técnicas convencionais de mineração. As nossas previsões foram todas confirmadas por utilização de técnicas independentes como SVM (" Support vector machine") e árvore de decisão. A vantagem principal dos métodos de física estatística é que estes podem ser feitos "on-line", isto é, enquanto os dados são adquiridos.

Uma informação interessante que foi obtida através da técnica de árvore de decisão, segundo nossos colaboradores, é que a entropia era a grandeza mais frequente nos critérios de previsão de eventos indesejáveis (alarmes e shutdowns). Média e o expoente α foram os critérios seguintes. Para definir um novo algoritmo de segmentação, utilizamos o algoritmo $k-$means, de classificação, que consiste em dividir os pontos em K conjuntos disjuntos S_j contendo N_j pontos, que minimiza

$$C = \sum_{j=1}^{K} \sum_{n \in S_j} \left| x_n - \mu_j \right|^2 \tag{4.13}$$

onde x_n é um vetor representando o n-ésimo termo da série e μ_j é o centro de massa dos pontos em S_j. O vetor x_n é representado em um espaço d-dimensional, onde cada dimensão é o valor de alguma grandeza caracterizando o ponto (além do valor da grandeza na série, as outras coordenadas podem ser a entropia local, o desvio padrão de uma janela centrada em x_n, etc.).

No nosso estudo usamos o valor da série no tempo t, mais a média de uma janela, a entropia de uma janela, centrada em $x(t)$, o valor de α local e o tempo t. Incluímos o tempo, para que pontos com os mesmos valores das outras grandezas, mas distantes no

tempo, não façam parte do mesmo segmento. Desta maneira, o único parâmetro livre é o número de segmentos.

O resultado para a aplicação do método está representado na fig. 4.27. Como podemos ver, este método leva em consideração vários aspectos simultaneamente: a média, a tendência, e o desvio. Para obtermos a mesma informação, usando os métodos anteriores (como o PLR), deveríamos indicar as tolerâncias em todas as quantidades enquanto, no nosso método, apenas a quantidade de segmentos é relevante.

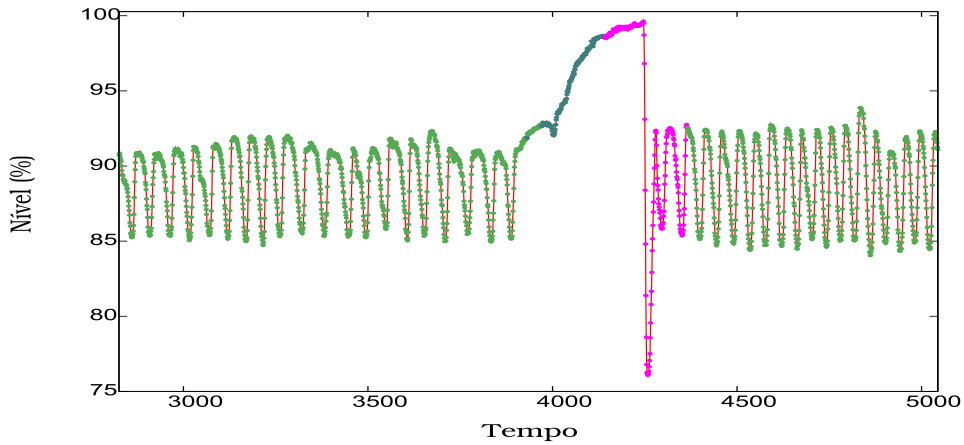


Figura 4.27: *Resultado da segmentação, utilizando o método de agregação, utilizando a entropia e o expoente α do DFA como coordenadas. Cada cor corresponde a um segmento, de um total de quatro.*

Frequentemente é dito que o olho humano é a ferramenta mais poderosa para classificação. A segmentação mostrada na fig. 4.26 pode não ser considerada a melhor (até porque é difícil definir a qualidade da segmentação sem ter um objetivo), mas é interessante discutir o resultado: note que o desvio apresentado na figura corresponde a três segmentos diferentes (alguns poderiam alegar que o desvio é apenas um segmento). O trecho em verde escuro é uma tendência diferente dos outros segmentos e dura cerca de uma hora, portanto é um preditor eficiente para o evento que ocorre por

volta do tempo 4250.

Em resumo, lidamos com séries temporais em um problema de interesse tecnológico: gestões de processos do setor de tratamento de óleo de uma plataforma da Petrobras. O uso de quantidades estatísticas como o DFA e entropia permitiu selecionar séries relevantes para o processo de previsão de eventos. A entropia se mostrou a quantidade mais importante na classificação de situações que precedem eventos indesejáveis. Para aplicar técnicas de mineração de dados, desenvolvemos uma nova técnica de segmentação de séries temporais, baseada em algoritmos de clustering. Os resultados são substancialmente melhorados quando utilizamos wavelets para remoção de outliers.

4.5 Conclusões

A análise de séries temporais é uma ciência multidisciplinar. Técnicas de diversas áreas, como a Física, Estatística, Computação, etc. são aplicadas em caracterização, classificação e previsão, entre outros usos. Neste capítulo apresentamos alguns exemplos de problemas que temos trabalhado.

Através da comparação dos valores de expoentes e distribuições de probabilidades, encontramos semelhanças no comportamento da torneira gotejante, um paradigma de sistema caótico, o coração saudável, um modelo simplificado para as gotas e mesmo aglomerados de formigas. O comportamento de anticorrelação é robusto e aparece mesmo para diversos atratores que aparecem em fluxos diferentes, no caso da torneira gotejante.

Em seguida, utilizamos a técnica do DFA (ou "detrented fluctuation analysis") para obter informações sobre a recuperação do sistema de controle da pressão arterial de ratos desnervados. Diferente do estudo anterior, onde o expoente determinava a classe de universalidade, no caso dos ratos desnervados foi a presença

de um ponto de mudança de comportamento das flutuações que indicava a recuperação. Com um modelo baseado em caminhadas aleatórias forçadas, conseguimos reproduzir o crossover. Com base nestes resultados, podemos sugerir que o mecanismo alternativo de controle é mais lento que o original e pode ser consequência da plasticidade do sistema nervoso autônomo.

Finalmente, aplicamos algumas técnicas para caracterização de séries temporais provenientes do setor de tratamento de óleo de uma plataforma da Petrobras. Com nossas técnicas conseguimos reduzir substancialmente o volume de dados a serem estudados, além de entender parte do funcionamento dinâmico daquele setor. Além destes testes, desenvolvemos um algoritmo para a segmentação das séries com o objetivo de aplicação de técnicas de mineração de dados. O algoritmo é baseado em um método de classificação de dados e grandezas físicas como o expoente da flutuação e a entropia.

5

Conclusões

"He uses statistics
as a drunken man uses lampposts -
for support rather than illumination."
Andrew Lang

Apresentamos, nesta tese, alguns trabalhos cuja motivação original não são sistemas físicos que, em geral, são apresentados nos cursos de graduação. Mostramos aplicações com motivações ecológicas, sociais, econômicas, de gestão, fisiológicas e computacionais. Algumas aplicações são voltadas para o setor de inovação tecnológica.

No primeiro capítulo apresentamos algumas contribuições ao estudo de problemas multidisciplinares, através de simulações e análises computacionais. O primeiro problema tratado foi o bloco descendo um plano inclinado, com atrito. Este experimento é repetido em todos os semestres em cursos básicos de física e mesmo em algumas escolas do 2º grau. A novidade ficou por conta de uma observação experimental, que a probabilidade de tamanhos de deslizamento para ângulos próximos ao ângulo crítico não era a mesma distribuição para ângulos menores. As simulações com atrito variável mostraram que este era um problema de tamanho finito, tanto no tamanho espacial quanto no número de experimen-

tos. Uma versão simples do modelo serviu de base para a solução analítica. O problema ainda é interessante do ponto de vista didático, para ilustrar as dificuldades computacionais e experimentais que aparecem no tratamento de problemas perto de pontos críticos. O modelo foi usado por outros pesquisadores para estudos em estatísticas de avalanches e terremotos.

Em seguida mostramos dois problemas sociais e econômicos: a migração rural-urbana e a variação dos índices no mercado de ações. Estes são exemplos de simulações com múltiplos agentes. As simulações são simples, com os agentes tomando decisões de forma aleatória, sem memória ou planos estratégicos de ação. Mesmo com estas limitações, os modelos conseguiram reproduzir resultados qualitativos obtidos em sistemas reais. O refluxo da migração e a estabilidade dos salários, além de descartar a necessidade de controle através de um salário mínimo, são alguns dos resultados obtidos através do modelo. A estrutura da organização rural em famílias menores também foi mostrado pelo modelo simplificado. Quanto ao mercado de ações, nosso modelo sugere que é a ação coletiva dos negociadores ou corretores que determinam a mudança observada em mercados reais quando analisamos a variação dos índices em escala de minutos ou em escalas de dias. Tal comportamento indica um alcance curto da memória do mercado: existem fortes forças restauradoras que agem na escala de poucos dias. Economistas recentemente sugeriram uma solução que o modelo original apresenta: a imposição na distribuição de tamanhos de aglomerados de corretores (ou o "efeito de manada").

O estudo de redes complexas é de grande interesse atualmente e que se encaixa no espírito multidisciplinar desta tese. Partindo de uma estrutura fascinante como o cérebro, apresentamos alguns resultados de redes neurais em redes complexas. Estamos estudando, presentemente, como encontrar uma topologia eficiente para armazenamento de informações em redes de neurônios binários. Embora não tenha justificativa biológica, é possível que tenha

aplicação prática. O estudo de redes complexas continuou em dois outros problemas: como se desenvolve a estrutura de pacotes no maior projeto de software colaborativo do mundo, a distribuição Debian GNU/Linux.

Também a estrutura de redes complexas é base para o trabalho que encerra o primeiro capítulo: o de guerra cibernética. Estudamos a estrutura de redes em diferentes escalas, como o Instituto de Física e toda a Universidade Federal Fluminense. Diversos fatores influenciam o crescimento de uma rede de computadores e que determinam sua fragilidade (ou robustez) face à ataques cibernéticos. Analisamos também o fluxo de dados através dos switches e determinamos que padrões de utilização dos serviços de rede aparecem no protocolo VoIP.

No segundo capítulo tratamos do problema do envelhecimento de populações, com um forte viés para teorias evolucionárias para o envelhecimento. Este capítulo mereceu uma atenção especial para que fossem expostos alguns aspectos biológicos e demográficos fundamentais do problema. Apesar de vários físicos já se interessarem pelos mecanismos de evolução e seleção natural, como sistemas dinâmicos que minimizam energias, ou maximizam "fitness", o interesse no envelhecimento é relativamente recente e por isto optamos por uma apresentação mais extensa.

Existem várias teorias para o envelhecimento e algumas parecem ser confirmadas em alguns experimentos e falham em outros. Aparentemente, vários efeitos contribuem para o envelhecimento. Um dos desafios no estudo do envelhecimento é exatamente quantificar a importância destes fatores. No capítulo 2, apresentamos um modelo computacional para populações com estrutura de idades, inspirado pelas técnicas apresentadas no primeiro capítulo. Os resultados obtidos com o modelo foram confirmados por duas leis de mortalidade, uma delas conhecida desde o século XIX e de caráter universal. Mostramos algumas aplicações do modelo em espécies diferentes, uma delas inclusive sendo uma proposta de

experimento e ao mesmo tempo sugestão para uma política regulamentadora de pesca de lagostas.

O terceiro capítulo é o mais próximo da física tradicional, em particular dos conceitos de sistemas dinâmicos. Ainda assim procuramos ressaltar os aspectos multidisciplinares dos problemas. Mostramos uma analogia entre a dinâmica da torneira gotejante e as batidas do coração. A analogia serviu de base para um estudo em ratos, em que um dos mecanismos de controle da pressão arterial foi desabilitado. Nossos métodos permitiram estimar as escalas de tempo envolvidas e afetadas, além de quantificar a recuperação dos ratos desnervados. Os resultados foram reproduzidos por um modelo qualitativo que pode ser aperfeiçoado e ajudar na compreensão do funcionamento do complexo sistema de controle de pressão sanguínea.

Finalmente apresentamos mais um projeto, que envolveu várias das técnicas apresentadas nesta tese para tratar o problema de controle do setor de óleo de uma plataforma da Petrobras. Além de interagir com uma equipe multidisciplinar, pudemos comparar, em um exemplo real, as técnicas recentes de análise e caracterização de séries temporais com métodos também recentes de mineração de dados. Utilizando nossos resultados como pré-processadores para a imensa quantidade de dados já existentes e gerados continuamente, o trabalho de mineração foi sensivelmente reduzido, tornando possível a implementação de um sistema de controle online. O projeto está na fase de treinamento dos usuários e em pouco tempo poderemos estimar a importância destes estudos. Enquanto a análise de séries não seja algo novo em física, o enfoque é diferente do tradicional, já que o objetivo era a previsão e não a classificação ou categorização.

A mensagem deste trabalho poderia ter duas versões: para os físicos, existem vários problemas realmente interessantes cuja motivação inicial não pertence ao domínio da Física; para os que não são físicos, existem físicos que possam se interessar pelos seus

problemas e dar interessantes contribuições (ao menos será uma contribuição diferente).

Referências Bibliográficas

Anderson, R.M., Shanmuganayagam, D., and Weindruch, R. Caloric restriction and aging: Studies in mice and monkeys. *Toxicol Pathol*, 37(1):47–51, 2009. doi:10.1177/0192623308329476.

Azbel, M.Y. Unitary mortality law and species-specific age. *Proc Biol Sci*, 263:1449–1454, 1996.

Azbel, M. Phenomenological theory of mortality. *Physics Reports*, 288:545–574(30), 1997. doi:doi:10.1016/S0370-1573(97)00040-9.

Bachelier, L. Théorie de la spéculation. *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, 3(17):21–86, 1900.

Barabasi, A.L. and Albert, R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286(5439):509–512, 1999.

Barton, N.H. Pleiotropic models of quantitative variation. *Genetics*, 124:773–782, 1990.

Bonabeau, E., Theraulaz, G., Deneubourg, J.L., Lioni, A., Libert, F.m.c., Sauwens, C., and Passera, L. Dripping faucet with ants. *Phys. Rev. E*, 57(5):5904–5907, 1998. doi:10.1103/PhysRevE.57.5904.

Bowden, F. and Tabor, D. *The Friction and Lubrication of Solids*. Clarendon, Oxford Eng., 1950.

Box, G.E.P., Jenkins, G.M., and Reinsel, G.C. *Time Series Analysis: Forcasting and Control*. Prentice Hall, 3 edition, 1994.

Brito, V.P. and Gomes, M.A.F. Block avalanches on a chute. *Physics Letters A*, 201(1):38 – 41, 1995. doi:DOI:10.1016/0375-9601(95)00200-M.

Carey, Liedo, P., Orozco, D., and Vaupel, J.W. Slowing of mortality rates at older ages in large medfly cohorts. *Science*, 258(5081):457–461, 1992. doi:10.1126/science.1411540.

Carmi, S., Havlin, S., Kirkpatrick, S., Shavitt, Y., and Shir, E. A model of Internet topology using k-shell decomposition. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(27):11150–11154, 2007. doi:10.1073/pnas.0701175104.

Caroli, C. and Velický, B. Anomalous acoustic reflection on a sliding interface or a shear band. *Phys. Rev. E*, 67(6):061301, 2003. doi:10.1103/PhysRevE.67.061301.

Charlesworth, B. Patterns of age-specific means and genetic variances of mortality rates predicted by the mutation-accumulation theory of ageing. *Journal of Theoretical Biology*, 210(1):47–65, 2001. doi:10.1006/jtbi.2001.2296.

Chianca, C.V., Sá Martins, J.S., and de Oliveira, P.M.C. Mapping the train model for earthquakes onto the stochastic sandpile model. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 68(4):549–555, 2009. doi:10.1140/epjb/e2009-00122-7.

Chianca, C.V., Ticona, A., and Penna, T.J.P. Fourier-detrended fluctuation analysis. *Physica A*, 357(3-4):447–454, 2005. doi:{10.1016/j.physa.2005.03.047}.

Cohen, R., Erez, K., ben Avraham, D., and Havlin, S. Resilience of the internet to random breakdowns. *Phys. Rev. Lett.*, 85(21):4626–4628, 2000. doi:10.1103/PhysRevLett.85.4626.

Cohen, R., Erez, K., ben Avraham, D., and Havlin, S. Breakdown of the internet under intentional attack. *Phys. Rev. Lett.*, 86(16):3682–3685, 2001. doi:10.1103/PhysRevLett.86.3682.

Cont, R. and Bouchaud, J.P. Herd behavior and aggregate fluctuations in financial markets. *Macroeconomic Dynamics*, 4(02):170–196, 2000. doi:10.1017/S1365100500015029.

Copernici, N. *De revolutionibus orbium coelestium*. Johannes Petreius, 1543.

Creutz, M., Jacobs, L., and Rebbi, C. Experiments with a gauge-invariant ising system. *Phys. Rev. Lett.*, 42(21):1390–1393, 1979. doi:10.1103/PhysRevLett.42.1390.

Dall'Asta, L., Alvarez-Hamelin, I., Barrat, A., Vazquez, A., and Vespignani, A. Exploring networks with traceroute-like probes: theory and simulations. *ArXiv Computer Science e-prints*, 2004.

Darwin, C. *On the Origin of Species by Means of Natural Selection*. John Murray, London, 1859.

de Lima, A.R., Penna, T.J.P., and de Oliveira, P.M.C. Monte Carlo simulation of some dynamical aspects of drop formation. *International Journal of Modern Physics C*, 8(5):1073–1080, 1997.

de Menezes, M., Racco, A., and Penna, T.J.P. Why trees live longer? *Physica A*, 233(1-2):221–225, 1996.

De Menezes, M., Moukarzel, C., and Penna, T.J.P. First-order transition in small-world networks. *Europhysics Letters*, 50(5):574–579, 2000.

de Menezes, M., Moukarzel, C., and Penna, T.J.P. Geometric phase-transition on systems with sparse long-range connections. *Physica A*, 295(1-2):132–139, 2001.

de Oliveira, P.M.C. and Penna, T.J.P. Fast code for monte carlo simulations. *Brazilian Journal of Physics*, 18(4):502–507, 1988.

de Oliveira, P.M.C. and Penna, T.J.P. Simulating the complex behavior of a leaky faucet. *Journal of Statistical Physics*, 73(3-4):789–798, 1993.

de Oliveira, P.M.C. and Penna, T.J.P. Lattice simulation of leaky faucet dynamics. *International Journal of Modern Physics C-Physics and Computers*, 5(6):997–1006, 1994.

de Oliveira, P.M.C., Penna, T.J.P., and Herrmann, H. Broad histogram method. *Braz. J. Phys.*, 26(4):677–683, 1996.

de Oliveira, P.M.C., Sá Martins, J.S., and Szanto de Toledo, A. Stochastic behavior of cooling processes in hot nuclei. *Phys. Rev. C*, 55(6):3174–3176, 1997. doi:10.1103/PhysRevC.55.3174.

de Oliveira, P.M.C., Penna, T.J.P., and Herrmann, H. Broad histogram Monte Carlo. *European Physical Journal B*, 1(2):205–208, 1998.

de Oliveira, P.M., de Oliveira, S.M., Stauffer, D., and Cebrat, S. Penna ageing model and improvement of medical care in 20th century. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 273(1-2):145 – 149, 1999. doi:DOI:10.1016/S0378-4371(99)00349-0.

de Oliveira, S., Penna, T.J.P., and Stauffer, D. Simulating the Vanishing of Northern Cod Fish. *Physica A*, 215(3):298–304, 1995.

de Souza, A., Martins, S., and Zacarias, M. Computer simulation applied to the biological control of the insect aphis gossypii for the parasitoid lysiphlebus testaceipes. *Ecological Modelling*, 220(6):756 – 763, 2009. doi:DOI:10.1016/j.ecolmodel.2008.12.001.

Eckmann, J.P., Kamphorst, S.O., and Ruelle, D. Recurrence plots of dynamical systems. *Europhysics Letters*, 4(9):973–977, 1987.

Eigen, M. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. *Naturwissenschaften*, 58:465–523, 1971.

Ekerdt, D.J., editor. *Encyclopedia of aging*. Macmillan reference USA, New York :, 1st ed. edition, 2002.

Espindola, A.L., Penna, T.J.P., and Silveira, J.J. Rural-urban migration in D-dimensional lattices. *International Journal of Modern Physics C*, 16(12):1831–1840, 2005.

Espindola, A.L., Silveira, J.J., and Penna, T.J.P. A Harris-Todaro agent-based model to rural-urban migration. *Brazilian Journal of Physics*, 36(3A):603–609, 2006.

Farmer, J., Packard, N., and Perelson, A. The immune system, adaptation, and machine learning. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 22(1-3):187–204, 1986. doi:10.1016/0167-2789(86)90240-X.

Field, S.B. and Stan, G. Chaotic dynamics of driven flux drops: A superconducting "dripping faucet". *Physical Review Letters*, 100(7):077001, 2008. doi:10.1103/PhysRevLett.100.077001.

Fisher, M.E. Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics. *Rev. Mod. Phys.*, 70(2):653–681, 1998. doi:10.1103/RevModPhys.70.653.

Fontana, L., Weiss, E.P., Villareal, D.T., Klein, S., and Holloszy, J.O. Long-term effects of calorie or protein restriction on serum igf-1 and igfbp-3 concentration in humans. *Aging Cell*, 7(5):681–687, 2008. doi:10.1111/j.1474-9726.2008.00417.x.

Galhardo, C.E.C., Penna, T.J.P., de Menezes, M.A., and Soares, P.P.S. Detrended fluctuation analysis of a systolic blood pressure control loop. *New Journal of Physics*, 11(10):103005, 2009.

Gelenbe, E. and Loukas, G. A self-aware approach to denial of service defence. *Comput. Netw.*, 51(5):1299–1314, 2007. doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.comnet.2006.09.009.

Geman, S. and Geman, D. Stochastic relaxation, gibbs distributions and the bayesian restoration of images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 6(6):721–741, 1984. doi:10.1080/02664769300000058.

Goldsmith, T.C. Aging, evolvability, and the individual benefit requirement; medical implications of aging theory controversies. *J Theor Biol*, 252:764–768, 2008.

Golubev, A. How could the Gompertz–Makeham law evolve. *Journal of Theoretical Biology*, 258(1):1–17, 2009. doi:10.1016/j.jtbi.2009.01.009.

Gompertz, B. On the nature of the function expressive of the law of human mortality, and on a new mode of determining the value of life contingencies. *Philosophical Transactions Series I*, 115:513–583, 1825. doi:10.1098/rstl.1825.0026.

Gong, Y., Thompson, J.N., and Woodruff, R.C. Effect of deleterious mutations on life span in drosophila melanogaster. *J Gerontol A Biol Sci Med Sci*, 61(12):1246–1252, 2006.

Guillaume, J.L., Latapy, M., and Magoni, D. Relevance of massively distributed explorations of the internet topology: qualitative results. *Comput. Netw.*, 50(16):3197–3224, 2006. doi: http://dx.doi.org/10.1016/j.comnet.2005.12.010.

Guyton, A.C. and Hall, J.E. *Textbook of Medical Physiology*. W.B. Saunders Company, 2000.

H, D.R., S, D., SK, D., and JB, N. Instability in rural-urban migration. *Economic Journal*, 97(388):940–50, 1987.

Harman, D. Aging: a theory based on free radical and radiation chemistry. *J Gerontol*, 11:298–300, 1956.

Harman, D. The biologic clock: the mitochondria? *J Am Geriatr Soc*, 20:145–147, 1972.

Harris, J.R. and Todaro, M.P. Migration, unemployment & development: A two-sector analysis. *American Economic Review*, 60(1):126–42, 1970.

Hayflick, L. The limited in vitro lifetime of human diploid cell strains. *Experimental Cell Research*, 37(3):614–636, 1965. doi: 10.1016/0014-4827(65)90211-9.

Hebb, D.O. *The Organization of Behavior: A Neuropsychological Theory*. Wiley, New York, 1949.

Heumann, M. and Hötzel, M. Generalization of an aging model. *Journal of Statistical Physics*, 79(1-2):483–490, 1995. doi: 10.1007/BF02179400.

Himberg, J., Korpiaho, K., Mannila, H., Tikanmäki, J., and Toivonen, H. Time series segmentation for context recognition in mobile devices. In *ICDM '01: Proceedings of the 2001 IEEE International Conference on Data Mining*, pages 203–210. IEEE Computer Society, Washington, DC, USA, 2001.

Holliday, R. Food, reproduction and longevity: Is the extended lifespan of calorie-restricted animals an evolutionary adaptation? *BioEssays*, 10(4):125–127, 1989. doi:10.1002/bies.950100408.

Hopfield, J.J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 79(8):2554–2558, 1982.

Hunter, J. and McIntosh, N. Knowledge-based event detection in complex time series data. In *AIMDM '99: Proceedings of the Joint European Conference on Artificial Intelligence in Medicine and Medical Decision Making*, pages 271–280. Springer-Verlag, London, UK, 1999.

Hutchings, J.A. Collapse and recovery of marine fishes. *Nature*, 406(6798):882–885, 2000. doi:10.1038/35022565.

Ising, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Physik*, 31:235–288, 1925.

Jan, N. Adult survival in partridge-barton model of biological aging. *Journal of Statistical Physics*, 77(3-4):915–917, 1994. doi:10.1007/BF02179469.

Keller, L.F., Reid, J.M., and Arcese, P. Testing evolutionary models of senescence in a natural population: age and inbreeding effects on fitness components in song sparrows. *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 275(1635):597–604, 2008. doi:10.1098/rspb.2007.0961.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., and Vecchi, M.P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598):671–680, 1983. doi:10.1126/science.220.4598.671.

Kirkwood, T.B.L. Evolution of ageing. *Nature*, 270(5635):301–304, 1977. doi:10.1038/270301a0.

Kohring, G.A. A high-precision study of the hopfield model in the phase of broken replica symmetry. *Journal of Statistical Physics*, 59(3):1077–1086, 1990. doi:10.1007/BF01025863.

Lambeth, J.D. Nox enzymes, ros, and chronic disease: an example of antagonistic pleiotropy. *Free radical biology & medicine*, 43(3):332–347, 2007. doi:10.1016/j.freeradbiomed.2007.03.027.

Landau, D. and Binder, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2005.

Latka, M., Glaubic-Latka, M., Latka, D., and West, B.J. Fractal rigidity in migraine. *Chaos, Solitons and Fractals*, 20(1):165 – 170, 2004. doi:DOI:10.1016/S0960-0779(03)00440-5. Towards a new vision of complexity.

Levy, B.R., Slade, M.D., Kunkel, S.R., and Kasl, S.V. Longevity increased by positive self-perceptions of aging. *Journal of Personality and Social Psychology*, 83(2):261–270, 2002. doi: 10.1037/0022-3514.83.2.261.

Lima, A.R., Martins, J., and Penna, T.J.P. Monte Carlo simulation of magnetic systems in the Tsallis statistics. *Physica A*, 268(3-4):553–566, 1999.

Lima, A.R., de Oliveira, P.M.C., and Penna, T.J.P. A comparison between broad histogram and multicanonical methods. *Journal Of Statistical Physics*, 99(3-4):691–705, 2000a.

Lima, A.R., de Oliveira, P.M.C., and Penna, T.J.P. Broad histogram method for multiparametric Hamiltonians. *Solid State Communications*, 114(8):447–452, 2000b.

Lima, A.R., Moukarzel, C., Grosse, I., and Penna, T.J.P. Sliding blocks with random friction and absorbing random walks. *Physical Review E*, 61(3):2267–2271, 2000c.

Lin, S. and Kernighan, B.W. An effective heuristic algorithm for the traveling-salesman problem. *Operations Research*, 21(2):498–516, 1973. doi:10.2307/169020.

Lindberg, D.C. Alhazen's theory of vision and its reception in the west. *Isis*, 58(3):321, 1967. doi:10.1086/350266.

Maillart, T., Sornette, D., Spaeth, S., and von Krogh, G. Empirical tests of zipf's law mechanism in open source linux distribution. *Physical Review Letters*, 101(21):218701, 2008. doi: 10.1103/PhysRevLett.101.218701.

Manna, S.S., Herrmann, H.J., and Landau1, D.P. A stochastic method to determine the shape of a drop on a wall. *Journal of Statistical Physics*, 66(3):1155–1163, 1992. doi:10.1007/BF01055723.

Martien, P., Pope, S., Scott, P., and Shaw, R. The chaotic behavior of the leaky faucet. *Physics Letters A*, 110(7-8):399 – 404, 1985. doi:DOI:10.1016/0375-9601(85)90065-9.

Marwan, N., Romano, M.C., Thiel, M., and Kurths, J. Recurrence plots for the analysis of complex systems. *Physics Reports*, 438(5-6):237 – 329, 2007. doi:DOI:10.1016/j.physrep.2006.11.001.

Masters, J.R. HeLa cells 50 years on: the good, the bad and the ugly. *Nat Rev Cancer*, 2:315–319, 2002.

Mathon, N.F., Malcolm, D.S., Harrisingh, M.C., Cheng, L., and Lloyd, A.C. Lack of Replicative Senescence in Normal Rodent Glia. *Science*, 291(5505):872–875, 2001. doi:10.1126/science.1056782.

McCay, C. and Crowell, M.F. Prolonging the life span. *The Scientific Monthly*, 39(5):405–414, 1934.

Mcculloch, W. and Pitts, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biology*, 5(4):115–133, 1943. doi:10.1007/BF02478259.

Medawar, P. *An Unsolved Problem in Biology*. H.K.Lewis, 1st edition, 1952.

Metropolis, N. The beginning of the monte carlo method. Technical Report LA-UR-88-9067, Los Alamos National Laboratory, 1987.

Metropolis, N. and Ulam, S. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247):335–341, 1949.

Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., and Teller, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, 1953. doi:10.1063/1.1699114.

Milgram, S. The small world problem. *Psychology Today*, 2(1):60–67, 1967.

Moss de Oliveira, S.M., de Oliveira, P.M.C., and Stauffer, D. *Evolution, Money, War, and Computers*. B.G. Teubner Stuttgart- Leipzig, 1999.

Mota, K.P. and de Oliveira, P.M.C. Monte carlo simulations for the slow relaxation of crumpled surfaces. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 387(24):6095 – 6104, 2008. doi: DOI:10.1016/j.physa.2008.07.001.

Muller, H.J. Some genetic aspects of sex. *The American Naturalist*, 66(703):118, 1932. doi:10.1086/280418.

Muller, H.J. The relation of recombination to mutational advance. *Mutat Res*, 106:2–9, 1964.

Muñoz, J.D. and Herrmann, H.J. Extending the broad histogram method for continuous systems. *Computer Physics Communications*, 121-122:13 – 15, 1999. doi:DOI:10.1016/S0010-4655(99)00268-4. Proceedings of the Europhysics Conference on Computational Physics CCP 1998.

Neumann, J. *Theory of Self-Reproducing Automata*. UMl Reprint University Illinois 1966 Ed, 1966.

Newman, M.E.J. Modularity and community structure in networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(23):8577–8582, 2006. doi:10.1073/pnas.0601602103.

Niewczas, E., Cebrat, S., and Stauffer, D. The influence of the medical care on the human life expectancy in 20th century and the penna ageing model. *Theory in Biosciences*, 119(2):122–131, 2000. doi:10.1007/s12064-000-0008-2.

Ogata, H., Tokuyama, K., Nagasaka, S., Ando, A., Kusaka, I., Sato, N., Goto, A., Ishibashi, S., Kiyono, K., Struzik, Z.R., and Yamamoto, Y. Long-range negative correlation of glucose dynamics in humans and its breakdown in diabetes mellitus. *Am J Physiol Regul Integr Comp Physiol*, 291(6):R1638–1643, 2006. doi: 10.1152/ajpregu.00241.2006.

Oliveira, P. *Computing Boolean Statistical Models*. World Scientific Pub Co Inc, 1991.

Onsager, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4):117–149, 1944. doi:10.1103/PhysRev.65.117.

Orgel, L.E. The maintenance of the accuracy of protein synthesis and its relevance to ageing. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 49:517–521, 1963.

Orr, W.C. and Sohal, R.S. Extension of life-span by overexpression of superoxide dismutase and catalase in drosophila melanogaster. *Science*, 263(5150):1128–1130, 1994. doi:10.1126/science.8108730.

Partridge, L. and Barton, N.H. Optimally, mutation and the evolution of ageing. *Nature*, 362(6418):305–311, 1993. doi:10.1038/362305a0.

Peng, C.K., Mietus, J., Hausdorff, J.M., Havlin, S., Stanley, H.E., and Goldberger, A.L. Long-range anticorrelations and non-gaussian behavior of the heartbeat. *Phys. Rev. Lett.*, 70(9):1343–1346, 1993. doi:10.1103/PhysRevLett.70.1343.

Peng, C.K., Buldyrev, S.V., Havlin, S., Simons, M., Stanley, H.E., and Goldberger, A.L. Mosaic organization of dna nucleotides. *Phys. Rev. E*, 49(2):1685–1689, 1994. doi:10.1103/PhysRevE.49.1685.

Penna, T.J.P. A Bit-String Model For Biological Aging. *Journal of Statistical Physics*, 78(5-6):1629–1633, 1995.

Penna, T.J.P. Fitting curves by simulated annealing. *Comput. Phys.*, 9(3):341–343, 1995. doi:http://dx.doi.org/10.1063/1.168533.

Penna, T.J.P. Traveling salesman problem and Tsallis statistics. *Physical Review E*, 51(1):R1–R3, 1995.

Penna, T.J.P. and de Oliveira, S. Exact Results of the Bit-string Model for Catastrophic Senescence. *Journal de Physique I*, 5(12):1697–1703, 1995.

Penna, T.J.P. and Oliveira, P.M.C. Simulations with a large number of neurons. *Journal of Physics A-Mathematical and General*, 22(14):L719–L721, 1989.

Penna, T.J.P. and Oliveira, P.M.C. Fully Parallel Code For Monte-Carlo Simulation. *Journal of Statistical Physics*, 61(3-4):933–941, 1990.

Penna, T.J.P. and Stauffer, D. Efficient Monte-Carlo Simulation of Biological Aging. *International Journal of Modern Physics C-Physics and Computers*, 6(2):233–239, 1995.

Penna, T.J.P. and Stauffer, D. Bit-string ageing model and German population. *Zeitschrift fur Physik B-Condensed Matter*, 101(3):469–470, 1996.

Penna, T.J.P., de Oliveira, P.M.C., Sartorelli, J., Goncalves, W., and Pinto, R. Long-range anticorrelations and non-gaussian behavior of a leaky faucet. *Physical Review E*, 52(3, Part A):R2168–R2171, 1995a.

Penna, T.J.P., de Oliveira, S., and Stauffer, D. Mutation accumulation and the catastrophic senescence of the pacific salmon. *Physical Review E*, 52(4, Part A):R3309–R3312, 1995b.

Penna, T.J.P., Racco, A., and Sousa, A. Can microscopic models for age-structured populations contribute to ecology? *Physica A*, 295(1-2):31–37, 2001.

Pinto, R.D. and Sartorelli, J.C. Homoclinic tangency and chaotic attractor disappearance in a dripping faucet experiment. *Phys. Rev. E*, 61(1):342–347, 2000. doi:10.1103/PhysRevE.61.342.

Pletcher, S.D., Houle, D., and Curtsinger, J.W. The evolution of age-specific mortality rates in drosophila melanogaster: Genetic divergence among unselected lines. *Genetics*, 153(2):813–823, 1999.

Podobnik, B. and Stanley, H.E. Detrended cross-correlation analysis: A new method for analyzing two nonstationary time series. *Physical Review Letters*, 100(8):084102, 2008. doi:10.1103/PhysRevLett.100.084102.

Pozrikidis, C. The deformation of a liquid drop moving normal to a plane wall. *Journal of Fluid Mechanics Digital Archive*, 215(-1):331–363, 1990. doi:10.1017/S0022112090002671.

Qin, W., Chachich, M., Lane, M., Roth, G., Bryant, M., de Cabo, R., Ottinger, M.A., Mattison, J., Ingram, D., Gandy, S., and Pasinetti, G.M. Calorie restriction attenuates Alzheimer's disease type brain amyloidosis in Squirrel monkeys (Saimiri sciureus). *J Alzheimers Dis*, 10:417–422, 2006.

Racco, A., de Menezes, M., and Penna, T.J.P. Search for an unitary mortality law through a theoretical model for biological ageing. *Theory in Biosciences*, 117(2):101–108, 1998.

Reimann, S. and Tupak, A. Prices are macro-observables! stylized facts from evolutionary finance. *Comput. Econ.*, 29(3-4):313–331, 2007. doi:http://dx.doi.org/10.1007/s10614-006-9065-z.

Reynolds, A., Swain, J., Smith, A., Martin, A., and Osborne, J. Honeybees use a levy flight search strategy and odour-mediated anemotaxis to relocate food sources. *Behavioral Ecology and Sociobiology*, 2007. doi:10.1007/s00265-009-0826-2.

Reynolds, A.M. and Frye, M.A. Free-flight odor tracking in drosophila is consistent with an optimal intermittent scale-free search. *PLoS ONE*, 2(4):e354, 2007. doi:10.1371/journal.pone.0000354.

Rodier, F., Campisi, J., and Bhaumik, D. Two faces of p53: aging and tumor suppression. *Nucl. Acids Res.*, 35(22):7475–7484, 2007. doi:10.1093/nar/gkm744.

Rose, Michael, Rauser, Casandra, Mueller, Laurence, Benford, and Gregory. A revolution for aging research. *Biogerontology*, 7(4):269–277, 2006. doi:10.1007/s10522-006-9001-6.

Rose, G.A. Cod spawning on a migration highway in the northwest atlantic. *Nature*, 366(6454):458–461, 1993. doi:10.1038/366458a0.

Salinas, S. *Introdução à Física Estatística*. EDUSP, 2nd edition, 2005.

Sartorelli, J.C., Gonçalves, W.M., and Pinto, R.D. Crisis and intermittence in a leaky-faucet experiment. *Phys. Rev. E*, 49(5):3963–3975, 1994. doi:10.1103/PhysRevE.49.3963.

Savage, V.M., Allen, A.P., Brown, J.H., Gillooly, J.F., Herman, A.B., Woodruff, W.H., and West, G.B. Scaling of number, size, and metabolic rate of cells with body size in mammals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(11):4718–4723, 2007. doi:10.1073/pnas.0611235104.

Shaw, R. *Dripping Faucet As a Model Chaotic System*. Aerial Pr, 1984.

Shi, X.D., Brenner, M.P., and Nagel, S.R. A Cascade of Structure in a Drop Falling from a Faucet. *Science*, 265(5169):219–222, 1994. doi:10.1126/science.265.5169.219.

Silveira, J.J., Espindola, A.L., and Penna, T.J.P. Agent-based model to rural-urban migration analysis. *Physica A*, 364:445–456, 2006. doi:{10.1016/j.physa.2005.08.055}.

Snoke, M.S. and Promislow, D.E.L. Quantitative genetic tests of recent senescence theory: age-specific mortality and male fertility in drosophila melanogaster. *Heredity*, 91:546–556, 2003. doi: doi:10.1038/sj.hdy.6800353.

Sousa, O.F., de Menezes, M.A., and Penna, T.J.P. Analysis of the package dependency on Debian GNU/Linux. *Journal Of Computational Interdisciplinary Sciences*, 1:127–133, 2009.

Speakman, J.R. Body size, energy metabolism and lifespan. *J Exp Biol*, 208(Pt 9):1717–1730, 2005. doi:10.1242/jeb.01556.

Stauffer, D., de Oliveira, S.M., de Oliveira, P., and Martins, J.S. *Biology, Sociology, Geology by Computational Physicists*. Elsevier Amsterdam, 1st edition, 2006.

Stauffer, D. World records in the size of simulated ising models. *Brazilian Journal of Physics*, 30:787–793, 2000.

Stauffer, D. and Aharony, A. *Introduction to percolation theory*. Taylor & Francis, London :, 2nd ed. edition, 1992.

Strehler, B.L. and Mildvan, A.S. General theory of mortality and aging. *Science*, 132(3418):14–21, 1960. doi:10.1126/science.132.3418.14.

Szilard, L. On the nature of the aging process. *Proc Natl Acad Sci U S A*, 45:30–45, 1959.

Szu, H. and Hartley, R. Fast simulated annealing. *Physics Letters A*, 122(3-4):157 – 162, 1987. doi:DOI:10.1016/0375-9601(87)90796-1.

Takens, F. Detecting strange attractors in turbulence. In D.A. Rand and L. Young, editors, *Dynamical Systems and Turbulence, Warwick, 1980, Lecture notes in mathematics vol. 898*, pages 366–381. Springer, Berlin, 1981.

Todaro, M.P. A model for labor migration and urban unemployment in less developed countries. *American Economic Review*, 59(1):138–48, 1969.

Tsallis, C. Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics. *Journal of Statistical Physics*, 52(1):479–487, 1988. doi:10.1007/BF01016429.

Tsallis, C. and Stariolo, D.A. Generalized simulated annealing. *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, 233(1-2):395 – 406, 1996. doi:DOI:10.1016/S0378-4371(96)00271-3.

Tsallis, C., Levy, S.V.F., Souza, A.M.C., and Maynard, R. Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of lévy distributions in nature. *Phys. Rev. Lett.*, 75(20):3589–3593, 1995. doi:10.1103/PhysRevLett.75.3589.

Verhulst, P.F. Notice sur la loi que la population suit dans son accrossement. *Corr. Math. Phys.*, 10:113–121, 1838.

Wachter, K.W. and Finch, C.E., editors. *Between Zeus and the Salmon: The Biodemography of Longevity*. National Academy Press, 1997.

Wallace, A.R. *Darwinism: An Exposition of the Theory of Natural Selection with Some of Its Applications*. Macmillan and Co. London and New York, 1st edition, 1889.

Ward, S.N. and Day, S. Particulate kinematic simulations of debris avalanches: interpretation of deposits and landslide seismic signals of mount saint helens, 1980 may 18. *Geophysical Journal International*, 167(2):991–1004, 2006.

Watts, D.J. and Strogatz, S.H. Collective dynamics of 'small-world' networks. *Nature*, 393(6684):440–442, 1998. doi:10.1038/30918.

Weismann, A. *Essays upon heredity and kindred biological problems*. Clarendon Press, 1st edition, 1889.

Williams, G.C. Pleiotropy, natural selection, and the evolution of senescence. *Evolution*, 11(4):398–411, 1957.

Wolfram, S. *A New Kind of Science*. Wolfram Media, Champaign, 2002.

Yamasaki, K., Gozolchiani, A., and Havlin, S. Climate networks around the globe are significantly affected by el ni[n-tilde]o. *Physical Review Letters*, 100(22):228501, 2008. doi:10.1103/PhysRevLett.100.228501.

Yashin, A.I., Begun, A.S., Boiko, S.I., Ukraintseva, S.V., and Oeppen, J. The new trends in survival improvement require a revision of traditional gerontological concepts. *Experimental Gerontology*, 37(1):157 – 167, 2001. doi:DOI:10.1016/S0531-5565(01)00154-1.

Yépez, N.H.N., Brito, S.A.L., Vargas, C.A., and Vicente, L.A. Chaos in a dripping faucet. *European Journal of Physics*, 10:99–105, 1989.

Zorn, R., Herrmann, H.J., and Rebbi, C. Tests of the multi-spin-coding technique in monte carlo simulations of statistical systems. *Computer Physics Communications*, 23(4):337 – 342, 1981. doi:DOI:10.1016/0010-4655(81)90174-0.

Índice Remissivo

Anderson et al. (2009), 103, 182
Azbel (1996), 117, 182
Azbel (1997), 15, 118, 119, 182
Bachelier (1900), 59, 182
Barabasi and Albert (1999), 69, 182
Barton (1990), 108, 182
Bonabeau et al. (1998), 148, 182
Bowden and Tabor (1950), 49, 182
Box et al. (1994), 137, 182
Brito and Gomes (1995), 49, 183
Carey et al. (1992), 96, 183
Carmi et al. (2007), 12, 82, 183
Caroli and Velický (2003), 49, 183
Charlesworth (2001), 106, 183
Chianca et al. (2005), 164, 183
Chianca et al. (2009), 10, 52, 53, 183
Cohen et al. (2000), 83, 183
Cohen et al. (2001), 83, 183
Cont and Bouchaud (2000), 59, 183
Copernici (1543), 28, 184
Creutz et al. (1979), 42, 184
Darwin (1859), 105, 184
De Menezes et al. (2000), 68, 184
Eckmann et al. (1987), 164, 185
Eigen (1971), 111, 185
Ekerdt (2002), 89, 185
Espindola et al. (2005), 56, 185
Espindola et al. (2006), 56, 185
Farmer et al. (1986), 111, 137, 185
Field and Stan (2008), 144, 186
Fisher (1998), 42, 186
Fontana et al. (2008), 104, 186
Galhardo et al. (2009), 150, 155, 186
Gelenbe and Loukas (2007), 83, 186
Geman and Geman (1984), 72, 186
Goldsmith (2008), 105, 186
Golubev (2009), 93, 186
Gompertz (1825), 93, 116, 186
Gong et al. (2006), 106, 186
Guillaume et al. (2006), 84, 187
Guyton and Hall (2000), 151, 187
H et al. (1987), 55, 58, 187
Harman (1956), 100, 187
Harman (1972), 101, 187

Harris and Todaro (1970), 54, 187
Hayflick (1965), 101, 187
Hebb (1949), 65, 187
Heumann and Hötzel (1995), 110, 187
Himberg et al. (2001), 170, 187
Holliday (1989), 104, 187
Hopfield (1982), 63, 187
Hunter and McIntosh (1999), 170, 188
Hutchings (2000), 127, 188
Ising (1925), 37, 140, 188
Jan (1994), 110, 188
Keller et al. (2008), 106, 188
Kirkpatrick et al. (1983), 72, 188
Kirkwood (1977), 109, 188
Kohring (1990), 66, 188
Lambeth (2007), 108, 188
Landau and Binder (2005), 9, 39, 42, 43, 46, 188
Latka et al. (2004), 155, 189
Levy et al. (2002), 92, 189
Lima et al. (1999), 47, 189
Lima et al. (2000a), 47, 189
Lima et al. (2000b), 47, 189
Lima et al. (2000c), 52, 189
Lin and Kernighan (1973), 74, 189
Lindberg (1967), 28, 189
Maillart et al. (2008), 76, 189
Manna et al. (1992), 139, 140, 189
Martien et al. (1985), 138, 190
Marwan et al. (2007), 164, 190
Masters (2002), 14, 101, 102, 190
Mathon et al. (2001), 103, 190
McCay and Crowell (1934), 103, 190
Mcculloch and Pitts (1943), 63, 190
Medawar (1952), 105, 110, 116, 190
Metropolis and Ulam (1949), 29, 190
Metropolis et al. (1953), 38, 190
Metropolis (1987), 29, 190
Milgram (1967), 67, 190
Moss de Oliveira et al. (1999), 110, 190
Mota and de Oliveira (2008), 143, 191
Muñoz and Herrmann (1999), 47, 191
Muller (1932), 115, 191
Muller (1964), 115, 191
Neumann (1966), 34, 191
Newman (2006), 77, 191
Niewczas et al. (2000), 124, 191
Ogata et al. (2006), 155, 191
Oliveira (1991), 43, 44, 191
Onsager (1944), 37, 38, 42, 191
Orgel (1963), 100, 192
Orr and Sohal (1994), 109, 192
Partridge and Barton (1993), 110, 192
Peng et al. (1993), 146, 192
Peng et al. (1994), 145, 153, 192
Penna and Oliveira (1989), 66, 192
Penna and Oliveira (1990), 45, 192
Penna and Stauffer (1995), 115, 193
Penna and Stauffer (1996), 15, 115, 116, 193
Penna and de Oliveira (1995), 132, 192
Penna et al. (2001), 129, 193
Penna et al. (1995a), 18, 144, 146, 193
Penna et al. (1995b), 17, 132, 193
Penna (1995), 74, 111, 114, 192
Pinto and Sartorelli (2000), 17,

139, 140, 193
Pletcher et al. (1999), 14, 106, 107, 193
Podobnik and Stanley (2008), 168, 169, 193
Pozrikidis (1990), 139, 193
Qin et al. (2006), 104, 193
Racco et al. (1998), 120, 194
Reimann and Tupak (2007), 62, 194
Reynolds and Frye (2007), 149, 194
Reynolds et al. (2007), 150, 194
Rodier et al. (2007), 108, 194
Rose et al. (2006), 93, 194
Rose (1993), 126, 194
Salinas (2005), 38, 194
Sartorelli et al. (1994), 138, 194
Savage et al. (2007), 13, 91, 194
Shaw (1984), 138, 195
Shi et al. (1994), 144, 195
Silveira et al. (2006), 56, 195
Snoke and Promislow (2003), 106, 195
Sousa et al. (2009), 76, 195
Speakman (2005), 90, 195
Stauffer and Aharony (1992), 59, 195
Stauffer et al. (2006), 123, 195
Stauffer (2000), 42, 195
Strehler and Mildvan (1960), 118, 195
Szilard (1959), 99, 195
Szu and Hartley (1987), 72, 195
Takens (1981), 166, 196
Todaro (1969), 54, 196
Tsallis and Stariolo (1996), 73, 196
Tsallis et al. (1995), 150, 196
Tsallis (1988), 150, 196
Verhulst (1838), 112, 196
Wachter and Finch (1997), 14, 98, 196
Wallace (1889), 105, 196
Ward and Day (2006), 52, 196
Watts and Strogatz (1998), 67, 196
Weismann (1889), 105, 196
Williams (1957), 106, 197
Wolfram (2002), 34, 35, 197
Yépez et al. (1989), 138, 197
Yamasaki et al. (2008), 167, 169, 197
Yashin et al. (2001), 16, 124, 125, 197
Zorn et al. (1981), 42, 197
de Lima et al. (1997), 142, 184
de Menezes et al. (1996), 129, 184
de Menezes et al. (2001), 68, 184
de Oliveira and Penna (1988), 9, 39, 43, 184
de Oliveira and Penna (1993), 18, 141, 143, 184
de Oliveira and Penna (1994), 141, 184
de Oliveira et al. (1995), 16, 128, 185
de Oliveira et al. (1996), 9, 47, 184
de Oliveira et al. (1997), 143, 185
de Oliveira et al. (1998), 47, 185
de Oliveira et al. (1999), 124, 185
de Souza et al. (2009), 135, 185
Dall'Asta et al. (2004), 81, 184

ações, 59
ajuste de curvas, 74
Alzheimer, 104
amostragem, 39
anticorrelação, 146
antioxidantes, 100
apoptose, 103, 108

automóveis, 98
automata, 34
avalanches, 52

bacalhau, 126
balanço detalhado, 41
browniano, movimento, 145
Buffon, 31

cérebro, 63
câncer, 103
Caenorhabditis elegans, 100
caixeiro viajante, 73
caminhante aleatório, 145
caos, 137, 139
catraca de Muller, 115
Cauchy, 73
Cell, 45
celulares, telefones, 170
corpo descartável, 109
cromossomo, 101
crossover, 154
cuidado parental, 105

desemprego, 55
desnervação, 154
DFA, 153
diabetes, 155
disposable soma, 109
distrofia miotônica, 108
DNA, 99
Drosophilas, 95, 109

Emergência, 34
ensemble canônico, 38
entropia, 37, 173
envelhecimento, 88
enxaquecas, 155
estacionaridade, 137
evolução, 104, 105
expectativa de vida, 89

fator logístico, 121
fibroblastos, 101
fitness, 92
flutuação, 145
flutuações, 145
fonemas, 170
formigas, 148

Gompertz-Makeham, 93, 115
GSA, 73
guerra cibernética, 81

Hayflick, limite de, 101
HeLa, 101
heterogeneidade, 119
heurísticas, 74
histogramas, 46
homeostase, 151

inbreeding, 106
inovação, 81
internet, 69
Ising, 37, 140

Lévy, distribuições de , 149
lagosta, 129
lei de potência, 59
livres de escala, 69
longevidade, 90
Lyapunov, 65

máxima expectativa, 89
médias móveis, 163
maturidade, 89, 90, 104, 109
Medicina, 123
memória, 145
memória associativa, 64
mercados, 60
Metropolis, algoritmo de , 38
migração, 54
mineração, 160
mitocôndrias, 101
Monte Carlo, 29

mortalidade, 92
morte programada, 101, 105
MRDT, 94
multispin, 42
mutações somáticas, 99
mutações, acúmulo de, 106

neurônios, 101
Nox, 108

outliers, 172

paralelismo, 37
parassimpático, 151
pardais, 106
percolação, 59
pesca, 127
plataforma petrolífera, 161
Playstations 3, 45
pleiotropia antagônica, 106
PLR, 170
população heterogênea, 120
populações homogêneas, 120
primeira passagem, 51

réplicas, 66
radiação, 99
radicais livres, 100, 108
reconexão, 68
recorrência, 164
rejeição, 30
restrição calórica, 92, 104

série temporal, 136
Saccharomyces cerevisiae, 102
salários, 54
salmão, 131
seleção natural, 105
senescência, 88
senescência catastrófica, 131
sensibilidade, 34
simpático, 151
simulated annealing, 74
sistema imunológico, 103
sistemas Booleanos, 35
supercentenários, 93
superposição, 34
SVM, 173

tamanho finito, 42
taxas metabólicas, 90
telômero, 102
temperatura crítica, 38
tendências, 137
teoria fenomenológica, 117
termo logístico, 112
terremotos, 52
testosterona, 108
tiras de bits, 111
torneira gotejante, 138
transição de fase, 38
transição de fase, 37
tratamento de óleo, 161

urbano, 54

varredura, 81
volatilidade”, 62

"Any inaccuracies in this index may be explained by the fact that it has been sorted with the help of a computer. "
Don Knuth, in "The Art of Computer Programming", vol III.