

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Dinâmica de domínios e difusão em autômatos celulares determinísticos \*

Ana Paula Oliveira Müller

Dissertação de mestrado realizada sob orientação do Prof. Dr. Jason A. C. Gallas e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento do requisito final para a obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre  
2008

---

\* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que colaboraram de alguma forma para que este trabalho fosse realizado. Em especial ao meu orientador, Jason Gallas, por tudo que aprendi com ele durante esse mestrado e, pela motivação e empenho com a pesquisa que sempre me transmitiu. Aos colegas de grupo, pelo auxílio na solução de problemas e dúvidas e aos colegas da pós-graduação, principalmente aos da sala M203.

Gostaria de agradecer principalmente aos meus pais pelo incentivo e apoio, mesmo quando a física parecia ser uma área muito estranha para eles. Também gostaria de agradecer ao meu marido, que sempre me apoiou e acreditou no meu trabalho, apesar de atuar em uma área bem diferente.

Agradecimentos especiais também vão ao CNPq pelo apoio financeiro no mestrado. Ao Centro Nacional de Supercomputação, CESUP-RS, onde simulei grande parte dos resultados obtidos. Agradeço também ao Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, por toda a infra-estrutura oferecida, que foi também essencial para a realização desse trabalho.

# Resumo

Estudamos autômatos celulares que apresentam quebra de simetria no diagrama espaço-temporal que permite visualizar estruturas e partículas que obedecem a um processo de difusão determinística. As regras que geram o mecanismo de difusão estudado neste trabalho, são regras de autômatos binários unidimensionais com vizinhança de três sítios, também conhecidas como regras elementares. Neste trabalho optamos por estudar a regra 18 por ser a mais discutida na literatura, porém existem outras regras elementares que apresentam o mesmo mecanismo de quebra de simetria.

Mostramos que as partículas difusivas observadas durante a evolução temporal, também chamadas de *kinks*, se comportam de maneira análoga aos *gliders* da regra 20, apresentando três escalas de tempo características durante a evolução temporal. Definimos um critério que permite detectar estas escalas de tempo, baseado na colisão e aniquilação dos kinks. Observamos que as escalas de tempo envolvidas na evolução temporal do autômato são afetadas pela densidade de kinks na condição inicial, que acelera ou retarda as interações entre as partículas. Como ocorre interação entre os kinks, determinamos como a difusão é afetada por estas interações.

O tipo de critério que definimos para a detecção das escalas de tempo do autômato revela propriedades a respeito do transiente, ele nada nos informa a respeito do regime periódico do autômato. Estudamos então o comportamento periódico, realizando estatísticas da distribuição dos períodos para tamanhos de rede pequenos. Encontramos poucos valores de período, sendo que os maiores períodos são múltiplos dos menores.

# Abstract

We study cellular automata which display symmetry breaking in the space-time diagram, allowing one to observe structures and particles which behave according to a deterministic diffusive process. The rules responsible for the diffusion mechanism are those of unidimensional, binary automata, also known as the elementary rules. While many elementary rules exist which present such symmetry breaking mechanism, we have opted to focus on rule 18, as it is the most widely discussed in the literature.

We show that the diffusive particles – called kinks – behave analogously as gliders in rule 20, presenting three distinct characteristic time scales. We propose a criterion which discriminates the different time scales, based on the kink's collision and annihilation. We observe that the time scales involved in the automata's temporal evolution are affected by the initial kink density, which accelerates or restrains the interactions between particles. As kinks interact, we determine how diffusion is affected by such interactions.

The criterion proposed to detect the time scales reveals properties of the initial transients, but provides no information concerning the final periodic regime. Thus, we study the final periodic behavior from distribution statistics for small lattice sizes. A striking result is that asymptotically one finds the presence of just a small number of residual periods, the larger ones being multiples of the smaller.

# Índice

<b>1. Introdução</b> . . . . .	1
<b>2. Conceitos básicos sobre autômatos celulares</b> . . . . .	5
2.1 Definições e exemplos . . . . .	5
2.2 As quatro classes de complexidade segundo Wolfram . . . . .	9
<b>3. Comportamento difusivo em autômatos celulares determinísticos</b> . . . . .	15
3.1 Domínios e partículas difusivas . . . . .	15
3.2 Escalas de tempo . . . . .	21
3.2.1 Critério para detecção das escalas de tempo . . . . .	24
3.3 Estudo da difusão na rede . . . . .	31
<b>4. Distribuição de períodos em autômatos elementares</b> . . . . .	35
4.1 Comportamentos periódicos característicos . . . . .	35
4.2 Estatística para redes pequenas . . . . .	39
4.3 Regularidades no período e aditividade . . . . .	47
<b>5. Conclusões</b> . . . . .	56
<b>A. Distribuições de períodos</b> . . . . .	60
<b>Referências</b> . . . . .	64

## Capítulo 1

# Introdução

Automatos celulares são sistemas dinâmicos constituídos por sítios arranjados em uma rede discreta, onde cada sítio desta rede assume um certo valor, que caracteriza o que se chama de *estado* do sítio. O estado de cada sítio evolui a passos temporais discretos e é definido por uma variável que assume valores *inteiros*. Por exemplo, nos autômatos *binários* o estado de um sítio num instante de tempo assume um de dois valores possíveis: 0 ou 1. A atualização dos sítios do autômatos se dá de maneira síncrona e de acordo com uma mesma *regra*. Tal regra depende do estado da vizinhança e do próprio sítio a ser atualizado. A regra de atualização pode ser *determinística*, quando a atualização depende apenas dos estados envolvidos, ou *probabilística*, quando a atualização envolve variáveis aleatórias. Neste trabalho consideramos apenas regras determinísticas.

Uma característica de grande utilidade é que os autômatos celulares são extremamente adequados para uma eficiente implementação computacional pois, por se tratarem de sistemas que envolvem variáveis discretas, não sofrem de nenhum problema de erros numéricos, tendo sempre sua evolução determinada de modo rigorosamente exato.

Diversos fenômenos físicos podem ser modelados utilizando autômatos celulares, especialmente sistemas que possuem um grande número de componentes similares interagindo localmente. Apesar de serem definidos de maneira simples, autômatos celulares são capazes de gerar comportamentos extremamente complexos. Eles são utilizados como modelos nas áreas de hidrodinâmica, dinâmica de populações, computação, reações químicas, geofísica,

sociologia, computação paralela, entre outras. Estas e muitas outras aplicações são discutidas na literatura, por exemplo em [1, 2, 3, 4, 5].

A evolução temporal de um autômato celular é definida por uma *regra*. A regra depende do valor do próprio sítio a ser atualizado, bem como dos valores de um determinado número de vizinhos deste sítio. O comportamento dinâmico observado será semelhante quando evoluímos o sistema por uma mesma regra, para diferentes tamanhos de rede e diferentes condições iniciais. Portanto a regra define como será a dinâmica do sistema.

É possível variar o número de estados que os sítios assumem, o alcance da regra e a dimensão do autômato. Quanto maiores estes fatores, mais complexa será a implementação computacional. Porém mesmo autômatos celulares com definições extremamente simples são capazes de apresentar comportamento complexo. Neste trabalho estudamos autômatos celulares com apenas dois estados possíveis por sítio, também chamados de *autômatos binários*. Utilizamos uma rede unidimensional com condições de contorno periódicas, nas quais o último sítio passa a ser vizinho do primeiro. Neste caso ao invés de uma linha de sítios o autômato pode ser visto como um anel.

No capítulo 2 fazemos uma breve revisão histórica sobre autômatos celulares, discutindo as primeiras idéias a respeito do assunto. A primeira proposta de uso de autômatos celulares para modelagem de sistemas foi feita von Neumann [6], e visava criar um sistema capaz de se auto-reproduzir baseado em sistemas biológicos. O sistema proposto por ele era extremamente complexo para ser implementado computacionalmente. Na direção contrária as propostas de autômatos extremamente complicados, encontramos o trabalho de Wolfram [7, 8] que estudou autômatos muito simples, binários e unidimensionais, capazes de gerar comportamentos bastante diversificados. Wolfram separou os comportamentos observados em *quatro classes* de complexidade, que discutiremos em detalhe. Três dessas classes possuem analogia com sistemas dinâmicos contínuos: ponto fixo, comportamentos periódicos e comportamentos caóticos. A quarta classe ainda permanece em discussão quanto a sua existência e complexidade das regras que a ela pertencem. Apesar da classificação proposta

por Wolfram ser qualitativa e de ainda apresentar alguns aspectos discutíveis e bastante controversos, ela tem o mérito de fornecer uma idéia geral do comportamento gerado pelas regras, na maioria dos casos. No capítulo 2 apresentamos em detalhes as regras 18 e 20, que formam a base dos fenômenos estudados nesta Dissertação.

No capítulo 3 discutimos uma quebra de simetria observada em algumas regras elementares de classe 3, que geram domínios e partículas difusivas (*kinks*) no diagrama espaço-tempo. Tais *kinks* marcam a fronteira entre dois domínios diferentes e deslocam-se com o passar do tempo, podendo se chocar e se aniquilar. Para o estudo das propriedades desta quebra de simetria utilizamos a regra 18, vista no capítulo 2. Com a identificação dos domínios e dos *kinks*, autômatos que aparentemente geram evoluções temporais caóticas tanto no espaço quanto no tempo, passam a exibir estruturas que permitem determinar comportamentos que não são observados quando não identificamos os domínios e os *kinks*.

A partir da observação (simulação numérica) dos domínios e dos *kinks*, determinamos a existência de três escalas de tempo bem características na evolução temporal da regra 18. Tais escalas tem forte relação com as observadas para a regra 20, um exemplo bem conhecido da classe 4, porém envolvendo uma vizinhança maior. Definimos um critério de detecção das escalas de tempo utilizando a presença dos *kinks* para isto. A partir deste critério podemos ver como o tipo de condição inicial gerada afeta a duração de cada regime temporal da regra 18. Estudamos também o deslocamento executado pelos *kinks* e como ele é afetado pelas interações entre os *kinks*.

Como as regras utilizadas são determinísticas e o autômato estudado tem tamanho finito, o regime periódico é inevitável. Apesar de inevitável, para algumas regras e tamanhos de sistema é necessário um número muito grande de passos temporais para que o sistema atinja o regime periódico. Apesar do autômato estudado ser de classe 3, conhecida por gerar padrões caóticos tanto no espaço quanto no tempo, é possível observar o comportamento periódico da regra 18. No capítulo 4 estudamos o comportamento periódico da regra 18.

Dividimos este estudo em dois casos, um onde ainda detectamos os *kinks* no regime

---

periódico e outro onde todos os kinks se aniquilaram e o sistema entra no regime periódico. Estudamos os valores de período encontrados quando utilizamos redes pequenas nos dois casos citados acima. Além disso, quando os kinks não se aniquilam, estudamos o movimento executado pelos kinks no regime periódico. Para o caso em que os kinks se aniquilaram completamente durante o transiente, o sistema apresenta uma redução drástica da complexidade que permite determinar seu comportamento pela regra 90, uma regra *aditiva* com propriedades especiais, gerando grandes regularidades no período e reduzindo a complexidade no modelo.

## Capítulo 2

# Conceitos básicos sobre autômatos celulares

*Neste capítulo apresentamos um pouco da história dos autômatos celulares e discutimos exemplos de regras que serão estudadas neste trabalho. Definimos o modo de apresentação das evoluções temporais e a numeração atribuída a cada regra. Também discutimos as quatro classes de complexidade de Wolfram, para classificar a dinâmica de autômatos celulares, apresentando exemplos de evoluções temporais geradas por regras de cada classe.*

### 2.1 Definições e exemplos

Apesar da idéia de criar um sistema discreto tanto no tempo quanto no espaço ser simples, as primeiras propostas sobre o assunto foram feitas na década de 50. *Ulam* estudou evoluções de construções gráficas geradas por regras simples no que ele chamou de “cellular spaces” (espaços celulares) [9]. Estes espaços consistiam de redes bidimensionais com células que podiam assumir apenas dois estados. *Ulam* notou que, apesar de possuir uma definição simples, este tipo de modelo era capaz de gerar grande complexidade.

Por outro lado, *von Neumann* estudava um modelo que fosse capaz de se auto-reproduzir. Paralelamente à proposta dos espaços celulares de *Ulam*, *von Neumann* propôs em 1952 um autômato em duas dimensões e com 29 estados por célula. O estado de cada célula evoluía

de acordo com o estado da vizinhança por regras complicadas, baseadas nas interações necessárias para a evolução de formas complexas de organização essenciais para a vida [6]. Este foi o primeiro modelo paralelo discreto para o qual foi formalmente demonstrado ser um computador universal.

Em 1970, *Conway* propôs um autômato binário, bidimensional e com regras simples, mas com comportamento complexo, denominado “game of life” [10]. Este autômato ficou muito conhecido por apresentar comportamentos envolvendo por vezes flutuações aleatórias e outros estados ordenados. Também foi observada a ocorrência de *gliders*, arranjo de células capaz de se deslocar pela rede. A partir da colisão dos gliders o autômato seria capaz de realizar computação, cada glider representando uma informação, que durante a colisão interagem, resultando em um novo glider, representando uma nova informação. A partir daí iniciou-se a discussão sobre autômatos celulares simples serem capazes de emularem uma máquina de Turing.

Na década de 80, *Wolfram* publicou os primeiros trabalhos investigando autômatos celulares mais básicos, envolvendo uma rede unidimensional com grau de liberdade binário [7, 8, 11]. Ele fez um estudo qualitativo sobre o comportamento gerado pelas regras destes autômatos e propôs uma classificação dos comportamentos em quatro classes de complexidade. As três primeiras classes possuem análogos em sistema contínuos, enquanto a quarta classe não possui análogo nos sistemas contínuos e ainda tem sua existência controversa. Na próxima seção discutiremos em detalhe as quatro classes de complexidade. As regras de autômatos unidimensionais binários que estudamos neste trabalho são do mesmo tipo das estudadas por *Wolfram* em [7, 8].

No caso de autômatos unidimensionais binários é comum definir regras que dependam de diferentes tamanhos de vizinhança, que também chamamos de alcance da regra  $r$ . O tipo mais simples de regra neste caso é a que envolve apenas um sítio de cada lado além do sítio central, tendo alcance  $r = 1$ . Essas regras foram chamadas de *regras elementares* [7]. Apesar de serem estudadas há bastante tempo, ainda restam várias questões em aberto

com publicações recentes a respeito do assunto [12, 13, 14, 15, 16]. Conforme mencionado anteriormente, uma regra é uma função  $F$  dos valores  $S_i$  dos sítios da vizinhança. Isto nos permite representar a evolução temporal da seguinte forma:

$$S_i(t+1) = F(S_{i-1}(t), S_i(t), S_{i+1}(t)) \quad (2.1.1)$$

Para compactar a definição, a cada regra é atribuído um número. Para definir tal número devemos obter todas as combinações possíveis de vizinhança, que no caso das regras elementares são oito, e então definir quais vizinhanças levam o sítio central ao valor 1 ou ao valor 0. Abaixo temos um esquema com todas as vizinhanças possíveis acompanhadas do índice  $a_i$ , que indica se o sítio assume valor 1 ou 0 quando possuir a vizinhança  $i$ :

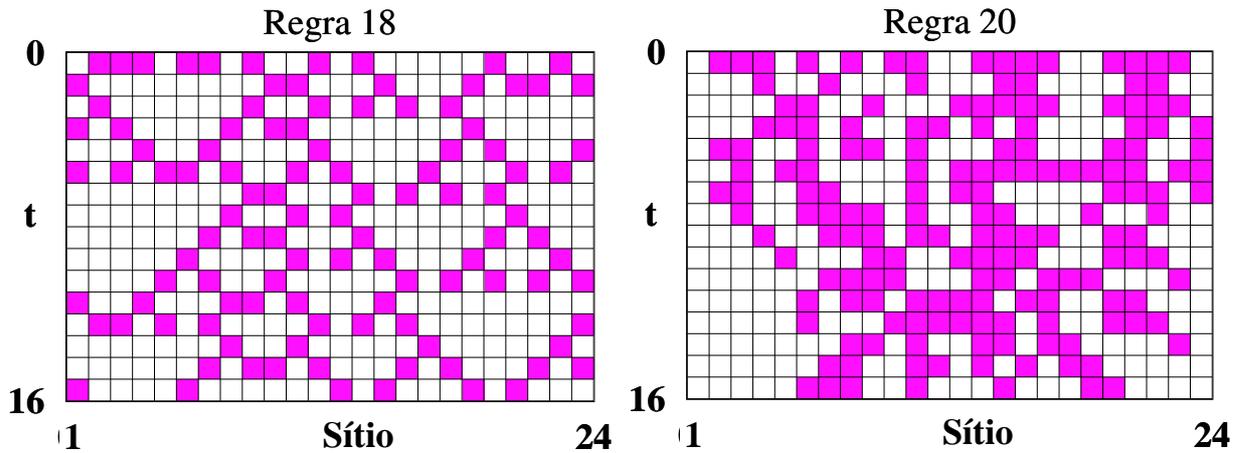
$$\begin{array}{cccccccc} 111 & 110 & 101 & 100 & 011 & 010 & 001 & 000 \\ a_7 & a_6 & a_5 & a_4 & a_3 & a_2 & a_1 & a_0 \end{array}$$

O número da regra é obtido então pela seguinte expressão:

$$\text{REGRA} = 2^7 \cdot a_7 + 2^6 \cdot a_6 + 2^5 \cdot a_5 + 2^4 \cdot a_4 + 2^3 \cdot a_3 + 2^2 \cdot a_2 + 2^1 \cdot a_1 + 2^0 \cdot a_0 \quad (2.1.2)$$

A regra 18 cuja representação binária é 00010010, i.e. tem  $a_4 = a_1 = 1$  e  $a_i = 0$  para os demais valores de  $i$ , leva o sítio central ao valor 1 se a vizinhança for igual a 100 ou 001. Escreve-se então o número da regra como  $2^4 + 2^1 = 18$ . A partir de todas as combinações dos valores  $a_i$ , é possível gerar 256 regras.

Em [7] foram impostas duas restrições para as regras elementares, a fim de restringir o número de regras e principalmente dar mais sentido físico ao sistema. As restrições impostas podem ser estendidas para qualquer tipo de regra. Uma das restrições impostas é que  $a_0$  seja igual a 0, garantindo que o sistema conserva o estado nulo, ou seja, quando na condição inicial o sistema possuir todos os sítios nulos ele se mantém neste estado sempre. Com esta restrição também remove-se a simetria no tratamento dos valores 0 e 1. Outra restrição imposta é que o sistema deve ter simetria de reflexão, ou seja,  $a_6 = a_3$  e  $a_4 = a_1$ , pois



**Figura 2.1:** Exemplos de diagramas espaço-tempo gerados pelas regras 18 (elementar) e 20 (totalística -  $r = 2$ ). O tempo está na direção vertical e evolui para baixo, os sítios iguais a 1 são pintados de rosa e os iguais a 0 ficam em branco. Utilizamos nesta figura, assim como em todo o trabalho, condições de contorno periódicas.

quando refletimos a configuração da vizinhança o resultado obtido deve ser o mesmo. Das 256 regras possíveis, existem apenas 32 que obedecem as restrições impostas acima que são conhecidas por *regras legais*. Apesar destas restrições darem mais sentido físico ao sistema, existem diversos estudos envolvendo regras não-legais, especialmente a respeito da regra 110 [15, 17, ?], que é candidata a pertencer à classe 4.

Outro tipo simples e bastante estudado de regra binária unidimensional, são as regras *totalísticas*, que apresentam alcance de dois vizinhos ( $r = 2$ ). Neste caso a atualização do sítio central não depende da *configuração* da vizinhança e sim da *soma* dos valores dos sítios da vizinhança. Esta regra realiza uma espécie de média sobre os valores da vizinhança não levando em conta a posição de cada valor. Neste caso o número da regra é definido a partir de todos os valores de soma que fazem o sítio central assumir valor 1. Por exemplo na regra 20 estes valores são 2 e 4, o número da regra é escrito então como  $2^4 + 2^2 = 20$ . As regras totalísticas com  $r = 2$  foram estudadas pela primeira vez por Wolfram em [8], onde foram apresentadas as quatro classes de complexidade.

Um ponto importante a ser discutido inicialmente é a forma como vamos apresentar a evolução temporal dos autômatos estudados neste trabalho. Para isto, geramos diagramas

espaço-tempo, como os que estão na figura 2.1. Nestes diagramas o tempo está na vertical e flui de cima para baixo. Colorimos de rosa os sítios que assumem valor igual a 1 e de branco os sítios com valor igual a 0. Apresentamos na figura 2.1 dois diagramas espaço-tempo, um gerado pela regra 18 (elementar) e outra pela regra 20 (totalística -  $r = 2$ ) definidas anteriormente.

As regras que serão estudadas neste trabalho serão dos dois tipos discutidos: as regras elementares com  $r = 1$  e as regras totalísticas com  $r = 2$ . É claro que existem inúmeras possibilidades para definir uma regra para autômatos celulares, mantendo ainda uma rede unidimensional. Os sítios podem assumir mais de dois estados, deixando assim de se trabalhar com autômato binário e, além disso, podemos utilizar regras que dependam de um número maior de vizinhos. Este tipo de regra é útil quando se quer reproduzir o comportamento de um sistema que apresenta mais de uma configuração possível para os sítios, ou nos quais as células elementares tenham uma interação de maior alcance do que apenas com os vizinhos mais próximos.

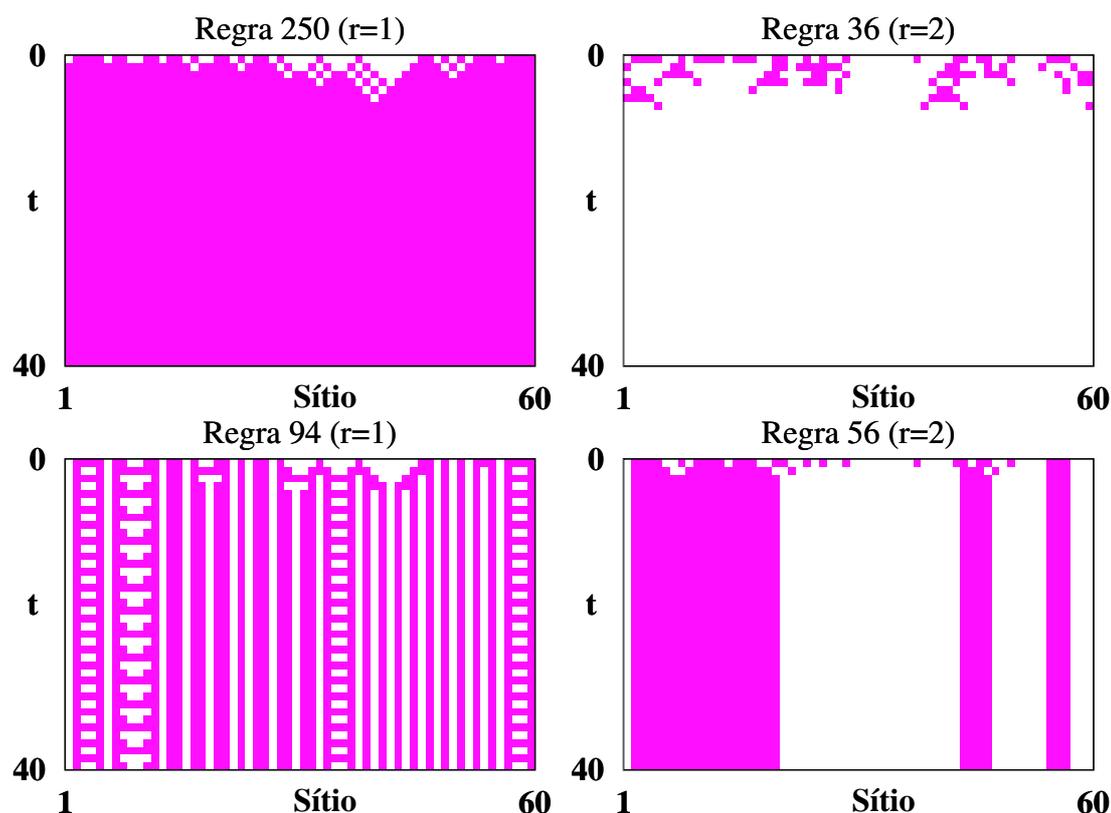
## 2.2 As quatro classes de complexidade segundo

### Wolfram

A evolução temporal de um autômato celular pode apresentar comportamentos mais ou menos variados, dependendo da regra utilizada para executar esta evolução. Existem regras que levam ao estado homogêneo, onde todos os sítios assumem o mesmo valor, enquanto outras, por exemplo, podem gerar padrões “caóticos”. Note que no caso dos autômatos estudados não encontramos de fato comportamento caótico, pois o autômato é determinístico e possui um número finito de estados, sendo inevitável o regime periódico. Porém em alguns casos, o sistema gera padrões espaço-temporais desordenados e que levam um número não computável de passos temporais para atingir o regime periódico, e o comportamento do autômato é chamado de caótico.

A princípio, antes de executar a evolução temporal por uma determinada regra não temos como saber o tipo de comportamento que esta vai gerar. Note que estamos trabalhando com regras que dependem do mesmo tamanho de vizinhança. O grau de liberdade que temos é alterar as configurações que levam o sítio central ao valor 1. Observando a variedade de comportamentos que as regras dos autômatos celulares podem apresentar, Wolfram propôs uma classificação para as regras de autômatos celulares [8]. A classificação proposta foi simplesmente qualitativa, baseada no aspecto do diagrama espaço-tempo gerado por determinada regra. Ele sugeriu que o comportamento dinâmico observado em autômatos celulares se divide em quatro classes, de complexidade crescente. São elas:

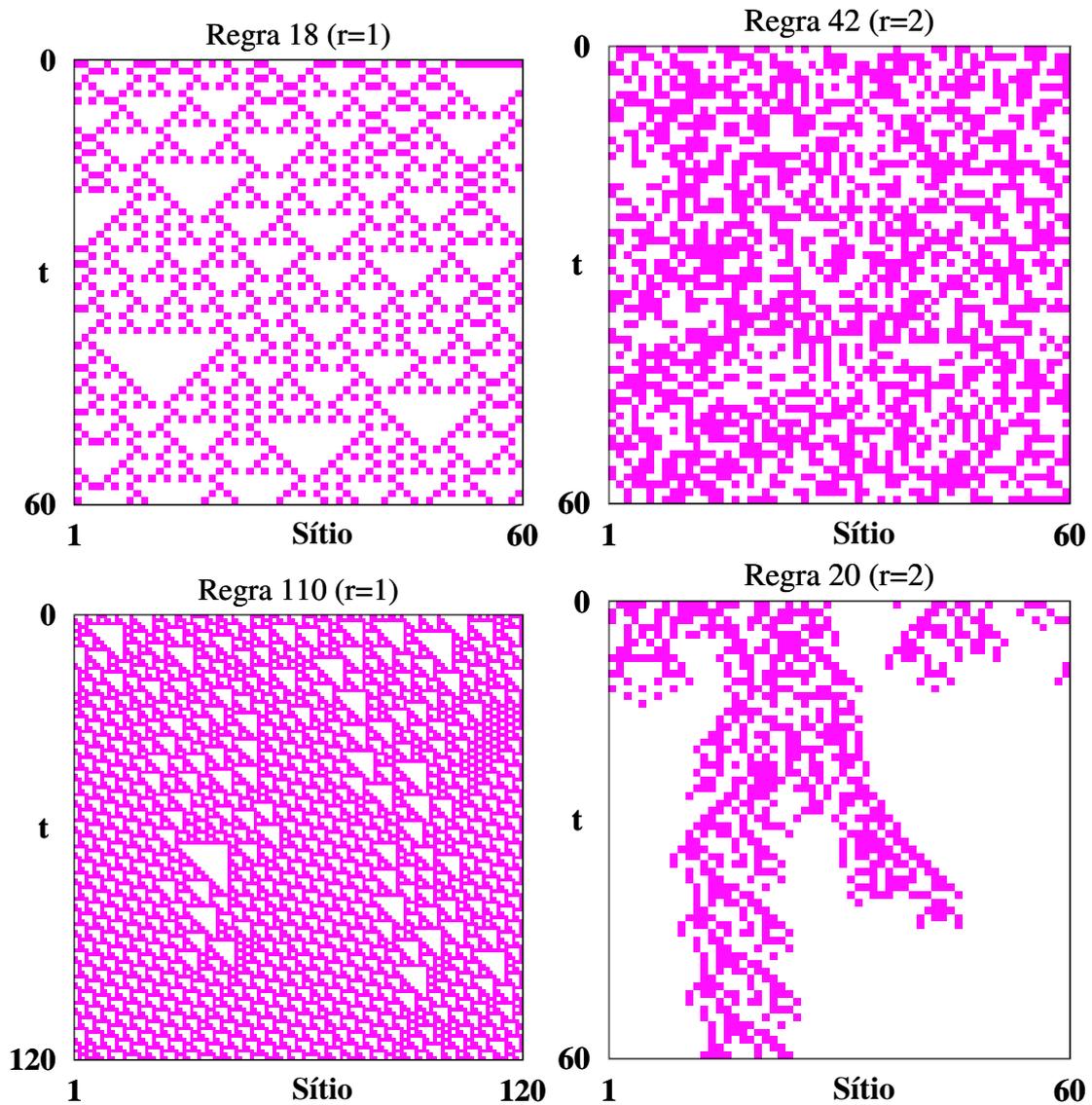
1. Classe 1: A evolução temporal leva o sistema a estados homogêneos, onde todos os sítios assumem o mesmo valor. Todas as inhomogeneidades geradas desaparecem com o tempo, e mudanças na condição inicial não afetam o estado final do sistema. Esta classe de comportamento tem como análogo nos sistemas dinâmicos tradicionais a evolução para um ponto fixo;
2. Classe 2: A evolução temporal gera um conjunto de estruturas separadas e simples. Os padrões encontrados possuem tamanhos finitos e são localizados no espaço. Modificações na condição inicial alteram a configuração de apenas uma região pequena do autômato. A classe 2 tem como análogos nos sistemas dinâmicos a evolução para ciclos limites;
3. Classe 3: A evolução temporal gera padrões “caóticos” tanto no espaço quanto no tempo, que crescem indefinidamente a uma taxa constante. Alterações na condição inicial em geral afetam uma região que também aumenta indefinidamente com o tempo. Esta classe possui comportamento análogo ao observado nos sistemas dinâmicos com atratores caóticos;
4. Classe 4: A evolução temporal gera estruturas complexas de tamanho finito que crescem e contraem com o tempo. As estruturas podem viajar dentro do autômato in-



**Figura 2.2:** Exemplos de evoluções temporais por regras de classe 1 e 2. As duas figuras superiores são geradas por regras de classe 1 e as inferiores por regras de classe 2. Usamos condições de contorno periódicas.

teragindo entre si. Alterações na condição inicial causam alterações em regiões de tamanhos variados. Para esta classe não foi possível fazer qualquer analogia com sistemas dinâmicos tradicionais.

Nas figuras 2.2 e 2.3 mostramos dois exemplos de regras de cada classe. Para cada classe mostramos uma regra elementar ( $r = 1$ ) e uma regra totalística ( $r = 2$ ), assim podemos ver que dentro de uma classe, mesmo que a dependência da regra em relação à vizinhança seja diferente, o comportamento assintótico observado é idêntico. Na figura 2.2, para as regras de classe 1 (250 e 36), escolhemos um exemplo de regra que leva o sistema para o estado homogêneo com todos os sítios iguais a 1 e outro para o estado homogêneo com todos os sítios iguais a 0. É importante ressaltar que o estado assintótico do sistema neste caso é determinado pela regra e não pela condição inicial escolhida.



**Figura 2.3:** Regras que pertencem às classes 3 e 4. As duas figuras superiores são geradas por regras de classe 3 e as inferiores por regras de classe 4. As duas regras de classe 4 apresentadas geram estruturas em fundos diferentes: a regra 20 no fundo branco e a regra 110 (regra não-legal) em um fundo com triângulos. Usamos condições de contorno periódicas.

Ainda na figura 2.2 mostramos alguns tipos de estruturas geradas pelas regras de classe 2 (94 e 56). Vemos que estas estruturas podem ser blocos de sítios iguais a 1 e com período temporal igual a 1, como ocorre para a regra 56. Mas também podemos encontrar estruturas com período maior, como para a regra 94, onde vemos dois tipos de estruturas com períodos diferentes, mas que não interagem como ocorre no caso de regras da classe 4.

Já na figura 2.3 ilustramos as regras de comportamento complexo. No caso das regras de classe 3 (18 e 42), vemos que ambas evoluções aparecem desordenadas. Na figura da regra 18 é possível visualizar triângulos dispostos de maneira irregular, enquanto que para a regra 42 nem mesmo este tipo de estrutura é possível de ser visualizada. Ainda na figura 2.3 vemos dois exemplos de regras da classe 4 (110 e 20). Cada regra desta classe gera estruturas se propagando em um fundo, que no caso da regra 20 é composto por 0 e no caso da regra 110 é composto por uma estrutura periódica de triângulos. Porém em alguns casos são encontradas estruturas da regra 20 que preenchem todo espaço [19]. As estruturas geradas por regras de classe 4, segundo Wolfram [8], são capazes de interagir processando a informação que elas transportam, sendo as regras de classe 4 capazes de executar computação universal. Recentemente foi proposta uma prova da universalidade da regra 110 [17].

A classe 4 ainda é muito controversa, pois apesar de passadas mais de duas décadas da primeira proposta de sua existência e de diversos trabalhos sobre o assunto, ainda não existe uma definição precisa para esta classe e não foram encontradas propriedades mensuráveis que pudessem ser utilizadas para definir sem ambigüidade se uma dada regra pertence à classe 4. Até mesmo a existência de comportamentos de classe 4 é questionável pois, após um tempo suficientemente longo, os padrões gerados podem se aniquilar totalmente recaindo na classe 1, ou podem ficar localizados no espaço recaindo na classe 2 [20].

Foram publicados diversos trabalhos propondo critérios medidos a partir da evolução temporal do autômata tentando classificar as regras de autômatos celulares [21, 22, 23, 24]. Porém nenhum critério mostrou-se conclusivo e sempre apresentou casos de fronteira onde

não fica decidida sem ambigüidade para algumas regras à qual classe elas pertencem.

Neste trabalho vamos estudar regras da classe 3, em especial a regra 18, que se analisado o diagrama espaço-tempo de forma adequada, permite traçar um paralelo do seu comportamento com o da regra 20. Apesar de apresentar um diagrama espaço-tempo aparentemente desordenado, as regras que estudamos aqui geram estruturas que, quando identificadas da maneira conveniente, também interagem entre si, gerando escalas de tempo na evolução temporal de natureza idêntica às observadas para a regra 20. Porém estas estruturas são mais complexas que as geradas nas evoluções temporais das regras apresentadas neste capítulo.

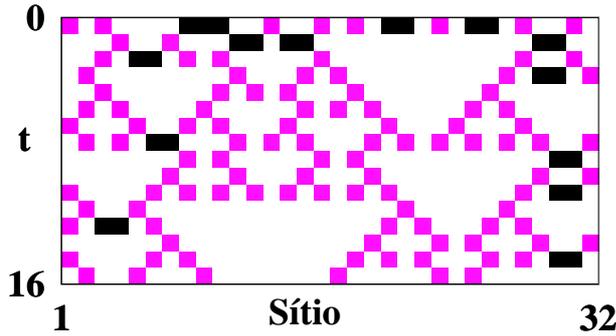
## Capítulo 3

# Comportamento difusivo em autômatos celulares determinísticos

*Neste capítulo discutimos regras elementares que geram domínios e partículas difusivas (kinks) durante a evolução temporal do autômato celular. Mostramos que os domínios e partículas gerados por este tipo de regra apresentam três regimes temporais, dois durante o transiente e um regime periódico final. Este fato põe a regra 18 em pé de igualdade com a regra 20, de classe 4, de maior complexidade, e envolvendo cinco vizinhos. Introduzimos um critério simples para a detecção das escalas temporais, baseado na aniquilação das partículas difusivas geradas. Argumentamos que, mesmo envolvendo apenas três vizinhos, a regra 18 tem dinâmica mais rica que, por exemplo, a regra 20, e é um sistema interessante a ser explorado.*

### 3.1 Domínios e partículas difusivas

Há alguns anos, *Grassberger* [25, 26] observou que, quando olhada de um certo modo, a evolução temporal da regra 18 apresenta uma clara estrutura de *domínios*, separados por partículas difusivas chamadas de *kinks*. Tais kinks foram identificados por *Grassberger* através da ocorrência de pares  $[(S_i, S_{i+1}) = (1, 1)]$  na rede. Em outras palavras, um kink é formado por dois sítios adjacentes no estado 1, como ilustrado na figura 3.1 pela dupla cor preto. Como se percebe da figura, os kinks deslocam-se na rede, aparentemente de forma



**Figura 3.1:** Evolução temporal gerada pela regra 18, indicando pela cor branca o estado 0, pela cor rosa o estado 1 e em preto duplas adjacentes de estados 1. A posição dos kinks varia com o passar do tempo, podendo simular processos difusivos.

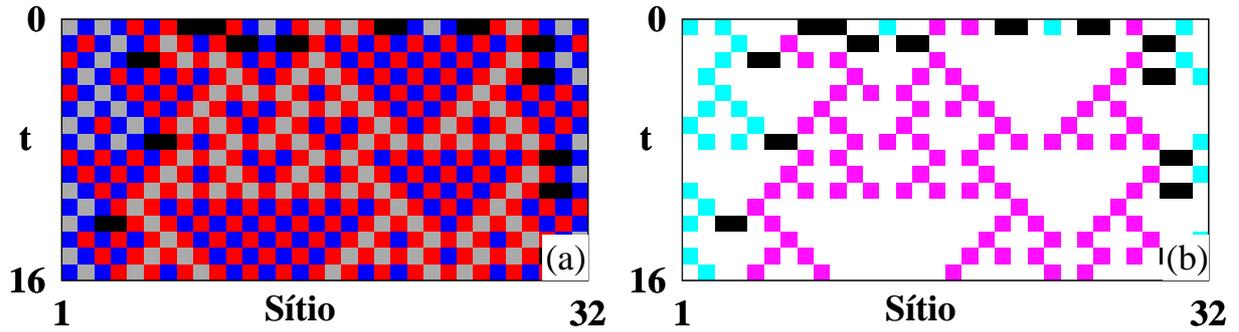
aleatória, e delimitam duas regiões. Uma região no centro do autômato e a outra nas laterais com continuidade devido a condições de contorno periódicas.

As duas regiões delimitadas pelos kinks são domínios formados por dois conjuntos de estados ordenados que não se misturam durante a evolução temporal. Por não se misturarem, os conjuntos de estados ordenados formam domínios. Em duas oportunidades [25, 26], Grassberger definiu os conjuntos de estados ordenados como:

$$\begin{aligned}
 \text{Conjunto I: } & S_i(t) = 0 \quad \text{quando } i + t \text{ par,} \\
 \text{Conjunto II: } & S_i(t) = 0 \quad \text{quando } i + t \text{ ímpar.}
 \end{aligned}
 \tag{3.1.1}$$

Na figura 3.2(a) colorimos os sítios iguais a 0 de acordo com a natureza par ou ímpar do índice  $i + t$ , conforme a definição de Grassberger. Para  $i + t$  par, colorimos de azul (conjunto I) os sítios nulos, e para  $i + t$  ímpar colorimos de vermelho os sítios nulos (conjunto II). Nos sítios iguais a 1, utilizamos a cor cinza. Além disso, assim como na figura 3.1, colorimos os sítios que compoem os kinks de preto. As definições dos conjuntos I e II dadas na equação 3.1.1 sugerem diferenciar os sítios iguais a 0, para que seja possível identificar claramente os domínios no diagrama espaço-tempo.

O que se vê na figura 3.2(a), serviu de base para Grassberger para argumentar que é possível notar diferenças entre o domínio central e o domínio das laterais. No domínio central notamos existir um xadrez sem falhas de sítios vermelhos e nas laterais um xadrez sem falhas de sítios azuis. Isto sugere que no domínio central nenhum sítio com índice  $i + t$  ímpar tem valor igual a 1, e no domínio das laterais nenhum sítio com índice  $i + t$  par tem



**Figura 3.2:** Evoluções temporais pela regra 18 com domínios identificados de duas maneiras diferentes. Figura (a) usamos as definições em 3.1.1 e propostas por Grassberger [25]. Já na figura (b) identificamos os domínios a partir das definições que propomos em 3.1.2. Vemos que a noção dos domínios é muito mais clara na figura (b) do que na figura (a).

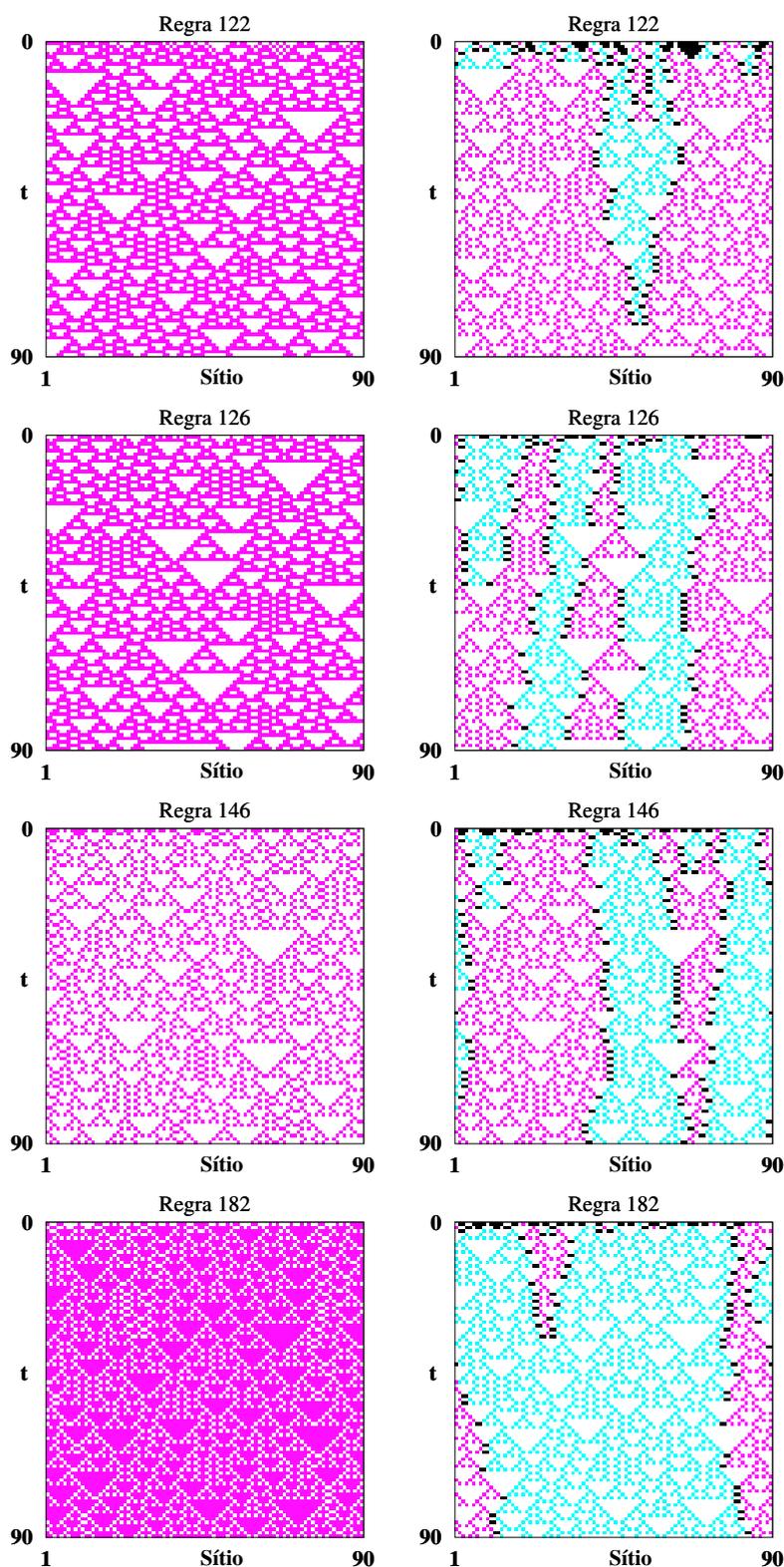
valor igual a 1. Na interface das estruturas xadrez temos os kinks.

Sendo assim, como em cada domínio identificamos sítios que são sempre nulos de acordo com a natureza par ou ímpar de  $i + t$ , achamos conveniente introduzir outra definição cujo mérito é permitir identificar com mais clareza os dois domínios e ressaltar a localização dos kinks. Diferenciamos os domínios a partir dos sítios que assumem valor 1, e não mais como feito na equação 3.1.1, pelos sítios que assumem valor 0:

$$\begin{aligned}
 \text{Conjunto I: } & S_i(t) = 1 \quad \text{quando } i + t \text{ par,} \\
 \text{Conjunto II: } & S_i(t) = 1 \quad \text{quando } i + t \text{ ímpar.}
 \end{aligned}
 \tag{3.1.2}$$

Com esta nova definição geramos a figura 3.2(b), diferenciando desta vez sem ambiguidades os sítios iguais a 1 de acordo com a paridade da soma  $i + t$ . Para  $i + t$  ímpar, utilizamos a cor azul claro e, para  $i + t$  par a cor rosa. Vemos que na figura 3.2(b) é mais fácil identificar os domínios separados pelos kinks do que na figura 3.2(a). Além disso, a idéia de conjuntos que não se misturam fica óbvia no caso da definição de conjuntos dada em 3.1.2, pois dentro de um domínio temos sítios que pertencem a apenas um conjunto.

Domínios e partículas difusivas não ocorrem apenas para a regra 18. Por exemplo, os domínios e kinks observados na regra 18 podem ser identificados também nas regras elementares ( $r = 1$ ) 122, 126, 146 e 182, que pertencem à classe 3. No caso da regra 146,



**Figura 3.3:** Exemplos de regras elementares ( $r = 1$ ) de classe 3 que geram domínios e partículas difusivas assim como a regra 18. À esquerda não marcamos os domínios e nem os kinks e na direita colorimos os sítios para mostrar como o emprego da definição dada na equação 3.1.2 faz aparecer claramente os domínios e os kinks. Este fato permite-nos agora investigar propriedades estatísticas para várias regras cujo tratamento era anteriormente inacessível.

os dois conjuntos de sítios são definidos na mesma forma que foi para a regra 18. Já no caso das regras 122 e 126 a evolução temporal gerada é mapeada de modo a gerar uma evolução executada pela regra 18, então os sítios são coloridos da mesma forma que é feito para a regra 18. O mesmo ocorre para a regra 182 que tem seus valores mapeados em uma evolução segundo a regra 146.

Na figura 3.3, mostramos exemplos de evoluções pelas outras regras citadas acima e que apresentam domínios. Na coluna da esquerda apresentamos a evolução na forma convencional, sem marcar os kinks ou os domínios, e na direita realizamos as transformações necessárias e colorimos os sítios para definir os domínios de forma equivalente à que foi feita na figura 3.2(b). A geração de domínios portanto é abundante entre os autômatos celulares elementares; existem nove regras que apresentam comportamento complexo (classe 3 ou 4), e cinco delas: 18, 122, 126, 146 e 182 geram este tipo de estrutura.

A identificação de estruturas como domínios e partículas em evoluções temporais por regras que geram padrões “caóticos” tanto no espaço quanto no tempo, permite visualizar o que está ocorrendo na evolução temporal. Por exemplo, podemos visualizar colisões entre partículas, ou o crescimento ou desaparecimento de fases (domínios), observando fenômenos que sem a separação em conjuntos dos sítios do autômato não eram possíveis de ser observados. Também as partículas que delimitam os domínios se propagam no espaço e são análogas aos gliders observados para as regras de classe 4. A ocorrência de domínios e partículas foi discutida em vários aspectos após a primeira observação deste fenômeno, realizada em 1983 por Grassberger [25].

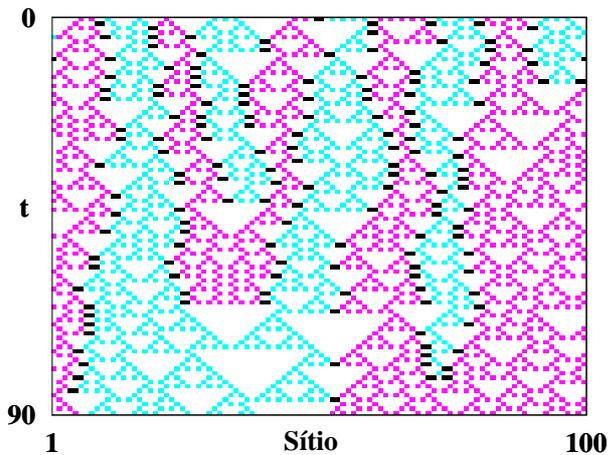
Além de identificar pela primeira vez para a regra 18 os domínios em [25, 26], Grassberger estudou o movimento e determinou o coeficiente de difusão dos kinks na rede, que será discutido em detalhes na seção 3.3. Porém foi *Eloranta* [27] quem desenvolveu uma teoria matemática rigorosa a respeito do movimento de um kink, mostrando que um kink isolado na rede executa uma caminhada aleatória. Após esta primeira proposta de partículas e domínios em diagramas espaço-tempo de autômatos celulares complexos, outros trabalhos

foram realizados sobre o assunto. Foram apresentadas outras regras que geram outras partículas, que nem sempre apresentam o comportamento difusivo observado para os kinks e além disso não possuem estrutura simples como a dos kinks [28, 29, 30, 31, 32].

*Boccara and Roger* [28] e *Boccara et al.* [29] estudaram regras capazes de gerar partículas difusivas e não-difusivas. Entre as regras que geram partículas difusivas estudadas por eles está a regra 30 (totalística com  $r = 2$ ), mostrando que as partículas difusivas presentes na regra 18 não se restringem a regras elementares. Outro comportamento interessante foi observado para a regra 54, que gera partículas não-difusivas, caracterizadas por executarem deslocamentos com uma direção e sem aparência aleatória. Além disso as partículas não-difusivas apresentam diversas possibilidades de interação, podendo a partir destas interações gerar outras partículas. Por gerar partículas que realizam vários tipos de interação, as partículas da regra 54 podem representar um processamento de informação. Devido a esta característica, a regra 54 ainda tem sua classificação disputada entre classe a 3 e classe a 4 [12, 33]. Este tipo de dinâmica, onde encontramos regularidades como domínios e partículas imersas no caos, dificulta enormemente a classificação correta e única das regras complexas [12].

Do ponto de vista matemático, foram realizados estudos a respeito do movimento dos vários tipos de partículas observados nas regras complexas, que neste contexto também foram chamadas de *defeitos*. *Pivato* [30, 31] publicou recentemente dois trabalhos que apresentam um estudo matemático sobre o movimento de partículas em autômatos celulares unidimensionais.

Na tentativa de identificarem estruturas regulares em regras complexas, *Shalizi et al.* [32] propuseram um filtro aplicável a qualquer regra complexa, capaz de identificar domínios e estruturas no diagrama espaço-tempo de regras que geram padrões caóticos. Este trabalho não discutiu a ocorrência de partículas, porém identificou estruturas similares a domínios. Apesar de aplicável a várias regras, o mecanismo de identificação de domínios não possui uma definição simples como a utilizada aqui para marcar os domínios da regra 18.



**Figura 3.4:** Diagrama espaço-tempo da regra 18 com vários kinks na condição inicial. Note que quando ocorre a colisão entre as paredes de dois domínios, os kinks se aniquilam, acabando com um domínio e unindo dois domínios diferentes mas de mesma cor.

## 3.2 Escalas de tempo

Um problema básico é estudar a interação entre os kinks e em que escalas de tempo elas ocorrem. Na figura 3.4 temos um exemplo de evolução temporal pela regra 18 onde ocorrem várias interações entre as paredes dos domínios, ou seja, entre os kinks. Vemos que quando duas paredes ficam próximas o suficiente, elas podem se aniquilar, acabando com um domínio, e unindo dois domínios diferentes mas de mesma cor. Como os kinks estão presentes nas paredes entre dois domínios, a aniquilação das paredes resulta na aniquilação dos kinks. O deslocamento dos kinks ocorre de maneira aleatória sobre a rede, e é interessante observar como ocorre o processo de aniquilação dos domínios e quais as consequências que este processo de aniquilação acarreta na dinâmica do sistema.

Outro ponto a ser observado na figura 3.4 a respeito da dinâmica dos kinks é que, apesar de delimitar a fronteira entre dois domínios, um kink não está presente em todos os passos temporais. Porém a fronteira entre os domínios está sempre presente, a menos que tenha se chocado com outra e se aniquilado. Vamos tratar de maneira equivalente a colisão de duas fronteiras entre domínios e a colisão de kinks. No passo temporal em que duas paredes se chocam os kinks podem não estar presentes, mas mesmo assim ocorre a aniquilação de um domínio e a união de outros dois domínios de mesma cor, o que caracteriza uma colisão. Note que a fronteira entre dois domínios, quando não marcada por kinks, apresenta uma seqüência de sítios iguais a 0.

Observando evoluções temporais pela regra 18, vemos que em geral existem três escalas de tempo: um regime assintótico, que segue um transiente inicial, sendo que tal transiente é composto por dois sub-transientes. É importante ressaltar que o comportamento periódico de qualquer autômato determinístico é inevitável, visto que ele é governado por regras determinísticas e possui um número finito de sítios, podendo assim assumir apenas um número finito de estados.

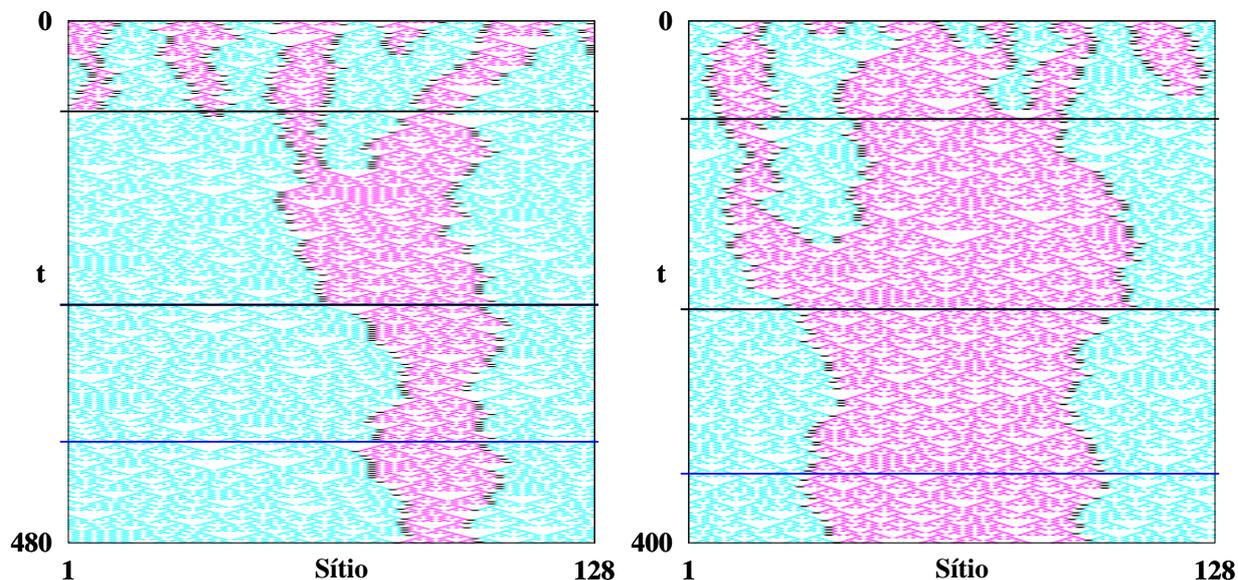
Na figura 3.5, apresentamos duas evoluções temporais onde é fácil distinguir estas três escalas. Na primeira subdivisão do transiente ou *termalização*, ocorre rápida aniquilação dos kinks gerados pela condição inicial. Nos dois diagramas espaço-tempo na figura 3.5 marcamos o fim deste primeiro transiente com uma linha escura.

Após a aniquilação dos primeiros kinks, restam kinks relativamente afastados uns dos outros e que se deslocam consideravelmente no sistema, que chamamos de kinks viajantes, e outros kinks que pouco se deslocam, estando próximos sempre de uma mesma posição. Nesta segunda parte do transiente ocorrem as últimas colisões entre os kinks, geradas pelo deslocamento dos kinks viajantes. O fim do transiente está marcado pela segunda linha escura nos diagramas espaço-tempo da figura 3.5, e define também o fim do segundo transiente da evolução temporal.

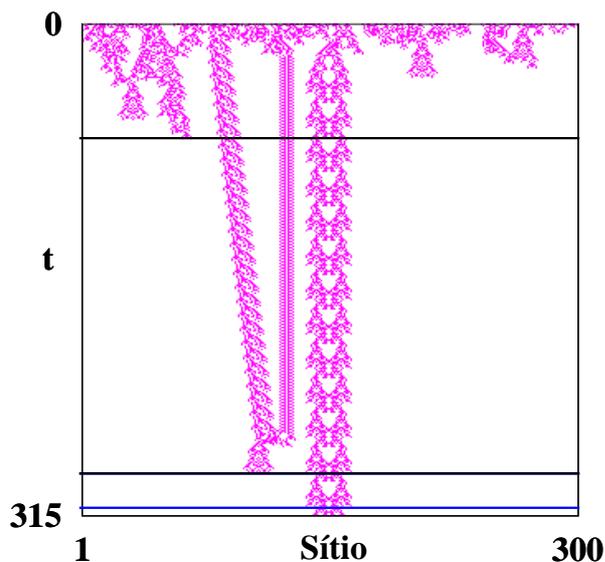
Após, apenas estruturas espacialmente localizadas permanecem e o sistema entra em regime periódico, ou seja, oscila periodicamente no tempo. Em alguns casos, no segundo transiente ocorre a aniquilação de todos os kinks e o sistema é preenchido inteiramente por apenas um domínio. Vamos discutir em detalhe esta situação no capítulo 4.

A duração de cada fase temporal na figura 3.5 depende muito do tamanho do sistema utilizado, bem como da quantidade de kinks presentes na condição inicial. Além disso, dependendo do tamanho de sistema utilizado, a duração do transiente pode ser muito longa.

Um dos aspectos cruciais na análise dos regimes temporais da evolução dos kinks é que eles são idênticos aos regimes observados na evolução temporal dos “gliders” da regra 20 (classe 4). As escalas de tempo na evolução temporal da regra 20 foram estudadas em



**Figura 3.5:** Diagramas espaço-tempo de evoluções temporais geradas pela regra 18, com domínios e kinks identificados. Podemos ver os três regimes de tempo associados com o movimento dos kinks. As linhas escuras delimitam o fim dos dois primeiros regimes de tempo e a azul uma repetição no regime periódico.



**Figura 3.6:** Escalas de tempo características da regra 20 (classe 4), discutidas em [20]. No primeiro transiente ocorre o decaimento rápido da atividade introduzida na rede na condição inicial. Após ocorre a “fase dos gliders”, onde identificamos gliders fixos no espaço e gliders viajantes. Após a colisão e aniquilação de todos os gliders viajantes o sistema finalmente atinge o regime periódico.

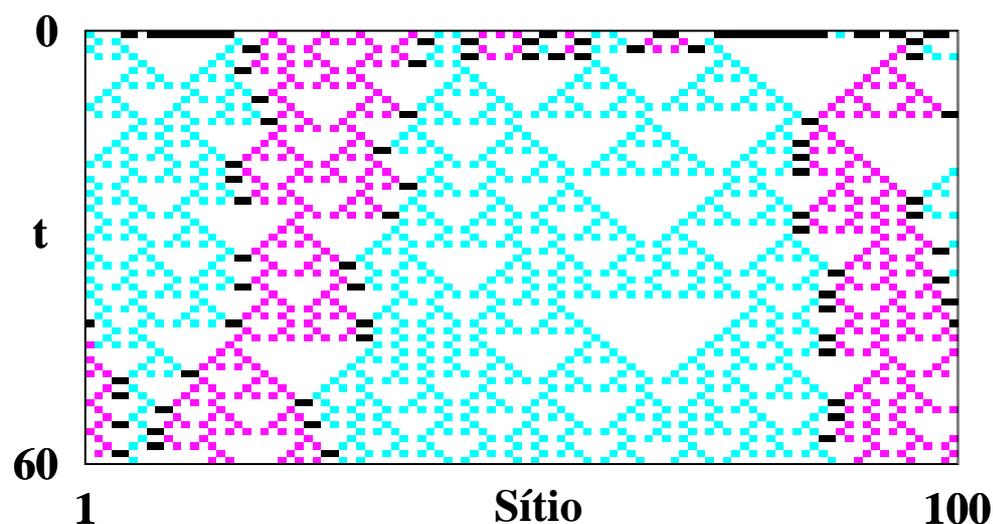
[20]. Na figura 3.6 apresentamos um exemplo de evolução temporal que caracteriza bem as três escalas temporais da regra 20. Na primeira parte do transiente ou termalização ocorre a aniquilação da maior parte da atividade introduzida na condição inicial. Na segunda parte do transiente restam apenas os gliders fixos e os gliders viajantes. Ocorrem colisões entre gliders até que restem apenas gliders estacionários e então o sistema entra no regime periódico.

Podemos traçar então um paralelo entre o comportamento dos kinks e dos gliders. No segundo transiente os kinks viajantes correspondem aos gliders viajantes, e os kinks que se deslocam próximos de uma mesma posição correspondem aos gliders fixos. A regra 18 é uma regra com definição bem menos complexa que a regra 20. A regra 18 considera o estado de três vizinhos e a regra 20 o estado de cinco vizinhos. Além disso, usualmente a regra 20 é classificada como sendo da classe 4 [8] e a regra 18 como da classe 3 [7]. Porém a riqueza das estruturas envolvidas nas escalas de tempo citadas acima é bem maior no caso dos kinks do que no caso dos gliders. O fundo sobre o qual os gliders evoluem é composto unicamente de sítios nulos, enquanto que no caso dos kinks temos um fundo com sítios iguais a 1 distribuídos de forma irregular, a menos da divisão em domínios discutida anteriormente. Adicionalmente, os gliders fixos tem como equivalentes os kinks que se deslocam em torno de um mesmo ponto. Porém este deslocamento se observado localmente aparenta ser aleatório, o que torna a dinâmica do sistema ainda mais complicada.

### **3.2.1 Critério para detecção das escalas de tempo**

Como discutido, a regra 18 apresenta três escalas de tempo características. Até agora identificamos estas escalas de tempo apenas a partir da observação do diagrama espaço-tempo. Seria interessante poder detectar os três comportamentos a partir da medida de uma quantidade dinâmica do sistema, pois assim teríamos um critério não-visual e quantitativo para comparar as escalas de tempo em diferentes evoluções temporais.

Um dos aspectos que caracterizam visualmente as escalas de tempo é a frequência com



**Figura 3.7:** Evolução temporal pela regra 18 de condição inicial gerada aleatoriamente. Note que vários dos kinks estão presentes apenas na condição inicial e, sem colidirem com outro kinks, desaparecem. Também na condição inicial ocorrem estruturas com mais de dois sítios iguais a 1 consecutivos, tornando difícil definir a quantidade de kinks presentes nestas estruturas. Devido a estas duas situações é difícil definir o número de kinks em uma condição inicial gerada aleatoriamente.

que ocorre a aniquilação dos kinks. Portanto uma boa quantidade a ser inspecionada é a fração de kinks gerados na condição inicial e que ainda não foram aniquilados. Medindo tal fração podemos monitorar o número de colisões entre kinks que ocorreram durante a evolução temporal e detectar alterações no autômato.

Porém quando geramos uma condição inicial aleatória, é difícil determinar o número de kinks presentes nela. Como podemos ver na figura 3.7, não é possível determinar com precisão o número de kinks presentes na condição inicial. Existem dois fatores que atrapalham esta detecção. O primeiro é que, gerada de maneira aleatória, a condição inicial apresenta agrupamentos de sítios iguais a 1 consecutivos, com isso não podemos decidir a quantidade de kinks presentes ali, especialmente quando os agrupamentos são formados por um número ímpar de sítios. Por exemplo, não sabemos se três sítios consecutivos representam um kink ou dois kinks. Outro problema em relação à condição inicial gerada aleatoriamente é que alguns kinks desaparecem após as primeiras atualizações do sistema sem caracterizar uma colisão efetiva entre dois kinks.

Para resolver estes problemas, vamos colocar artificialmente os kinks na condição inicial do sistema. Queremos utilizar uma forma de introduzir kinks na condição inicial de modo a ter um controle sobre a quantidade de kinks produzida e além disso garantir a permanência destes kinks, garantindo que eles não desapareçam sem a ocorrência de uma colisão. A seguir discutimos algumas possibilidades para introduzir  $n$  kinks na condição inicial de um autômato, e as conseqüências que o tipo de mecanismo escolhido acarreta na permanência dos kinks.

A princípio, como os kinks são identificados por dois sítios adjacentes iguais a 1, podemos pensar em introduzir estes dois sítios iguais a 1 em uma condição inicial aleatória, espaçados regularmente e na quantidade desejada. Porém os kinks delimitam a fronteira entre dois domínios. Se introduzirmos os kinks sem que eles delimitem domínios, não garantimos a sua permanência, e nem mesmo garantimos que não irão aparecer novos kinks.

Outra alternativa para resolver este problema é gerar domínios de mesmo tamanho intercalados e então colocar os kinks na fronteira entre eles. Com isso garantimos a permanência dos kinks gerados devido à divisão em domínios imposta. Para dividir artificialmente a rede em domínios, devemos gerar a condição inicial de tal forma que no primeiro domínio apenas os sítios com índice de posição par tenham valor diferente de 0, e no segundo domínio apenas os sítios de índice ímpar assumam valor diferente de 0, intercalando desta forma os domínios. Geramos então uma condição inicial com as cores azul e rosa intercaladas. Podemos introduzir kinks sobre esta condição inicial posicionados sobre as fronteiras entre os domínios, já que eles sempre se localizam na divisão de um domínio para outro.

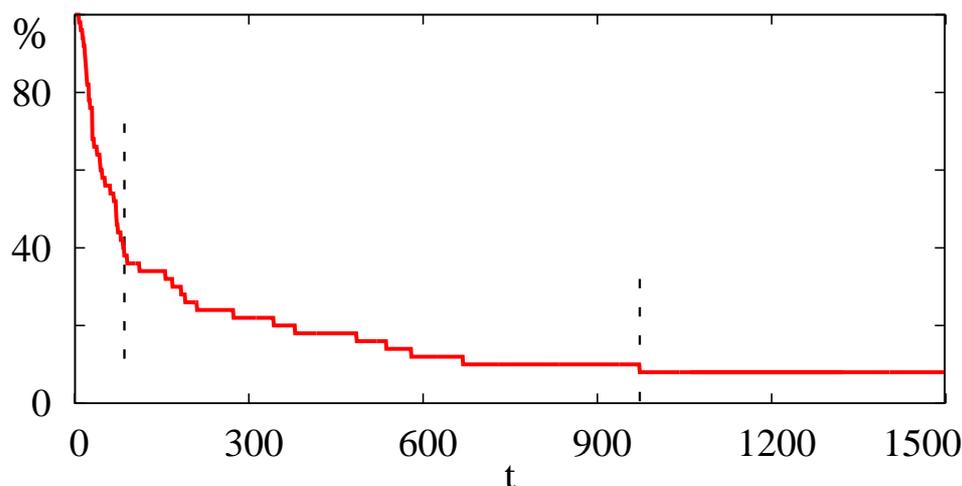
Note porém que um kink introduzido desta forma na rede pode estar ao lado de um sítio igual a 1, ou até mesmo ter dois sítios iguais a 1 como vizinhos. Para certos tamanhos de sistema e quantidade de kinks, teríamos de criar mecanismos para garantir que este tipo de estrutura não se forme na condição inicial. Para alguns casos, onde o número de domínios é grande em comparação com o tamanho da rede, teríamos poucas ou até mesmo nenhuma possibilidade de introdução de kinks na rede desta forma.

Para resolver este problema, propomos gerar condições iniciais onde apenas exista a divisão em domínios, sem a necessidade de introduzir o conjunto de dois sítios iguais a 1 que caracteriza o kink. Da forma que geramos a condição inicial, na fronteira entre um domínio e outro, podemos encontrar apenas dois sítios consecutivos iguais a 1 ou uma seqüência de sítios iguais a 0. Na realidade estamos gerando uma condição inicial com  $n$  fronteiras entre domínios, e é nestas fronteiras que em passos temporais futuros vamos detectar os kinks. Com isso não garantimos a presença efetiva de  $n$  kinks na condição inicial, mas garantimos a permanência dos domínios gerados, até que a fronteira de dois deles colida.

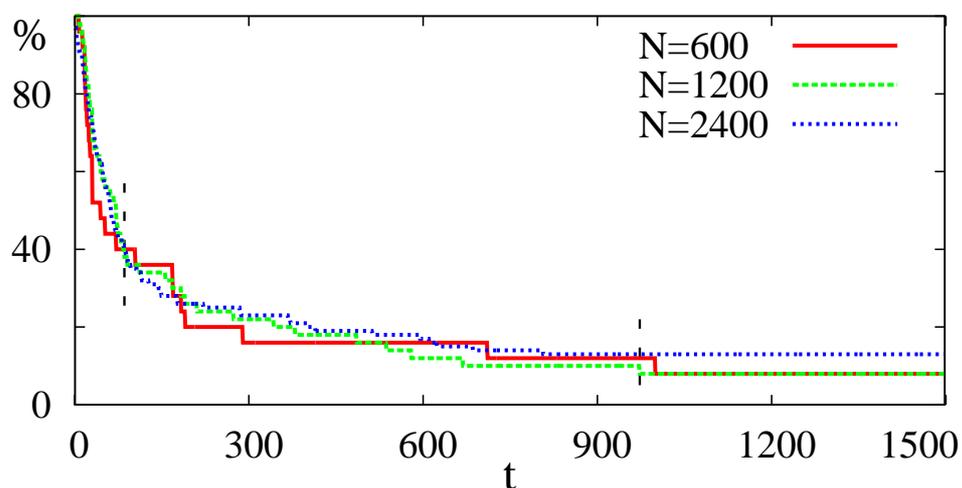
Detectamos a presença dos kinks a cada passo de tempo pela presença de transição entre dois domínios. Apesar dos kinks não aparecerem em todos passos temporais, a transição entre dois domínios está sempre presente, a menos que ocorra uma colisão desta fronteira com outra. Monitoramos a quantidade de kinks que não foram aniquilados contando o número de domínios presentes no autômato.

Realizamos então a medida da percentagem de kinks que ainda não foi aniquilada, da forma descrita acima, inicialmente para uma rede com 1200 sítios, onde introduzimos 100 domínios na condição inicial. Utilizamos uma quantidade grande de domínios na condição inicial, pois esperamos que quanto mais próximas as fronteiras entre os domínios estiverem, menores serão as escalas de tempo envolvidas e mais facilmente elas serão detectadas. O resultado desta simulação está apresentado na figura 3.8. Vemos que a percentagem de kinks remanescentes diminui rapidamente nos primeiros passos temporais; após tal queda rápida inicial ocorre uma queda lenta até a percentagem estabilizar. Os pontos onde ocorre a transição de um comportamento para outro foram marcados por linhas pontilhadas.

A partir da figura 3.8 podemos detectar as três escalas de tempo da regra 18 discutidas na seção anterior. O decaimento rápido da percentagem corresponde à primeira parte do transiente, onde ocorre uma intensa aniquilação de kinks. Já o decaimento lento da percentagem corresponde ao segundo transiente, onde encontramos os kinks viajantes, e finalmente quando a percentagem de kinks se estabiliza o sistema entra no regime periódico.



**Figura 3.8:** Percentagem de kinks gerados na condição inicial não aniquilados por colisão. Usamos aqui uma rede com 1200 sítios e geramos 100 domínios na condição inicial. Vemos caracterizadas aqui as três escalas de tempo da regra 18. As linhas pontilhadas marcam a transição de um comportamento para outro. No primeiro transiente a porcentagem cai rapidamente. Após, como existem kinks viajantes que estão se aniquilando, a porcentagem cai com menor velocidade e, finalmente, o número de kinks se estabiliza e o sistema entra no regime assintótico.



**Figura 3.9:** Percentagem de kinks remanescentes para tamanhos de rede iguais a 600, 1200 e 2400, geramos condições iniciais com respectivamente 50, 100 e 200 kinks. Desta forma mantemos constante o tamanho dos domínios na condição inicial. Vemos que as curvas coincidem. Apenas as curvas geradas para redes com menos sítios apresentam degraus mais aparentes, devido ao menor número de domínios para realizar a estatística.

Determinamos onde ocorre a transição de regime temporal no transiente ajustando duas retas, a do primeiro transiente acaba no ponto de troca e a do segundo começa neste ponto, o ponto de troca de um regime para outro é determinado como o ponto para o qual as retas apresentam menor erro de ajuste.

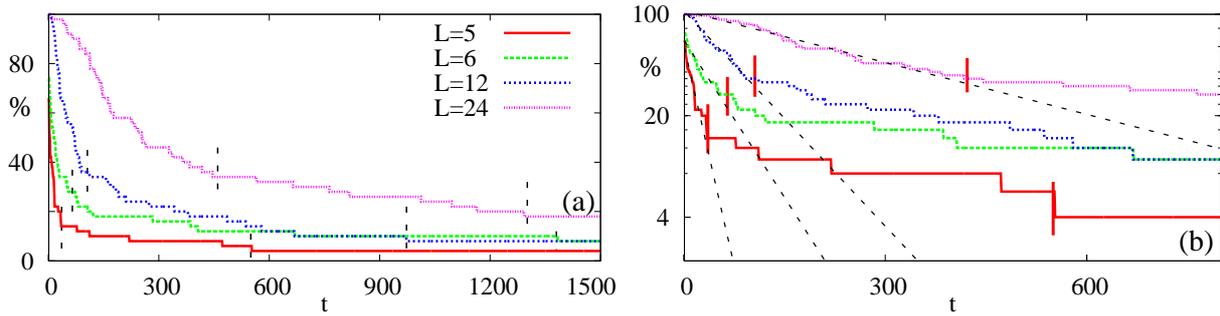
Como agora temos um critério quantitativo para detectar a duração de cada escala de tempo da evolução temporal da regra 18, vamos determinar como o tamanho da rede e a densidade de kinks alteram as escalas de tempo da regra 18. A densidade de kinks na condição inicial é a razão entre o número de domínios introduzidos na condição inicial  $n$  e o tamanho de rede utilizada  $N$ , e é representada pela seguinte equação:

$$d = \frac{n}{N} . \quad (3.2.1)$$

Podemos quantificar também de outra forma o números de kinks na condição inicial em função do tamanho do sistema, considerando o tamanho dos domínios gerados. O tamanho dos domínios gerados  $L$  também é interessante para quantificar o quanto os kinks ou as fronteiras entre dois domínios estão perto de colidirem. O valor de  $L$  é o inverso da densidade de kinks  $d$ . Vamos utilizar  $L$  na discussão dos próximos resultados, pois esta quantidade fornece uma noção mais intuitiva do espaçamento entre os kinks.

Na figura 3.9 geramos curvas com o mesmo tamanho de domínio da figura 3.8,  $L = 12$ , porém variamos o tamanho da rede. Utilizamos tamanhos de rede iguais a 600, 1200 e 2400. Vemos que as curvas apresentam a troca de um regime temporal para outro aproximadamente no mesmo ponto, porém para redes menores as flutuações das curvas são maiores. As flutuações maiores ocorrem pois para redes menores a quantidade de kinks a ser monitorada é menor, uma vez que mantemos  $L$  constante.

Portanto a figura 3.9 mostra que o tamanho do sistema não afeta o tamanho das escalas de tempo observadas para a regra 18. Vamos agora variar o tamanho dos domínios na condição inicial para determinar qual a importância desta quantidade nas escalas de tempo



**Figura 3.10:** A figura (a) mostra a percentagem de kinks gerados na condição inicial e que ainda não foram aniquilados. Vemos que quanto menor o tamanho  $L$  dos domínios na condição inicial, mais rápido os kinks presentes na condição inicial se aniquilam. Além disso identificamos dois regimes de decaimento destas curvas no transiente, evidenciando com isso as três escalas de tempo da regra 18. Na figura (b) mostramos as mesmas curvas, mas em escala logarítmica, onde se percebe mais claramente a mudança de um regime para outro. Na primeira parte das curvas, ajustamos uma reta para mostrar como a velocidade de aniquilação dos kinks no primeiro regime se comporta quando diminuimos  $L$ .

da regra 18.

Na figura 3.10(a) determinamos a percentagem dos kinks introduzidos na condição inicial e que ainda não se aniquilaram, para condições iniciais com 100 kinks. Para cada curva gerada utilizamos redes com um número diferente de sítios, pois desta forma variamos o tamanho dos domínios gerados na condição inicial. Utilizamos domínios com tamanhos que variam de 5 a 24 sítios. Vemos na figura 3.10(a) que a mudança de um regime para outro ocorre antes para condições iniciais geradas com tamanhos de domínios  $L$  menores. Isto já era esperado, pois quanto mais próximos estiverem os kinks, isto é, quanto menores forem os domínios na condição inicial, mais rápido ocorre o choque entre eles.

Na figura 3.10(b) colocamos as curvas em escala logarítmica para comparar a velocidade com a qual a percentagem de kinks remanescentes diminui, para diferentes valores de  $L$ . Nesta figura ajustamos uma reta para o primeiro regime onde os kinks se aniquilam com maior velocidade. Vemos que quanto menor o tamanho do domínio utilizado na condição inicial, maior é a inclinação da reta ajustada. Também nesta figura é mais fácil de identificar a transição do primeiro para o segundo transiente, pois vemos nitidamente a mudança de inclinação das retas.

### 3.3 Estudo da difusão na rede

Desde os primeiros trabalhos que observaram a ocorrência de domínios e de kinks na regra 18 [25, 26], o deslocamento dos kinks na rede tem sido investigado [27, 30, 31]. O comportamento dos kinks quando observados no diagrama espaço-tempo aparenta ser aleatório. Em [27], foi feita uma demonstração matemática de que o movimento de um kink isolado de fato executa uma caminhada aleatória.

Porém, quando temos vários kinks na rede a caminhada é afetada pela interação entre eles e também pela aniquilação dos kinks. Uma forma de determinar como as interações afetam a caminhada dos kinks é medir seu coeficiente de difusão na rede.

Como na regra 18 a vizinhança é de um sítio de cada lado, o kink pode mudar de posição apenas de um sítio a cada passo de tempo. Como um kink isolado executa uma caminhada aleatória [27], o coeficiente de difusão é igual a  $D = \frac{1}{2}$ . Para este caso se medirmos o deslocamento quadrático médio  $\langle x^2(t) \rangle$ , devemos obter uma curva em função do tempo igual a

$$\langle x^2(t) \rangle = t, \tag{3.3.1}$$

pois o coeficiente de difusão é igual à metade da inclinação da curva do deslocamento quadrático médio.

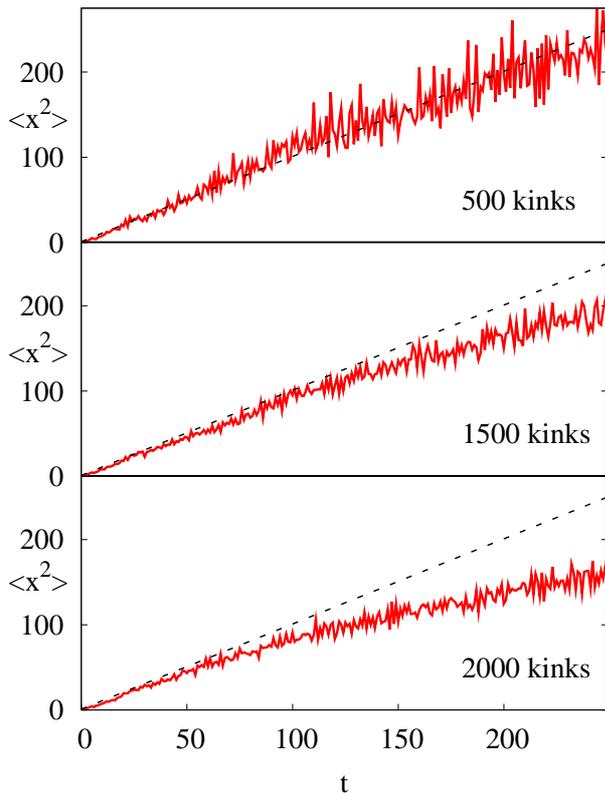
Realizamos então a medida do deslocamento quadrático médio, para redes com 60000 sítios. Isto permite realizar a média sobre vários kinks distribuídos na condição inicial, e ver como a interação entre eles afeta a difusão. Para determinar como a interação entre os kinks altera o comportamento difusivo, vamos variar a quantidade de kinks introduzidos na condição inicial. Neste caso, introduzimos os kinks na condição inicial da mesma forma que fizemos para calcular o critério de detecção das escalas de tempo na seção anterior. Isto é, eles são espaçados a distâncias iguais na rede, portanto quanto maior o número de kinks introduzido na condição inicial, menor será a distância entre eles e maior a possibilidade deles interagirem.

Porém para obter a curva de  $\langle x^2(t) \rangle$  temos problemas ao definir a posição dos kinks em todos os passos temporais, inclusive na condição inicial. A condição inicial que geramos não tem sempre presente o kink na fronteira entre dois domínios. Como temos que definir a posição inicial do kink para calcular a difusão na rede, tomamos como a posição inicial do kink, a posição onde no programa que gera a condição inicial passamos de sortear sítios pertencentes a um domínio para outro domínio.

Durante a evolução temporal ao acompanhar o deslocamento de um kink vemos que ele não está presente em todos os passos temporais, como na figura 3.7. Note que existem passos temporais em que apenas existe a fronteira entre os domínios mas não ocorre um kink nesta fronteira. Isto gera uma dificuldade em determinar como vamos computar o deslocamento do kink nos passos temporais em que ele não é detectado. Para resolver o problema com os kinks não detectados em todos os passos temporais, realizamos a medida do deslocamento utilizando apenas os kinks detectados a cada passo temporal, excluindo o restante dos kinks da média. Chamamos o número de kinks detectados a cada passo temporal de  $n_k(t)$ . Para cada kink detectado utilizamos como referência a posição dele na condição inicial  $x_0(j)$  e também a posição a cada passo temporal  $x_t(j)$ . Calculamos então o deslocamento médio a partir da seguinte equação:

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{1}{n_k(t)} \sum_{j=1}^{n_k(t)} [x_0(j) - x_t(j)]^2. \quad (3.3.2)$$

Quando detectamos um kink em um passo temporal, para realizarmos o cálculo que está na equação 3.3.2, temos que decidir qual era sua posição na condição inicial, ou seja, qual dos kinks gerados na condição inicial estamos detectando. Como os kinks podem se deslocar muito em relação a sua posição inicial, se levarmos em conta apenas a posição inicial, não podemos ter certeza de qual kink foi detectado. Para determinar qual dos kinks da condição inicial detectamos em um determinado passo de tempo, mantemos um controle das posições atualizadas de todos kinks introduzidos na condição inicial. Determinamos a posição inicial calculando qual posição atualizada está mais próxima do kink detectado.



**Figura 3.11:** Deslocamento médio quadrático de kinks em uma rede com 60000 sítios, com quantidades diferentes de kinks para cada curva. A linha pontilhada mostra a curva esperada teoricamente para uma difusão com  $D = \frac{1}{2}$ . Vemos que quanto maior a quantidade de kinks na condição inicial, mais rapidamente a curva se afasta da esperada teoricamente para a difusão dos kinks.

Note que, da forma que realizamos a média, conseguimos calcular a cada passo temporal o deslocamento de apenas uma fração dos kinks gerados na condição inicial. Porém a cada passo de tempo o conjunto de kinks detectados se altera e, sendo assim, todos kinks gerados contribuem para gerar a curva  $\langle x^2(t) \rangle$ . Determinamos o número de kinks detectados a cada passo temporal para uma rede com 60000 sítios e 500 kinks na condição inicial. Observamos que a fração de kinks detectados a cada passo de tempo é cerca de 25% do total das transições de domínios (mudança de cor).

Determinamos  $\langle x^2(t) \rangle$  realizando uma simulação para uma rede com 60000 sítios, utilizando quantidades diferentes de kinks na condição inicial para cada curva gerada. Na figura 3.11, temos as curvas de  $\langle x^2(t) \rangle$  geradas a partir de uma condição inicial com 500, 1500 e 2000 kinks. Junto com  $\langle x^2(t) \rangle$ , plotamos como uma linha pontilhada a curva esperada teoricamente, que representa um coeficiente de difusão  $D = 1/2$  e está definida na equação 3.3.1. Variamos a quantidade de kinks na condição inicial para variar a velocidade de interação entre os kinks e estudar como a curva para  $\langle x^2(t) \rangle$  se altera.

Vemos na figura 3.11 que quando a quantidade de kinks na condição inicial é baixa, igual a 500, a curva obtida se aproxima bem do resultado teórico esperado, para o número de passos temporais utilizado. Neste caso, como monitoramos  $\langle x^2(t) \rangle$  para 250 passos temporais, a distância entre os kinks na condição inicial é de 120 sítios. Como o kink se desloca aleatoriamente um sítio a cada passo de tempo ainda não começaram a ocorrer as colisões entre os kinks.

Porém, quando utilizamos quantidades maiores de kinks na condição inicial, por exemplo quando o número de kinks é igual a 1500 e 2000, o comportamento de  $\langle x^2(t) \rangle$  observado na figura 3.11 se altera sensivelmente. A partir de um certo passo temporal,  $\langle x^2(t) \rangle$  se afasta da reta  $D = 1/2$ , tendo valor menor do que ela. Quanto maior a quantidade de kinks na condição inicial, mais cedo ocorre tal afastamento. A explicação deste comportamento é simples: como diminuimos a distância entre os kinks na condição inicial, observamos mais rapidamente a sua aniquilação.

Como vimos na seção 3.2, a regra 18 apresenta kinks viajantes, equivalentes aos gliders viajantes da regra 20. Como os kinks viajantes aparentemente deslocam-se mais que os outros kinks, quando eles se aniquilam encontramos deslocamentos médios menores. E isto ocorre mais rapidamente quando a densidade de kinks é maior. Portanto, a aniquilação dos kinks viajantes é o que faz com que a curva do deslocamento quadrático médio tenha sua inclinação reduzida com o passar do tempo.

## Capítulo 4

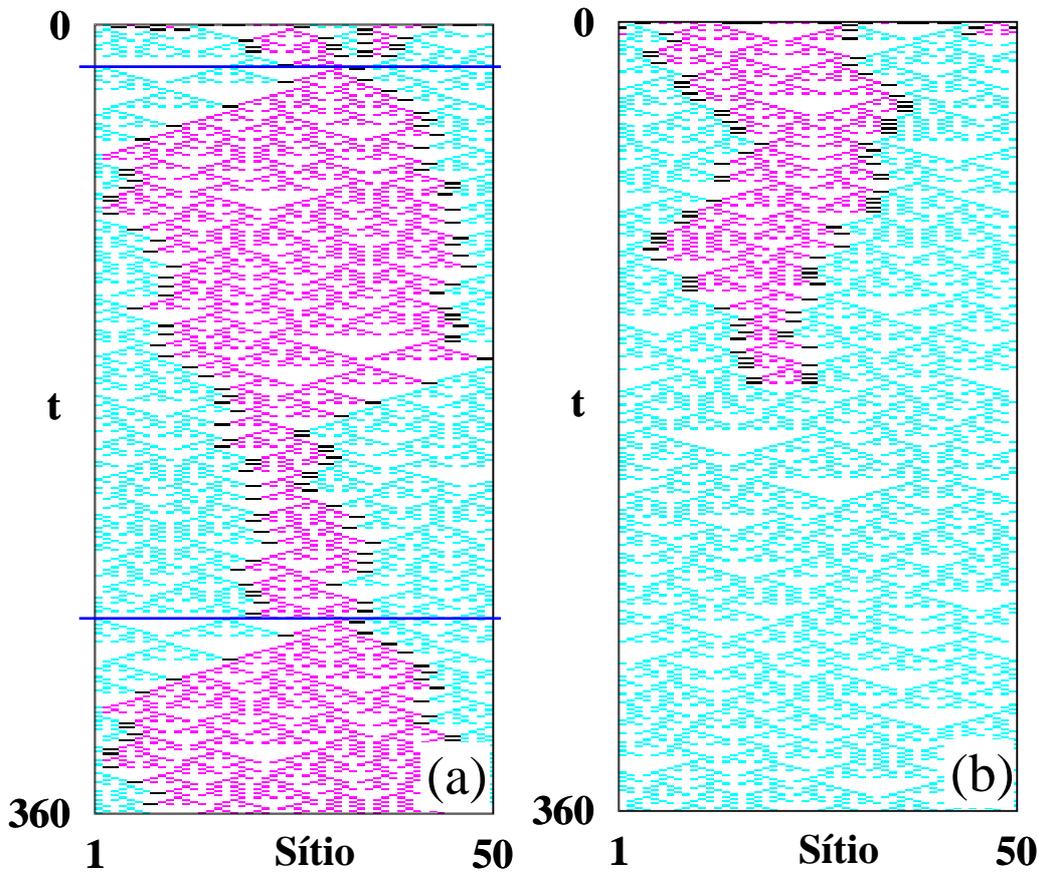
# Distribuição de períodos em autômatos elementares

*Neste capítulo estudamos em detalhe a terceira escala de tempo da regra 18: o regime periódico. Determinamos a distribuição estatística dos períodos assintóticos observados em redes de vários tamanhos, com ênfase em redes com 50 sítios onde encontramos uma série de regularidades. Discutimos a origem das regularidades observadas para o caso em que ocorre aniquilação completa dos kinks antes do sistema entrar em regime periódico.*

### 4.1 Comportamentos periódicos característicos

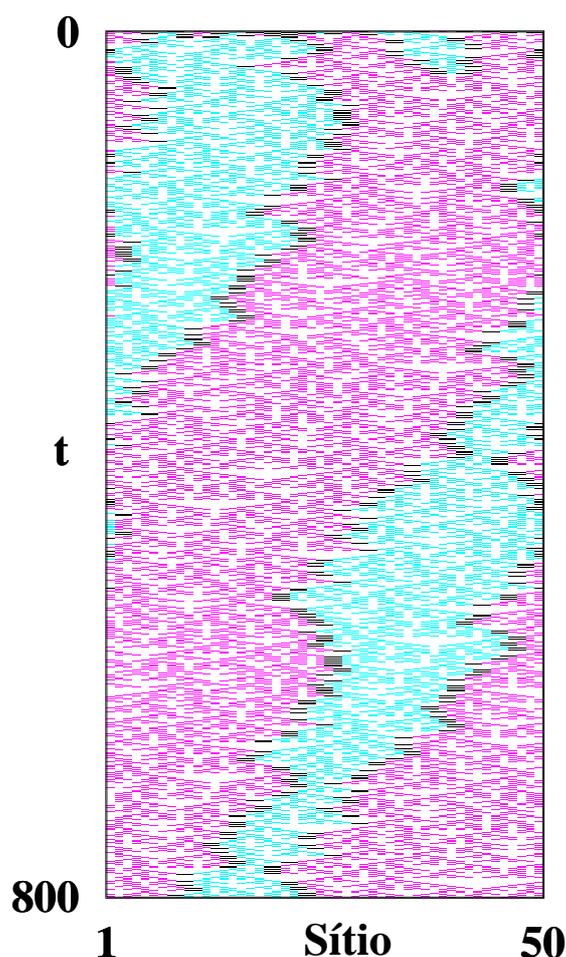
Por ser um sistema finito e determinístico, apesar de apresentar estruturas no diagrama espaço-tempo desordenadas, a evolução temporal de qualquer autômato determinístico deve apresentar, a partir de algum passo temporal, comportamento periódico. O transiente para que o autômato entre no regime periódico pode ser muito longo e, para redes grandes, praticamente impossível de ser determinado. Porém quando trabalhamos com redes pequenas os transientes são viáveis de serem computados e podemos determinar algumas características dos comportamentos periódicos assintóticos do autômato estudado, bem como o tempo médio para atingi-los.

Como vimos, a regra 18 apresenta kinks e domínios em sua evolução temporal. Estes



**Figura 4.1:** Dois exemplos de evoluções pela regra 18. Na figura (a) o sistema entra em regime periódico sem que todos os kinks tenham se aniquilado, apresentando assim configurações periódicas com kinks e período igual a 252 passos temporais. As linhas horizontais marcam os períodos. Na figura (b) os kinks se aniquilam completamente antes do sistema entrar regime periódico. Neste caso as configurações periódicas finais não contem kinks. Em um autômato que evolui pela regra 18 estas são as duas possibilidades para as configurações periódicas.

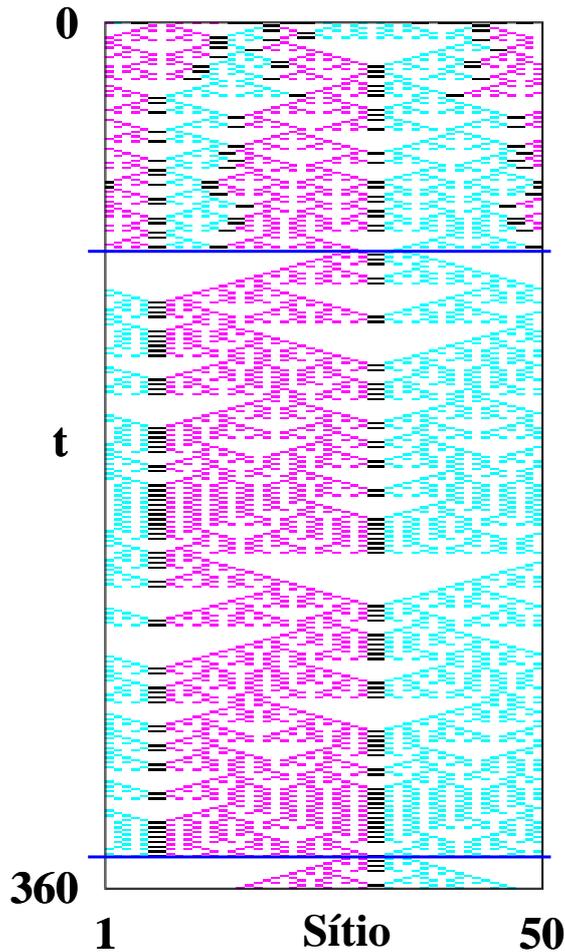
kinks se aniquilam quando colidem, acabando também com os domínios delimitados pelos kinks. Uma questão importante a respeito do comportamento periódico da regra 18 é saber o que ocorre com os kinks no regime periódico: se eles se aniquilam durante o transiente ou se eles persistem executando movimentos periódicos. Na figura 4.1 temos um exemplo para as duas situações descritas. Na figura 4.1(a) temos um exemplo de evolução temporal onde não ocorre a aniquilação de todos os kinks. Após um transiente inicial bem curto os kinks remanescentes passam a executar deslocamentos periódicos, obviamente perdendo a característica, pressuposta por Grassberger [25, 26], de executar deslocamentos



**Figura 4.2:** Exemplo de kinks com periodicidade helicoidal. Vemos pelo grande deslocamento destes kinks em relação a posição inicial, que eles correspondem aos kinks viajantes discutidos no capítulo anterior. Porém aqui a rede utilizada é pequena, o que reduz a probabilidade do kink viajante colidir com outro kink.

aleatórios. Quando o período é longo, a trajetória dos kinks ainda conserva uma certa aparência randômica. Já na figura 4.1(b) vemos um exemplo onde ocorre a aniquilação dos kinks antes do sistema entrar no regime periódico. Neste caso o autômato é preenchido inteiramente por apenas um domínio.

Na figura 4.2 mostramos um exemplo interessante de comportamento em que o autômato entra no regime periódico helicoidal com kinks na rede. Lembrando que utilizamos condição de contorno periódica, vemos que os kinks ativos executam um movimento em espiral com o passar do tempo. O tipo de movimento dos kinks no caso de periodicidade helicoidal é equivalente, quando temos um sistema maior, ao movimento dos kinks viajantes, que apresentam grande deslocamento em relação a sua posição de origem. Porém quando temos um sistema maior os kinks viajantes acabam colidindo com outros e se aniquilando.



**Figura 4.3:** Nesta evolução temporal observamos kinks estacionários no regime periódico. Este caso é muito interessante pois não preserva a aparência randômica do deslocamento dos kinks no regime periódico, como ocorre na figura 4.1, o período neste caso é de 252 passos temporais.

Outro comportamento bastante curioso observado quando os kinks entram no regime periódico está mostrado na figura 4.3. Os kinks permanecem sempre na mesma posição, não executando deslocamentos laterais durante o regime periódico. Neste caso os kinks não preservam a característica de, se observados dentro de um período, apresentarem movimentos aparentemente aleatórios. Como discutido acima, a diversidade de comportamentos encontrados quando o sistema atinge o regime periódico é grande, mesmo quando utilizamos um tamanho de rede igual a 50 sítios, pequeno comparado com o utilizado para observar as escalas temporais da regra 18 no capítulo anterior. A grande vantagem de utilizar um tamanho pequeno de sistema é que os tamanhos dos transientes também são menores, tornando mais rápida a observação do regime periódico. Na próxima seção vamos estudar a distribuição dos períodos para redes pequenas, bem como determinar a fração de condições

**Tabela 4.1:** Períodos encontrados para o caso em que temos kinks ativos no autômato após o transiente, usando rede com 50 sítios, para 10000 condições iniciais. Mostramos também como os períodos menores se relacionam com os maiores sendo múltiplos e o número e a percentagem de condições iniciais que apresentaram tal período. Além disso mostramos a natureza dos kinks periódicos, se são viajantes identificamos com T e se não-viajantes com NT.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	%	Natureza
<b>14</b>	1·14	1	0.02	NT
28	2·14	1	0.02	NT
56	4·14	7	0.16	NT
126	9·14	2	0.04	NT
252	18·14	3442	81.6	NT
<b>1575</b>	1·1575	2	0.04	T
3150	2·1575	29	0.61	T
9450	6·1575	730	17.3	T
12600	8·1575	3	0.07	T

iniciais geradas que entram no regime periódico sem que todos os kinks tenham sido aniquilados.

## 4.2 Estatística para redes pequenas

O primeiro tamanho utilizado para estudar os períodos obtidos assintoticamente para a regra 18 foi  $N = 50$ . Investigar uma rede deste tamanho pressupõe investigarmos um conjunto de condições iniciais envolvendo  $2^{50} \simeq 1.12 \times 10^{15}$  possibilidades. Começamos analisando uma pequena amostra, contendo 10000 condições iniciais geradas aleatoriamente. Para gerar as condições iniciais que vamos estudar aqui não forçamos nem a quantidade nem a posição dos kinks na condição inicial como fizemos nas condições iniciais do capítulo anterior. Apenas geramos aleatoriamente a condição inicial.

Das 10000 condições iniciais geradas, 42.17% entram em regime periódico sem que todos os kinks sejam aniquilados. No caso em que os kinks sobrevivem, foram observados apenas nove valores de período final, apresentados na tabela 4.1. Na tabela 4.1, para os nove

**Tabela 4.2:** Distribuição de períodos para  $N = 50$ , utilizando 150000 condições iniciais. Os dados são apresentados da mesma forma que na tabela 4.1.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	%	Natureza
<b>14</b>	1·14	2	$\simeq 0$	NT
28	2·14	1	$\simeq 0$	NT
56	4·14	68	0.10	NT
126	9·14	26	0.04	NT
252	18·14	50632	80.8	NT
<b>100</b>	1·100	3	$\simeq 0$	T
4900	49·100	2	$\simeq 0$	T
<b>1575</b>	1·1575	13	0.02	T
3150	2·1575	548	0.87	T
9450	6·1575	11270	18.0	T
12600	8·1575	41	0.06	T

valores de períodos encontrados determinamos também a sua frequência de aparecimento. Também mostramos o menor período múltiplo do valor encontrado e a natureza viajante ou não-viajante dos kinks. Quando a periodicidade é helicoidal como visto na figura 4.2, chamamos os kinks de viajantes (T). Caso a periodicidade não seja helicoidal, como na figura 4.1, chamamos os kinks de não-viajantes (NT).

Vemos ainda na tabela 4.1 que os nove períodos encontrados são na verdade múltiplos de apenas dois períodos menores e encontrados com pouca frequência: 14 e 1575. Os períodos múltiplos apresentam kinks com movimento de mesma natureza, o que mostra que a relação de multiplicidade entre eles não é apenas uma coincidência. Outro aspecto a ser observado na tabela é que estruturas periódicas com kinks viajantes ocorrem com menor frequência que estruturas com kinks não-viajantes.

Como utilizamos relativamente poucas condições iniciais para realizar a estatística dentro do universo de condições iniciais possíveis, repetimos a determinação da estatística dos períodos utilizando 150000 condições iniciais e mantendo  $N = 50$ . A tabela 4.2 mostra os períodos bem como suas frequências quando utilizamos 150000 condições iniciais. Apesar de utilizarmos quinze vezes mais condições iniciais, a percentagem de condições iniciais que

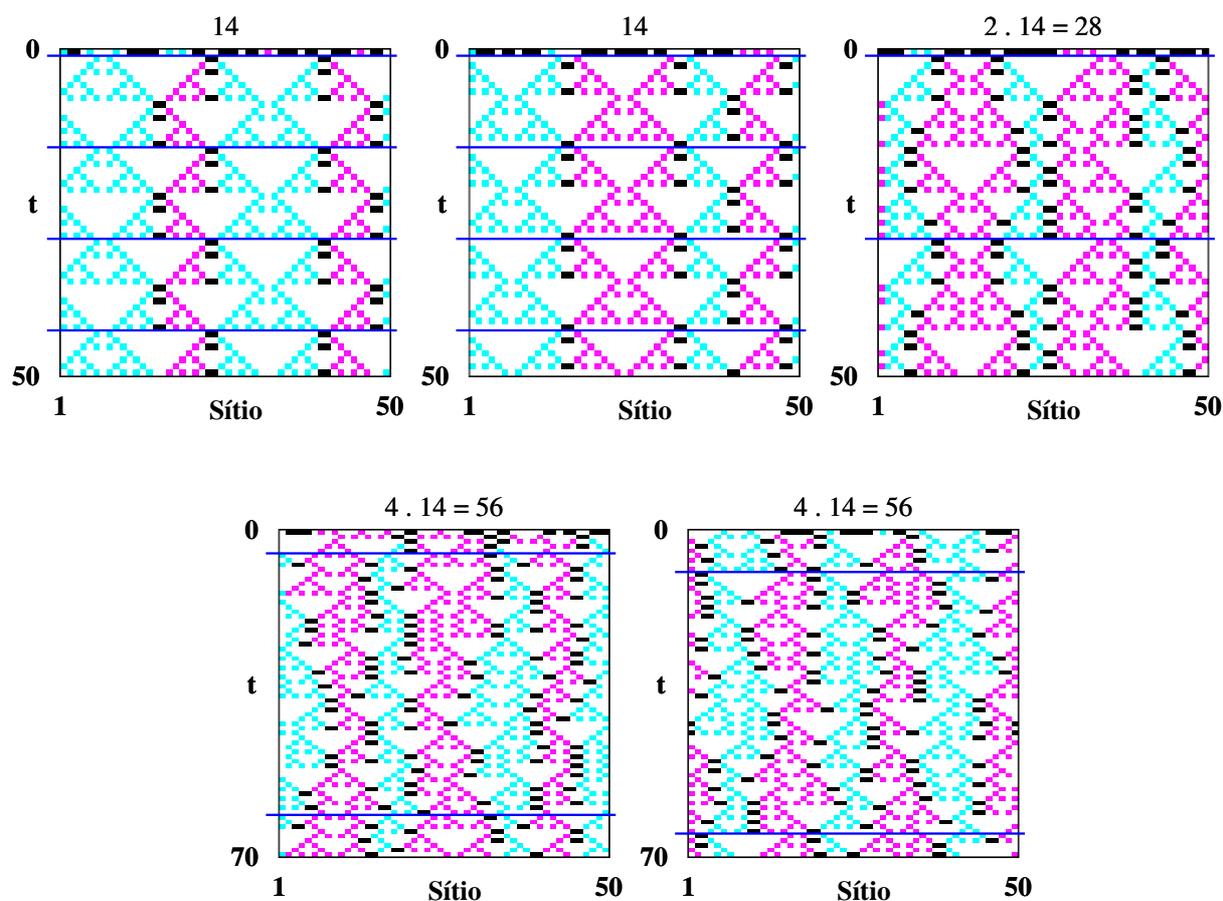
entram no regime periódico sem que todos os kinks se aniquilem é de 41.73%, praticamente igual aos 42.17% obtidos quando utilizamos 10000 condições iniciais. Além disso, a percentagem com que cada valor de período é encontrado se altera pouco e foram detectados apenas dois períodos novos, 4900 e 100 passos temporais. Novamente existe uma relação entre os períodos encontrados: 4900 é múltiplo de 100.

Como existem alguns valores de período extremamente difíceis de serem observados, como por exemplo 28 passos temporais, que foi observado apenas uma vez em 150000 condições iniciais, é provável que se encontre outros valores de período se testarmos mais condições iniciais. Porém já é possível com o número de condições iniciais utilizadas observar as principais características do sistema no regime periódico, resumidas nas tabelas 4.1 e 4.2.

Vamos agora investigar o tipo de estrutura periódica observada na evolução temporal do autômato, especialmente para os períodos mais raros de serem encontrados, e tentar determinar algumas características das estruturas periódicas geradas.

Na figura 4.4 temos exemplos de estruturas periódicas com alguns dos períodos múltiplos de 14. No caso de período igual a 14 mostramos as duas evoluções temporais encontradas. Podemos ver que as evoluções apresentam a mesma estrutura de triângulos dentro dos domínios, porém os kinks estão posicionados no autômato de forma diferente, alterando apenas a fronteira entre os domínios. Já para o caso de período igual a 28, a única condição inicial encontrada que gera este valor de período tem a evolução temporal ilustrada na figura 4.4. Para período igual a 56, o sistema apresenta mais possibilidades de estruturas. Na figura 4.4 vemos dois exemplos delas. Porém estas estruturas periódicas tem em comum o fato de apresentarem seis kinks, assim como ocorre para período 28. Para período igual a 14 isto já não ocorre e o padrão periódico apresenta quatro kinks. Ainda em relação aos padrões com período igual a 14, vemos que os kinks gerados neste caso são estacionários, ou seja, não se deslocam na rede.

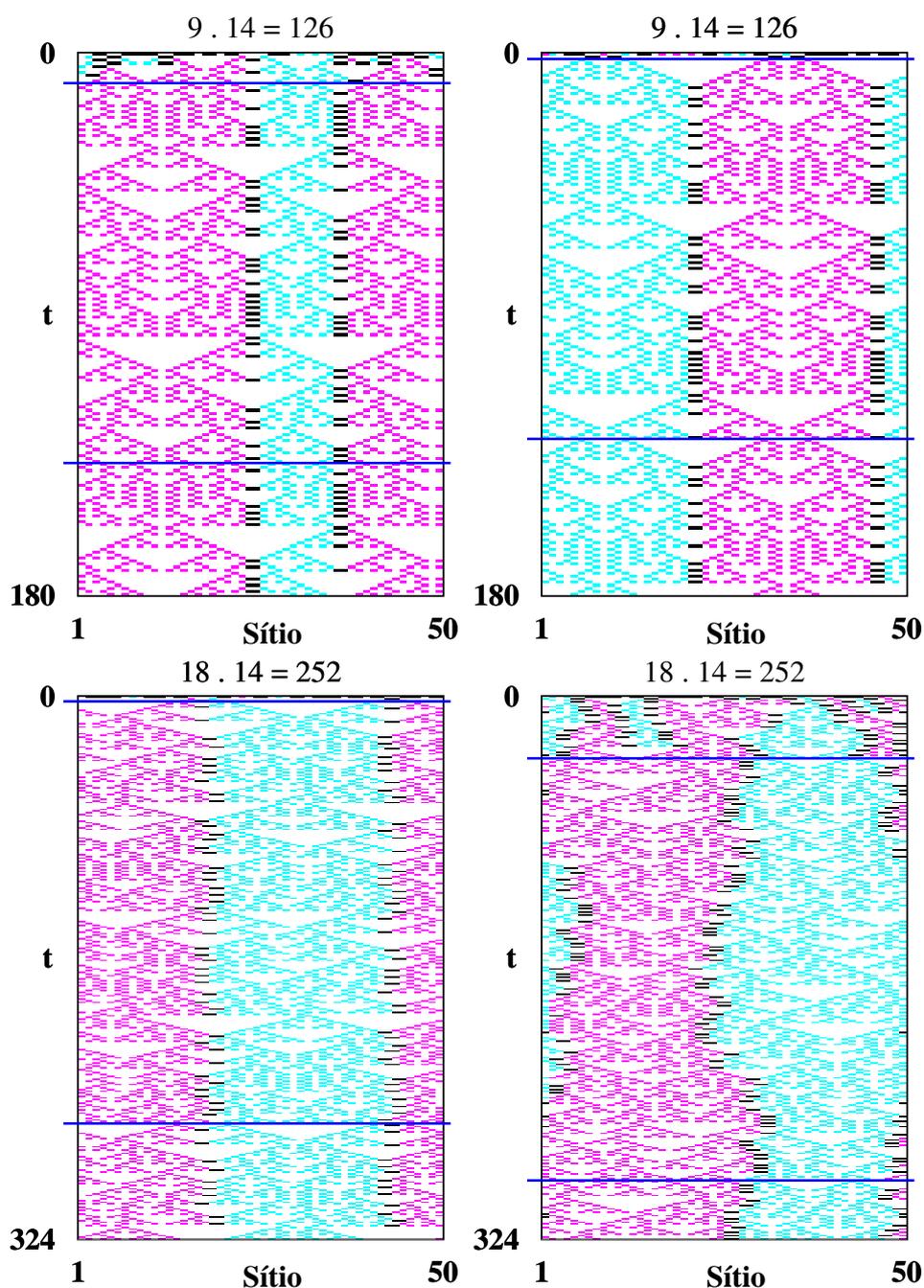
Para períodos maiores múltiplos de 14 os comportamentos encontrados estão ilustrados na figura 4.5. No caso de período igual a 126, vemos que os kinks são espacialmente



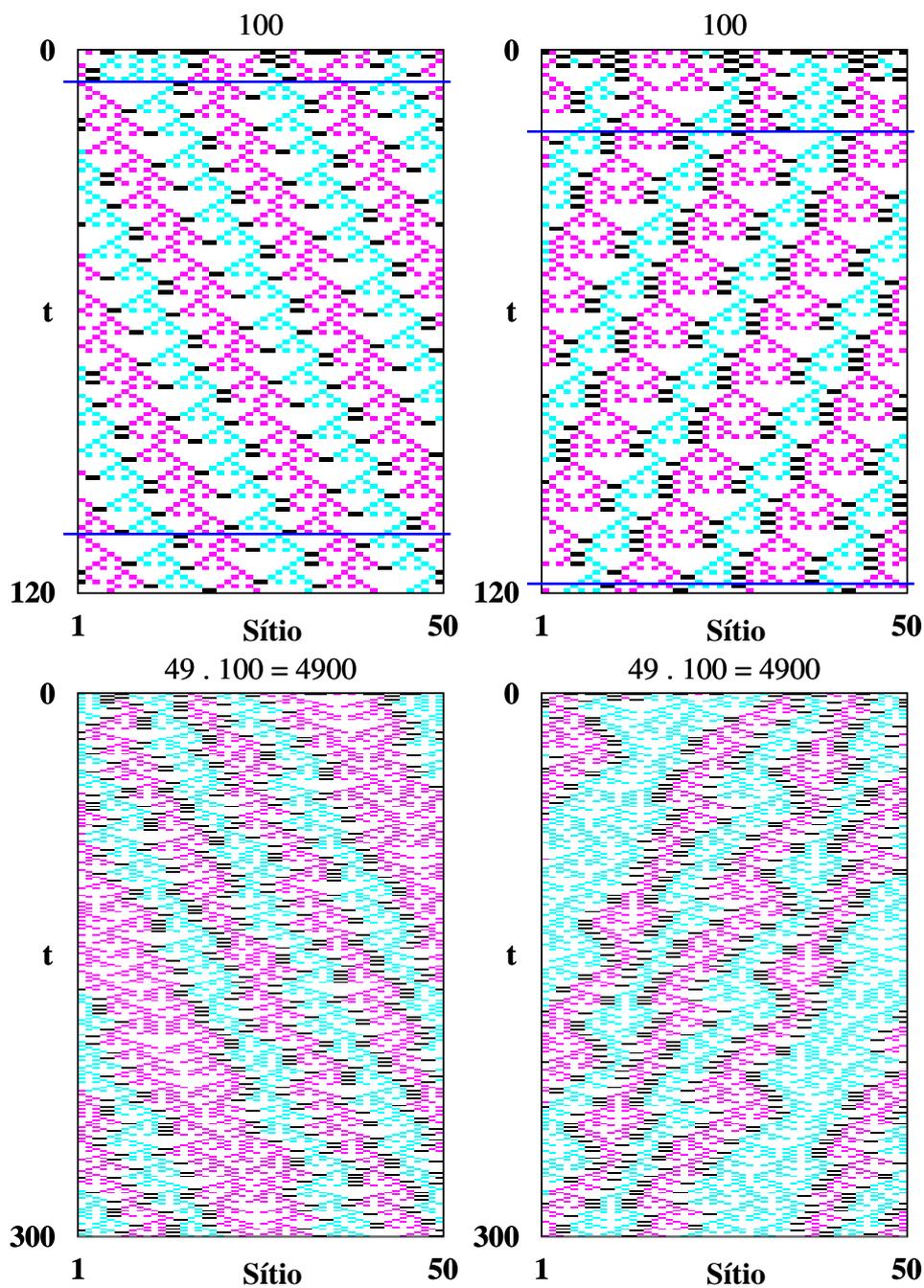
**Figura 4.4:** Padrões periódicos múltiplos de 14. O número acima da figura indica o período da evolução temporal apresentada. Vemos que no caso de período igual a 56 passos temporais, apesar do período ser o mesmo os padrões observados são diferentes, tanto na estrutura dos domínios quanto no deslocamento dos kinks.

estacionários, e evoluem sobre um fundo de triângulos que é sempre o mesmo; o que muda neste caso de uma evolução para outra é a posição dos kinks na rede, bem como a distância entre eles, assim como ocorre para período igual a 14.

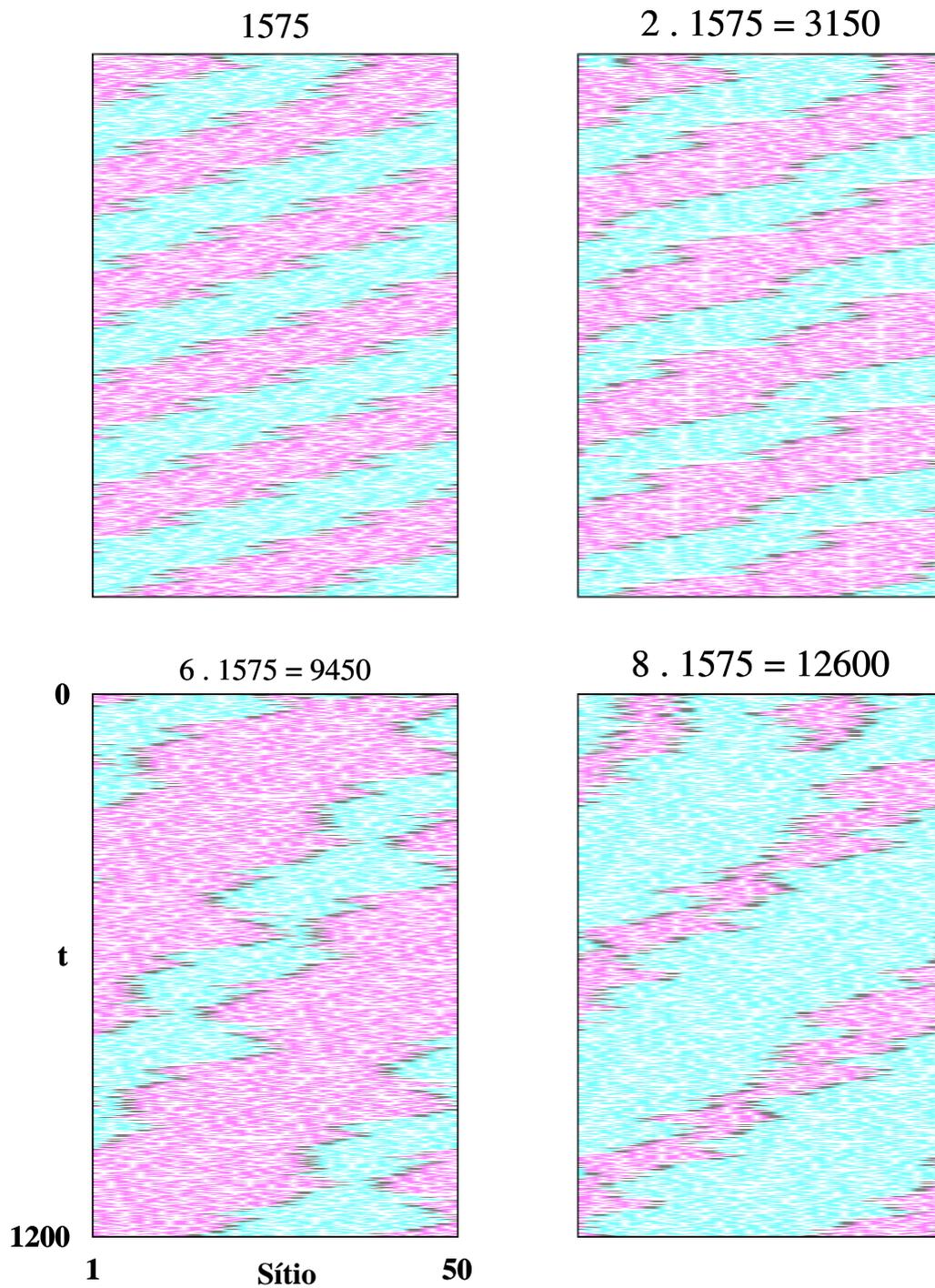
Para período igual a 252, que é o valor de período mais abundante no caso em que os kinks não se aniquilam, encontramos diversos tipos de comportamento, dos quais dois exemplos estão na figura 4.5. Vemos que existem padrões periódicos onde os kinks se deslocam muito e outros onde os kinks se deslocam pouco. Além disso a figura 4.3 é um exemplo de configuração com período igual a 252 onde os kinks são espacialmente estacionários. Tanto para período igual a 252 quanto para período igual a 126, o número de kinks presentes no



**Figura 4.5:** Evoluções temporais ainda com períodos múltiplos de 14. O número acima da figura indica o período da evolução temporal. Vemos que para período igual a 126 os kinks são sempre espacialmente estacionários, e também que a estrutura de triângulos é a mesma, assim como ocorre para período igual a 14; o que muda é apenas a posição dos kinks na rede. Já para o caso de período igual a 252 a variedade de comportamentos encontrada é bem maior. As flutuações dos kinks dentro de um período podem ser pequenas ou grandes, relativamente.



**Figura 4.6:** Evoluções com períodos múltiplos de 100. Vemos que para período igual a 100 os kinks gerados são viajantes e que existem pelo menos duas possibilidades de fundo e deslocamento dos kinks. Note que neste caso os kinks não oscilam e se deslocam perfeitamente em diagonal, ao contrário do que ocorre nas figuras para período igual a 4900. No caso de período igual a 4900, como o período é muito grande, cortamos a evolução antes de observar uma repetição. Observamos outra característica em comum neste caso: o número de kinks no padrão periódico é igual a seis.



**Figura 4.7:** Exemplos de padrões periódicos múltiplos de 1575. A legenda da figura inferior esquerda é a mesma para as demais. Cada padrão periódico múltiplo deste valor apresenta dois kinks viajantes. Como o período é muito grande cortamos a evolução temporal antes que o sistema completasse um período.

padrão periódico é igual a dois.

Nas figuras 4.6 e 4.7 vemos exemplos de padrões periódicos com kinks viajantes. Nas figuras superiores de 4.6 vemos períodos iguais a 100. Neste caso os kinks deslocam-se em diagonal, sem realizar oscilações. Talvez esse seja o motivo de uma periodicidade helicoidal com período tão pequeno em relação aos outros períodos observados. Apesar do fundo e do deslocamento dos kinks ser bem regular, ao contrário do que foi observado para período igual a 14 e 126, existem pelo menos dois tipos de fundo diferentes. A outra condição inicial que encontramos com período igual a 100, é equivalente a primeira figura apresentada com período igual a 100, porém as estruturas se deslocam em outro sentido. Ainda na figura 4.6, as duas figuras inferiores mostram padrões periódicos de período 4900. Neste caso os kinks não se deslocam perfeitamente em diagonal, mas estes padrões ainda guardam semelhança com os encontrados para período 100, pois possuem seis kinks viajantes. Finalmente, a figura 4.7, mostra exemplos de períodos múltiplos de 1575. Neste caso os padrões periódicos múltiplos apresentam dois kinks viajantes.

Como vimos em detalhe para o caso de  $N = 50$ , os períodos obtidos para a situação em que os kinks não se aniquilam totalmente são distribuídos em valores extremamente regulares. Existem apenas poucos valores de período básicos, os demais são apenas múltiplos deles. Esta regularidade na distribuição nos períodos é muito interessante, pois estamos trabalhando com uma regra de classe 3, que supostamente deveria gerar caos tanto no espaço quanto no tempo (como vimos no capítulo 2). Portanto não seria esperado encontrar nem períodos nem tantas regularidades na distribuição dos valores de período.

Estudamos também outros tamanhos de rede, como por exemplo  $N = 48, 60, 64, 90, 120$  e as regularidades observadas foram parecidas. Existem basicamente poucos valores de período possíveis e alguns destes valores se relacionam por serem múltiplos. Isto mostra que as regularidades observadas para o caso de  $N = 50$  não são peculiaridades deste tamanho específico de autômato mas, dentro da amostragem observada, parecem ser características genéricas da regra 18. As tabelas com as distribuições de período para estes tamanhos

adicionais estão no apêndice A.

### 4.3 Regularidades no período e aditividade

Até aqui estudamos o caso em que os kinks não se aniquilam completamente durante o transiente, o tipo de movimento executado pelos kinks no regime periódico e as regularidades nos valores de período. Porém, quando consideramos a situação em que o sistema entra no regime periódico com a aniquilação completa dos kinks, em vez do caos pressuposto para a classe 3 da regra 18, encontramos ainda mais regularidades. Por exemplo, para o tamanho de rede  $N = 50$ , encontramos um único valor de período: 2046 passos temporais. Situação semelhante foi observada para os outros tamanhos de sistema estudados. Por exemplo, para  $N = 48$  encontramos a maioria dos períodos iguais a 16 e também, períodos iguais a 8 e 2, o que mostra que no caso da aniquilação completa dos kinks existem ainda mais regularidades no regime periódico. Apresentamos mais resultados para o caso em que todos os kinks se aniquilam no apêndice A.

Quando ocorre a aniquilação completa dos kinks, resta na evolução temporal do autômato apenas um único domínio, como vemos na figura 4.1. Quando a evolução temporal pela regra 18 apresenta apenas um domínio, significa que um conjunto inteiro de sítios está sempre assumindo valor nulo. Lembrando da seção 3.1, as cores utilizadas para definir os domínios são utilizadas de acordo com a natureza par ou ímpar da soma  $i + t$ . Se temos apenas sítios azuis ativos após a aniquilação completa dos kinks, significa que todos os sítios com  $i + t$  par estão sempre nulos, pois não vemos nenhum sítio rosa no meio do domínio azul.

Temos então uma subrede de sítios totalmente inativos dentro do domínio que resta após a aniquilação completa dos kinks. Note que o mesmo ocorre dentro dos domínios quando ainda temos kinks, dentro de um domínio rosa todos os sítios com  $i + t$  ímpar estão nulos, e para domínios azuis todos os sítios com  $i + t$  par estão sempre nulos. Portanto a dinâmica da regra 18 define duas subredes, que dependendo da cor do domínio em questão pode ter

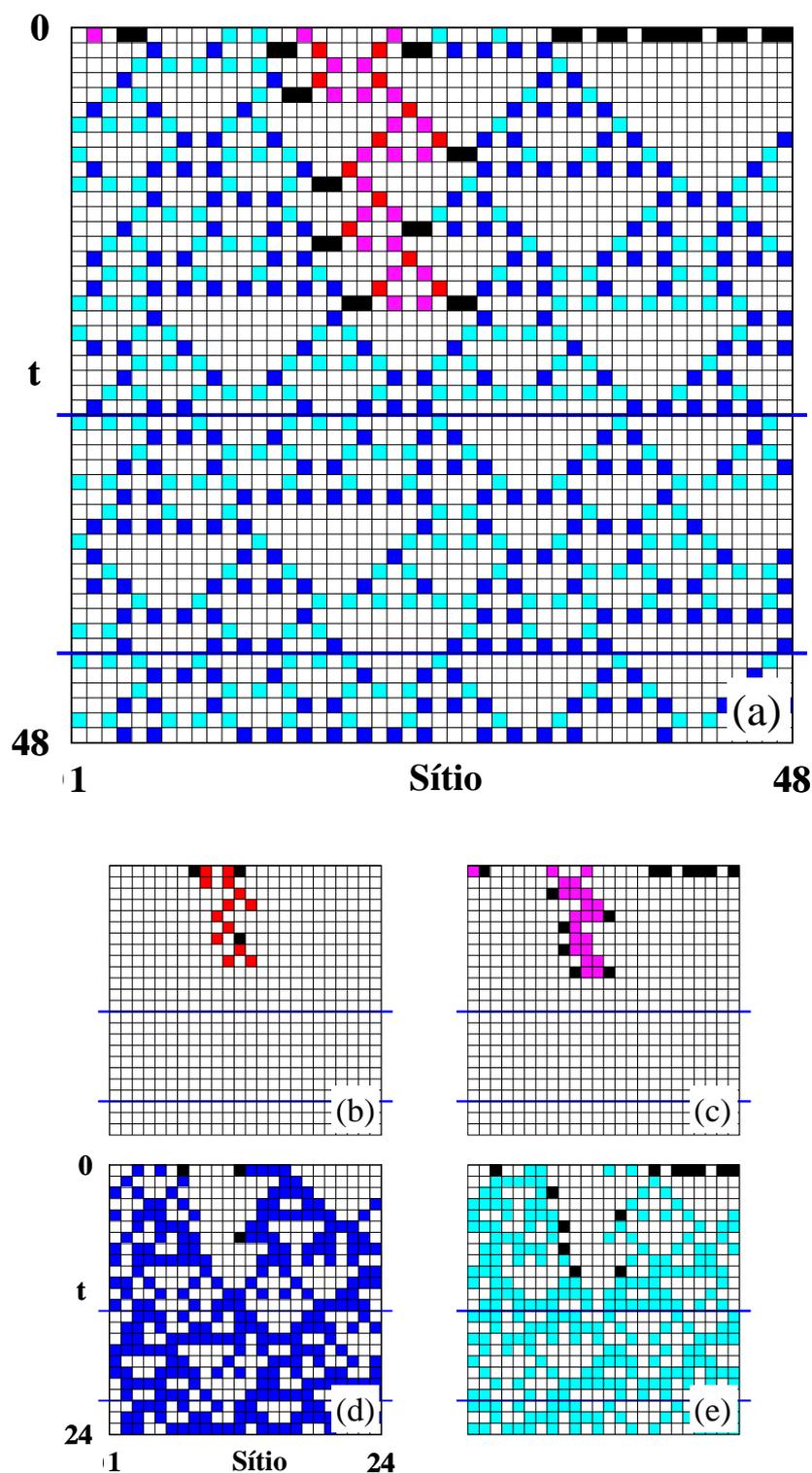
todos os sítios nulos ou pode apresentar atividade. Pela forma que as subredes são definidas, uma para  $i + t$  par e outra para  $i + t$  ímpar, os sítios pertencentes a cada subrede estão intercalados da mesma forma que os quadrados pretos e brancos num tabuleiro de xadrez.

Como existe uma subrede de sítios obrigatoriamente nulos quando temos apenas um domínio, a dinâmica do sistema parece ocorrer apenas na subrede que está ativa. São estes os sítios que irão mudar de valor pela atualização executada pela regra 18. Grassberger [25, 26] apresentou uma descrição da dinâmica que ocorre quando resta apenas um domínio na evolução temporal pela regra 18. Nestes artigos encontramos a afirmativa de que em uma região livre de kinks a evolução na subrede não-nula é de acordo com a regra linear 90.

Quando todos os kinks foram aniquilados temos apenas um domínio e uma subrede onde ocorre toda atividade do sistema. Então analisando a afirmativa acima a atividade na subrede ativa está determinada não pela regra 18 e sim pela regra 90. Para visualizar como ocorre esta decomposição da evolução temporal pela regra 18 na regra 90, vamos separar a partir de uma evolução temporal pela regra 18 os sítios que pertencem às duas subredes diferentes. Quando não tivermos mais kinks uma das figuras será completamente nula, enquanto a atividade estará totalmente na outra subrede.

Porém ao separar as duas subredes existem dificuldades em definir as vizinhanças dos sítios que pertencem à mesma subrede, visto que eles estão intercalados em um xadrez. Abaixo de um sítio no xadrez não encontramos um sítio que pertença à mesma subrede, mas pertencente a outra subrede. Para observar então se e como a evolução pela regra 18 pode ser efetivamente reduzida a uma evolução pela regra 90, vamos dentro de cada subrede separar ainda as linhas pares das linhas ímpares. Com isso sanamos os problemas da definição de Grassberger em relação a vizinhança.

Na figura 4.8 temos um exemplo de evolução pela regra 18 que foi decomposta em quatro diagramas espaço-tempo. As figuras (b) e (c) mostram a subrede inativa após a aniquilação dos kinks; a figura (b) as linhas ímpares desta subrede e a figura (c) as linhas pares. Já as figuras (d) e (e), mostram a subrede ativa após a aniquilação dos kinks, a figura (d) as linhas



**Figura 4.8:** Figura (a): evolução temporal pela regra 18 com sítios iguais a 1 pintados de forma a identificar para qual figura menor eles pertencem. Nas figuras (b) e (c) a aniquilação dos kinks faz com que toda a atividade seja extinta, restando nestas figuras apenas sítios nulos. Já os diagramas espaço-tempo nas figuras (d) e (e), após a aniquilação dos kinks, evoluem pela regra 90 e não pela regra 18 que os gerou.

ímpares e a figura (e) as linhas pares. Na figura (a) pintamos os sítios iguais a 1 sinalizando a qual diagrama espaço-tempo menor eles pertencem. Note que da figura grande também extraímos os sítios iguais a 0 que estão nas figuras menores, porém não os colorimos de forma diferente na figura maior.

Utilizando a afirmativa de que na região livre de kinks a subrede não-nula evolui pela regra 90, sabemos que as figuras (d) e (e) na figura 4.8 evoluem pela regra 90 quando ocorre a aniquilação completa dos kinks. Porém é crucial perceber que antes da aniquilação dos kinks ocorrer, existem fronteiras entre os domínios onde não temos como decidir a evolução pela regra 90. Portanto a representação da regra 18 pela regra 90 só é interessante para a análise da evolução temporal quando não tivermos mais estas fronteiras, e o autômato possuir apenas uma subrede ativa que tem a evolução das linhas pares quando dispostas de maneira consecutiva completamente determinada pela regra 90, assim como ocorre para as linhas ímpares.

Como visto na seção anterior, cerca de 60% das evoluções geradas para  $N = 50$  tem todos os kinks aniquilados completamente antes de entrar no regime periódico. Também foi mostrado que os valores de período encontrados neste caso são bem mais regulares do que os valores encontrados para o caso em que os kinks não se aniquilam completamente antes do regime periódico. Por exemplo, para as 150000 condições iniciais estudadas, todas apresentaram o mesmo valor de período quando os kinks se aniquilaram completamente, 2046 passos temporais. Ao analisar as evoluções geradas pela regra 90 na figura 4.8, não vemos diferença qualitativa em relação à evolução pela regra 18; os padrões gerados tanto no espaço quanto no tempo aparentam ser caóticos, visto que a regra 90 também pertence à classe 3.

Porém existe uma característica muito importante que deve ser levada em conta no estudo de evoluções temporais pela regra 90: a regra 90 é uma regra aditiva. As regras aditivas fazem a atualização dos sítios a partir de uma combinação linear dos valores dos sítios da vizinhança. A regra 90 é o exemplo mais simples de regra aditiva, e atualiza o sítio

central para o valor 1 apenas quando os valores dos dois primeiros vizinhos forem diferentes, independente do valor do sítio central. A regra 90 é escrita da seguinte forma:

$$S_i^{(t)} = S_{i-1}^{(t-1)} + S_{i+1}^{(t-1)} \pmod{2}, \quad (4.3.1)$$

ou seja, como uma combinação linear dos valores dos dois primeiros vizinhos do sítio  $i$ . Qualquer regra com  $r$  vizinhos cujos sítios podem assumir  $k$  valores, que possa ser escrita na forma:

$$S_i^{(t)} = \alpha_{-r} S_{i-r}^{(t-1)} + \dots + \alpha_0 S_i^{(t-1)} + \dots + \alpha_r S_{i+r}^{(t-1)} \pmod{k} \quad (4.3.2)$$

é uma regra aditiva.

Esta forma simples de escrever uma regra aditiva torna possível obter diversas propriedades matemáticas a respeito da evolução temporal executada por uma regra aditiva. *Martin, Odlyzko e Wolfram* [34] usaram uma representação polinomial para calcular a evolução temporal do autômato celular e obter regularidades geradas pelas regras aditivas. Além da evolução a partir dos polinômios, outra proposta matemática foi feita por *Guan e He* [35] a fim de determinar aspectos da evolução temporal de autômato por regra aditivas onde os autores tratam autômatos aditivos utilizando matrizes. Além destes, existem diversos estudos que obtêm propriedades regulares em regras aditivas, como [36, 37, 38, 39, 40, 35]. Além de ter a vantagem de previsão de várias propriedades matemáticas, as regras aditivas tem aplicação em criptografia como em dois recentes trabalhos [41, 42].

Entre as propriedades encontradas em regras aditivas está o *princípio de superposição linear*, que gera períodos extremamente regulares como os observados para o caso em que todos os kinks se aniquilam. Com o objetivo de explicar as regularidades encontradas para os poucos períodos remanescentes da regra 18, vamos utilizar a notação polinomial da referência [34] para descrever brevemente o princípio de superposição linear. Na representação

polinomial cada atualização do sistema é feita pela seguinte operação:

$$A^{(t+1)}(x) = T(x)A^{(t)}(x) \pmod{(x^N - 1)}, \quad (4.3.3)$$

o polinômio  $A^{(t)}(x)$  equivale ao estado do autômato celular no tempo  $t$  e é determinado em função dos valores dos  $N$  sítios pela seguinte expressão:

$$A^{(t)}(x) = \sum_{i=0}^{N-1} S_i^{(t)} x^i, \quad (4.3.4)$$

onde o coeficiente  $S_i^{(t)}$ , que multiplica  $x$  elevado a potência  $i$ , é o valor que o sítio  $i$  assume no tempo  $t$ . A variável  $x$  é usada apenas para converter o estado dos sítios do autômato em um polinômio e vice-versa, nunca sendo atribuído valor à variável  $x$ .

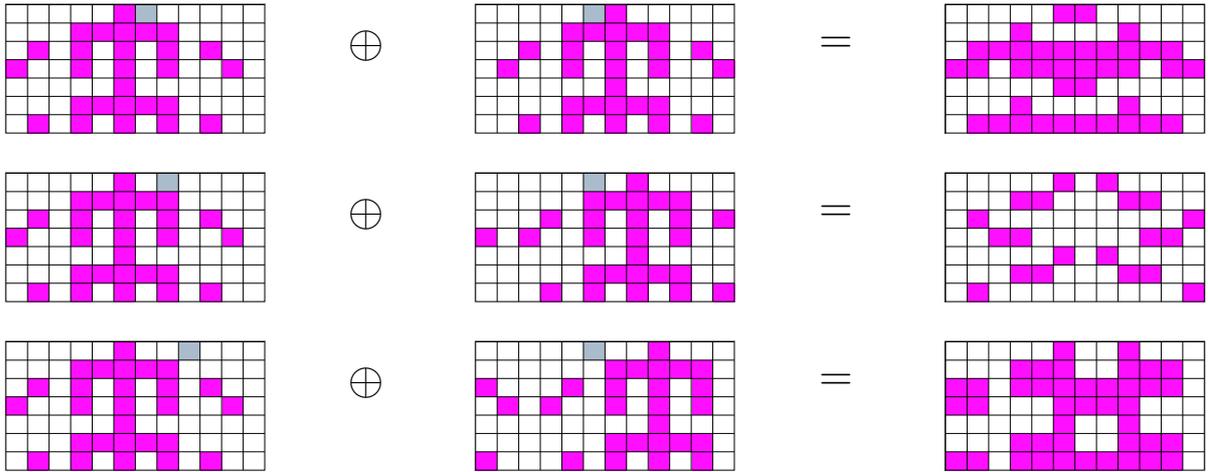
O estado de qualquer autômato celular a princípio pode ser representado na forma de um polinômio  $A^{(t)}(x)$  como o que está na equação 4.3.4. Mas apenas para regras aditivas é possível escrever o polinômio  $T(x)$  que executa a evolução temporal do polinômio de estado  $A^{(t)}(x)$ . O polinômio  $T(x)$  é escrito em função dos coeficientes  $\alpha$  que definem a regra aditiva, e estão na equação 4.3.2.  $T(x)$  é dado por:

$$T(x) = \alpha_{-r}x^r + \dots + \alpha_0 + \dots + \alpha_r x^{-r}. \quad (4.3.5)$$

O princípio da superposição linear é então obtido a partir da observação de que o polinômio que representa o estado do autômato celular pode ser decomposto em uma soma de vários polinômios módulo dois, por exemplo como foi feito aqui para o polinômio que representa o estado inicial, que foi decomposto em três polinômios,

$$A^{(0)}(x) = p_1^{(0)}(x) \oplus p_2^{(0)}(x) \oplus p_3^{(0)}(x). \quad (4.3.6)$$

Neste caso decomposemos  $A^{(0)}(x)$  em três polinômios, mas podemos decompor em quan-



**Figura 4.9:** Forma alternativa de gerar as evoluções temporais usando uma evolução “base” de regra aditiva. Superpondo as figuras da esquerda e do centro (“base”) encontramos a evolução temporal que está na figura da direita, que também pode ser gerada pela atualização passo a passo dos sítios. Nas figuras da esquerda e centro, o sítio cinza na condição inicial apenas foi destacado para marcar a posição do outro sítio não-nulo na condição inicial das figuras da direita, para as quais queremos obter a evolução temporal a partir da superposição.

tos quisermos. Esta decomposição equivale a separar a condição inicial em três condições iniciais diferentes, cuja soma mod 2 seja igual à condição inicial representada por  $A^{(0)}(x)$ .

Para evoluir  $A^{(0)}(x)$  um passo de tempo fazemos a seguinte multiplicação,

$$A^{(1)}(x) = T(x)A^{(0)}(x) \quad \text{mod } (x^N - 1), \quad (4.3.7)$$

que equivale a,

$$\begin{aligned} A^{(1)}(x) &= T(x)p_1^{(0)}(x) + T(x)p_2^{(0)}(x) + T(x)p_3^{(0)}(x) = \\ &= p_1^{(1)}(x) \oplus p_2^{(1)}(x) \oplus p_3^{(1)}(x). \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Ou seja, a evolução temporal de  $A^{(0)}(x)$  é idêntica à soma das evoluções temporais de  $p_1^{(0)}(x)$ ,  $p_2^{(0)}(x)$  e  $p_3^{(0)}(x)$  separadas. Podemos então decompor qualquer condição inicial em várias condições iniciais, executar suas evoluções separadas e então somar o resultado para obter a evolução temporal desejada. Para simplificar o problema de determinar como será

a evolução temporal de uma condição inicial, podemos realizar a decomposição em várias condições iniciais com apenas um sítio não-nulo. O problema de determinar a evolução temporal se limita a determinar como é a evolução temporal a partir da condição inicial com um sítio não nulo, que chamamos de evolução “base”.

Podemos decompor qualquer condição inicial com  $C$  sítios não-nulos na condição inicial em  $C$  condições iniciais com apenas um sítio não-nulo. Na figura 4.9 geramos três evoluções temporais pela regra 42 também aditiva e totalística ( $r = 2$ ), superpondo duas evoluções temporais, obtidas a partir da evolução “base” mais deslocamentos. Os deslocamentos são realizados para posicionar o sítio não-nulo na posição respectiva a um sítio não-nulo na condição inicial que queremos estudar.

Além disso, como todas as evoluções são geradas a partir da superposição de uma única evolução “base”, existem propriedades em comum nas evoluções temporais das condições iniciais para os autômatos de mesmo tamanho, entre elas o tamanho do período. O tamanho do período temporal nos autômatos aditivos é um exemplo de propriedade extremamente regular. O tamanho do período temporal para um autômato aditivo de tamanho  $N$ , partindo de qualquer condição inicial, deve dividir sem resto o tamanho de período encontrado para a condição inicial com apenas um sítio não-nulo.

Isto ocorre porque estamos somando várias evoluções “base” que vão se repetir com um determinado período, a configuração gerada obrigatoriamente deve se repetir com no mínimo o mesmo período. Se repetir com período inferior deve ainda assim ter um período temporal divisor do período temporal da evolução “base”. Com isso antes de executarmos a evolução temporal de uma certa condição inicial, é possível conhecer os valores de período que esta evolução temporal poderá apresentar.

O período encontrado para a evolução temporal de uma condição inicial só não será igual ao período da evolução “base” quando também ocorre período espacial no padrão periódico. Quando isto ocorre estamos simulando dois ou mais autômatos de tamanho igual ao período espacial, que possuem período temporal menor, porém divisor do período da

evolução “base”.

Os períodos extremamente regulares encontrados para regras aditivas explicam porque quando temos a aniquilação completa dos kinks encontramos apenas um valor de período ou ainda divisores deste valor. Neste caso temos um autômato que evolui pela regra 18, mas quando decomposta a evolução da forma adequada introduzida neste trabalho, vemos que ela pode ser inteiramente determinada pela regra 90, que tem o tamanho de período determinado apenas pelo tamanho do sistema.

As regras aditivas possuem outras propriedades interessantes de serem estudadas, como o tamanho do transiente e a forma dos diagramas de transição de estado [12, 43, 44], entre outras propriedades e aplicações que este tipo de regra possui. Neste trabalho exploramos as propriedades do período da regra 90 (aditiva) apenas para descrever a regularidade dos períodos observados no caso em que os kinks se aniquilam totalmente, mas a aditividade é certamente uma propriedade que implica em mais conseqüências na evolução temporal do autômato além das que foram apresentadas neste trabalho.

## Capítulo 5

# Conclusões

Neste trabalho estudamos autômatos celulares binários com comportamento complexo que geram padrões caóticos tanto no espaço quanto no tempo. Regras que apresentam este tipo de comportamento pertencem à classe 3, que tem analogia nos sistemas contínuos com sistemas que apresentam atratores caóticos. Reconsideramos em detalhes a observação interessante feita por Grassberger [25, 26], sobre a existência de kinks e domínios para a regra 18.

Mostramos que a maneira original de Grassberger para representar kinks e domínios não é a mais adequada para se visualizar a difusão e que os resultados originais apresentados não estão completos no que tange aos regimes dinâmicos apresentados pelo autômato. Para sanar a deficiência da representação de kinks e domínios, propusemos uma representação alternativa, envolvendo o diagrama espaço-tempo, que se mostrou adequada para a identificação dicotômica dos domínios.

Quanto à evolução temporal dos kinks, diversos aspectos foram analisados. Vale a pena lembrar que o movimento de um kink isolado na rede executa uma caminhada aleatória, porém nas evoluções temporais geradas aleatoriamente a rede contém inicialmente vários kinks que passam eventualmente a interagir, deixando, portanto, de apresentar o comportamento aleatório de um kink isolado. Estudamos como a interação e aniquilação dos kinks ocorre com o tempo e caracterizamos a existência de três escalas de tempo na evolução temporal regida pela regra 18. As escalas de tempo da regra 18 são as mesmas observadas

para a regra 20 [20], um conhecido exemplo da classe 4, porém envolvendo uma regra bem mais complicada, contendo cinco sítios, não apenas três como no caso da regra 18. Para a regra 20, o que determina as escalas de tempo são os *gliders* na rede, enquanto que na regra 18 são os kinks que controlam tais escalas.

A primeira escala de tempo no caso das regras 20 e 18 é uma fase de termalização, onde a atividade ou os kinks colidem e se aniquilam com elevada frequência. Já na segunda escala de tempo, ou segundo transiente, encontramos estruturas viajantes que colidem e interagem entre si; como já mencionado, para a regra 20 estas estruturas são gliders e na regra 18 kinks. Por fim, a dinâmica entra no regime periódico. Como a velocidade de interação entre os kinks é um dos fatores que determina as escalas de tempo, ela pode ser usada como um critério que permite identificar a duração dessas escalas. Tal critério, introduzido no capítulo 3, conta o número de kinks que ainda não foram aniquilados na rede. Apesar de ser um critério simples, o número de kinks não aniquilados permite observar diversos aspectos relevantes a respeito das escalas de tempo da regra 18. Utilizamos este critério para determinar como a quantidade de kinks e o tamanho do sistema afetam a duração de cada escala de tempo. Controlando adequadamente as condições iniciais, podemos distribuir os kinks a uma mesma distância na rede, gerando domínios com essencialmente o mesmo tamanho. Mostramos que evoluções temporais com domínios de mesmo tamanho na condição inicial, porém geradas em redes de tamanho diferentes, apresentam escalas de tempo com a mesma duração. Isto parece indicar que o tamanho dos domínios determina a duração de cada escala de tempo, independente do tamanho do sistema. Este é um resultado esperado pois a proximidade entre os kinks é o que determina a velocidade com que as interações entre eles vão ocorrer.

Como o tamanho dos domínios na condição inicial determina a duração das escalas de tempo, variamos esta quantidade e observamos como a inclinação da curva da percentagem de kinks que não foram aniquilados varia com a redução no tamanho dos domínios. Vimos que a inclinação da curva no primeiro transiente aumenta quando reduzimos o tamanho dos domínios, e as retas se tornam cada vez mais próximas da vertical. Uma sugestão de

ampliação destes resultados é determinar como esta inclinação depende do tamanho dos domínios, determinando uma lei para a inclinação em função do tamanho dos domínios gerados na condição inicial.

Realizamos também o estudo da difusão na rede de vários kinks medindo o deslocamento quadrático médio dos kinks. Sabemos que um kink isolado na rede executa uma caminhada aleatória com coeficiente de difusão igual a  $D = \frac{1}{2}$ ; este coeficiente determina como é a curva do deslocamento quadrático médio. Obtivemos o deslocamento quadrático médio para condições iniciais com diferentes tamanhos de domínios. Mostramos que a aniquilação dos kinks afasta a curva do resultado esperado e, quanto menores os domínios, mais rápido ocorre este afastamento.

Estudamos também o regime periódico da regra 18. Determinamos a distribuição dos períodos para redes pequenas e estudamos em detalhe a rede com 50 sítios. Observamos que apesar da evolução temporal ser aparentemente caótica, a distribuição dos períodos é surpreendentemente regular pois, para o caso em que encontramos ainda kinks no regime periódico, vimos que os períodos encontrados se distribuem em poucos valores, sendo que os períodos maiores são meramente múltiplos dos períodos menores. Além de serem múltiplos, alguns períodos apresentam outras propriedades em comum, como o número de kinks no padrão periódico e a natureza do movimento executado pelos kinks. Quanto ao estudo destes padrões, seria interessante estender os resultados para outros tamanhos de rede e estudar o tipo de padrão periódico observado. Apesar do sistema apresentar poucos períodos possíveis, observamos uma variedade de comportamentos periódicos para os kinks e os domínios.

No caso em que ocorre a aniquilação total dos kinks antes do sistema entrar no regime periódico, observamos comportamentos ainda mais regulares do que os citados acima para o caso em que os kinks não se aniquilam completamente. Os valores de período foram sempre os mesmos para um determinado tamanho de rede ou são divisores de um valor principal que aparece com mais frequência. Quando ocorre a aniquilação total dos kinks a evolução temporal pela regra 18 apresenta uma característica até então não explorada: toda

a dinâmica do sistema se passa em uma subrede de sítios que, na realidade, tem sua dinâmica determinada pela regra 90. A regra 90 é aditiva e gera diversos comportamentos regulares, que dependem apenas do tamanho do sistema estudado, como por exemplo o tamanho do período. Daí vem a regularidade observada para os períodos da regra 18 quando ocorre a aniquilação completa dos kinks. As consequências que a aditividade acarreta na evolução temporal dos autômatos celulares por si já é um assunto interessante de ser estudado. Neste trabalho utilizamos a aditividade apenas para explicar a regularidade observada nos períodos da regra 18 quando ocorre a aniquilação completa dos kinks.

Mostramos com este trabalho que existem propriedades em comum para regras que são classificadas na literatura de maneira radicalmente distinta e que dependem da vizinhança com alcances diferentes. Isto mostra que parte do comportamento complexo observado em autômatos celulares é gerado principalmente pelo fato do sistema ser composto de vários componentes interagindo, e não tanto pela definição de uma regra específica. Não seria surpresa se as escalas de tempo observadas neste trabalho estivessem presentes em outras regras, com outros componentes que não sejam kinks determinando estas escalas. Além disso, a abundância de regularidades encontradas no período de regras de classe 3, mostra que o comportamento desta classe pode não ser tão caótico quanto aparentam as estruturas, quando observadas no diagrama espaço-tempo, sem o benefício da representação que introduzimos, dada pela equação 3.1.2.

## Apêndice A

# Distribuições de períodos

Neste apêndice mostramos tabelas com a distribuição de períodos para outros tamanhos de sistema estudados, mas que não foram discutidos no capítulo 4. Construímos as tabelas da mesma forma que fizemos para as tabelas 4.1 e 4.2. Mostramos os valores de período encontrados, bem como seus múltiplos, a frequência com que o período encontrado ocorre e a natureza dos kinks observados. Utilizamos em todos os casos 5000 condições iniciais para obter a distribuição dos períodos.

**Tabela A.1:** Períodos encontrados para rede com 48 sítios. Aqui mostramos os períodos observados para o caso em que existem kinks remanescentes quando o sistema entra no regime periódico, esta situação representa 1% das condições iniciais investigadas.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	Natureza
<b>252</b>	1·252	7	NT
6048	24·252	1	T
<b>2046</b>	1·2046	66	NT
49104	24·2046	4	T

Na tabela A.1, apresentamos os valores de período obtidos para uma rede com 48 sítios. Estudamos 5000 condições iniciais e destes apenas 1% entram no regime periódico sem que todos os kinks tenham sido aniquilados. Vemos com esses dados que a quantidade de condições iniciais com kinks remanescentes varia de acordo com o tamanho de rede estudado. Já para o caso em que todos os kinks se aniquilam, como discutido no capítulo 4, os valores de períodos observados são iguais a 16, 8 e 2. Porém o período que predomina neste caso é

16, para período igual a 8 encontramos apenas 8 condições iniciais que geram este valor e, para período igual a 2, apenas uma condição inicial.

**Tabela A.2:** Períodos encontrados para rede com 60 sítios para o caso em que existem kinks remanescentes. Das condições iniciais geradas, 32% entram no regime periódico sem que todos kinks tenham se aniquilado. Note que neste caso existe apenas um valor de período do qual os demais são múltiplos.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	Natureza
<b>62</b>	1·62	1601	NT
5580	90·62	24	T
9300	150·62	15	T

Para rede com 60 sítios os períodos obtidos para o caso em que existem kinks remanescentes no regime periódico estão na tabela A.2. Os períodos observados neste caso são múltiplos de apenas um valor. Quando ocorre a aniquilação de todos os kinks, os períodos são iguais a 60 e 30 passos temporais. Ainda existem condições iniciais que levam o sistema para o estado com todos os sítios nulos, com essa característica observamos 1720 condições iniciais.

**Tabela A.3:** Rede com 64 sítios para o caso em que existem kinks remanescentes. Das condições iniciais geradas, 72% entram no regime periódico sem que todos kinks tenham se aniquilado.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	Natureza
<b>60</b>	1·60	594	NT
4800	80·60	13	T
6720	112·60	3	T
<b>62</b>	1·62	2947	NT
5952	96·62	18	T
9920	160·62	40	T

Na tabela A.3 mostramos os períodos com kinks remanescentes para rede com 64 sítios. Para o caso em que todos os kinks se aniquilam encontramos um única possibilidade: o sistema entra no estado com todos os sítios nulos. Para rede com 60 também observamos

esta situação, porém esta não era a única possibilidade como ocorre aqui. Nas tabelas A.1, A.2 e A.3, vemos uma situação que não é tão regular quanto a observada para rede com 50 sítios; a natureza dos kinks nas configurações com períodos múltiplos não é sempre a mesma. Isto pode ocorrer por dois motivos, a natureza dos períodos múltiplos de fato não é sempre a mesma, ou como utilizamos menos condições iniciais aqui, estamos deixando de detectar um valor de período menor com kinks viajantes. Para o caso de uma rede com 90 sítios, vemos na tabela A.4 que este problema já não ocorre. Encontramos dois valores de período que não são múltiplos, e que possuem natureza diferentes. Ainda para rede com 90 sítios, no caso em que todos os kinks se aniquilam, encontramos apenas um valor de período: 8190 passos temporais.

**Tabela A.4:** Períodos para os quais existem kinks remanescentes, para rede com 90 sítios. Das condições iniciais geradas, 17% entram no regime periódico sem que todos kinks tenham se aniquilado.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	Natureza
<b>32</b>	1·32	239	NT
<b>8188</b>	1·8188	4	T

Finalmente na tabela A.5 apresentamos os valores de período para rede com 120 sítios. Este é o maior tamanho de rede para o qual estudamos as distribuições de período. Vemos na tabela que o sistema apresenta períodos maiores que 20000 passos temporais, o que demonstra a dificuldade em trabalhar com redes ainda maiores. No caso em que todos os kinks se aniquilam, encontramos apenas um valor de período: 120 passos temporais.

Analisando os resultados para distribuições de período apresentadas aqui, vemos primeiramente que a percentagem de condições iniciais que entram no regime periódico com kinks, varia muito em função do tamanho do sistema utilizado. Vemos que para  $N = 48$  por exemplo, este número é muito pequeno, cerca de 1% das condições iniciais, já para  $N = 50$ , este valor é cerca de 42% das condições iniciais. Dois tamanhos de rede tão próximos com percentagens tão diferentes indicam ser muito difícil prever a percentagem de condições

**Tabela A.5:** Períodos com kinks remanescentes para rede com 120 sítios. Das condições iniciais geradas, 19% entram no regime periódico sem que os kinks se aniquilem. Vemos que neste caso em especial encontramos alguns valores de período grandes, o que mostra a dificuldade em investigar a distribuição dos períodos quando observamos sistemas com muitos sítios.

Período	Múltiplos	Número de c.i.	Natureza
<b>62</b>	1·62	3	NT
124	2·62	848	NT
18600	300·62	5	T
26040	420·62	3	T
33480	540·62	2	T
<b>126</b>	1·126	37	NT
17640	140·126	1	T

iniciais que entram no regime periódico com kinks.

Além da variação irregular da percentagem de condições iniciais com kinks remanescentes no regime periódico, vemos também nestas tabelas que, a quantidade de períodos encontrados é muito pequena, e além disso podemos estabelecer relações entre esses valores. O que mostra que a regularidade observada para rede com 50 não está restrita a este tamanho de sistema.

# Referências

- [1] WOLFRAM, S. *A new kind of science*. Champaign: Wolfram Media, 2002.
- [2] ILACHINSKI, A. *Cellular automata*. Singapore: World Scientific, 2001.
- [3] CHOPARD, B.; DROZ, M. *Cellular automata modeling of physical systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [4] YACOUBI, S.E.; CHOPARD, B.; BANDINI, S.(Ed.). *Proceedings of the 7th International Conference on Cellular Automata for Research and Industry, Perpignan, France*. New York: Springer, 2006.
- [5] SLOOT, P.; CHOPARD, B.; HOEKSTRA, A.(Ed.). *Proceedings of the 6th International Conference on Cellular Automata for Research and Industry, Amsterdam, The Netherlands*. New York: Springer, 2005.
- [6] NEUMANN, J. von. The general and logical theory of automata. In: JEFFRESS, L.(Ed.). *Cerebral Mechanisms in Behavior: The Hixon Symposium*. New York: John Wiley and Sons, 1951. p. 1-41.
- [7] WOLFRAM, S. Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, v.55, p. 601-644, 1983.
- [8] WOLFRAM, S. Universality and complexity in cellular automata. *Physica D*, v.10, p. 1-35, 1984.

- [9] ULAM, S. On some mathematical problems connected with patterns of growth of figures. *Proceedings of Symposia in Applied Mathematics*, v. 14, p. 215-224, 1962.
- [10] BERKELAMP, E.; CONWAY, J.; GUY, R. *Winning ways for your mathematical plays*. Academic Press, 1982.
- [11] WOLFRAM, S. *Theory and applications of cellular automata*. Singapore: World Scientific, 1986.
- [12] SHREIM, A.; GRASSBERGER, P.; NADLER, W.; SAMUELSSON, B.; SOCOLAR, J.; PACZUSKI, M. Network analysis of the state space of discrete dynamical systems. *Physical Review Letters*, v. 98, p. 198701, 2007.
- [13] NOBE, A.; YURA, F. Linearizable cellular automata. *Journal of Physics A*, v. 40, p. 7159-7174, 2007.
- [14] ROHLF, T.; TSALLIS, C. Long-range memory elementary 1D cellular automata: Dynamics and nonextensivity. *Physica A*, v. 379, p. 465-470, 2007.
- [15] NINAGAWA, S. 1/f noise in elementary cellular automaton rule. *Lecture Notes in Computer Science*, v. 4135, p. 207-216, 2006.
- [16] ARRUTI, C.; MIZRAJI, E. Hidden potentialities. *International Journal of General Systems*, v. 35, p. 461-469, 2006.
- [17] COOK, M. Universality in elementary cellular automata. *Complex Systems*, v. 15, p. 1-40, 2004.
- [18] LI, W.; NORDAHL, M.G. Transient behavior of cellular automaton rule 110. *Physics Letters A*, v. 166, p. 355-339, 1992.
- [19] GALLAS, J.A.C.; HERRMANN, H.J. Spontaneous emergence of spatio-temporal order in class 4 automata. *Physica A*, v. 356, p. 78-82, 2005.

- 
- [20] GALLAS, J.A.C.; HERRMANN, H.J. Investigating an automaton of class 4. *International Journal of Modern Physics C*, v. 1, p. 181-191, 1990.
- [21] GUTOWITZ, H. A hierarchical classification of cellular automata. *Physica D*, v. 45, p. 136-156, 1990.
- [22] LANGTON, C.G. Computation at the edge of chaos: phase transitions and emergent computation. *Physica D*, v. 42, p. 12-37, 1990.
- [23] KAYAMA, Y.; ANADA, H.; IMAMURA, Y. Characteristic representation of elementary cellular automata. *Physics Letters A*, v. 198, p. 23-33, 1995.
- [24] ISRAELI, N.; GOLDENFELD, N. Coarse-graining of cellular automata, emergence, and the predictability of complex systems. *Physical Review E*, v. 73, p. 026203, 2006.
- [25] GRASSBERGER, P. New mechanism for deterministic diffusion. *Physical Review A*, v. 28, p. 3666-3667, 1983.
- [26] GRASSBERGER, P. Chaos and diffusion in deterministic cellular automata. *Physica D*, v. 10, p. 52-58, 1984.
- [27] ELORANTA, K.; NUMMELIN, E. The kink of cellular automaton Rule 18 performs a random walk. *Journal of Statistical Physics*, v. 69, p. 1131-1136, 1992.
- [28] BOCCARA, N.; ROGER, M. Block transformations of one-dimensional deterministic cellular automaton rules. *Journal of Physics A*, v. 24, p. 849-865, 1991.
- [29] BOCCARA, N.; NASSER, J.; ROGER, M. Particlelike structures and their interactions in spatiotemporal patterns generated by one-dimensional deterministic cellular-automaton rules. *Physical Review A*, v. 44, p. 866-875, 1991.
- [30] PIVATO, M. Defect particle kinematics in one-dimensional cellular automata. *Theoretical Computer Science*, v. 377, p. 205-228, 2007.

- [31] PIVATO, M. Algebraic invariants for crystallographic defects in cellular automata. *Ergodic Theory and Dynamical Systems*, v. 27, p. 199-240, 2007.
- [32] SHALIZI, C.R.; HASLINGER, R.; ROUQUIER, J.; KLINKNER, K.L.; MOORE, C. Automatic filters for the detection of coherent structure in spatiotemporal systems. *Physical Review E*, v. 73, p. 036104, 2006.
- [33] MARTINEZ, G.J.; ADAMATZKY, A.; MCINTOSH, H.V. Phenomenology of glider collisions in cellular automaton Rule 54 and associated logical gates. *Chaos, Solitons and Fractals*, v. 28, p. 100-111, 2006.
- [34] MARTIN, O.; ODLYZKO, A.M.; WOLFRAM, S. Algebraic Properties of Cellular Automata. *Communications in Mathematical Physics*, v. 93, p. 219-258, 1984.
- [35] GUAN, P.; HE, Y. Exact results for deterministic cellular automata with additive rules. *Journal of Statistical Physics*, v. 43, p. 463-478, 1986.
- [36] AHMED, E.; ELGAZZAR, A.S. Some mathematical results for cellular automata. *Physica A*, v. 373, p. 354-362, 2007.
- [37] CORDOVIL, R.; DILÃO, R.; da COSTA, A.N. Periodic orbits for additive cellular automata. *Discrete and Computational Geometry*, v. 1, p. 277-288, 1986.
- [38] SUTNER, K. Decomposition of additive cellular automata. *Complex Systems*, v. 13, p. 245-270, 2002.
- [39] TADAKI, S.; MATSUFUJI, S. Periodicity in one-dimensional finite linear cellular automata. *Progress of Theoretical Physics*, v. 89, p. 325-331, 1993.
- [40] MOOTHATHU, T.K.S. Set of periods of additive cellular automata. *Theoretical Computer Science*, v. 352, p. 226-231, 2006.
- [41] FUSTER-SABATER, A.; CABALLERO-GIL, P.; PAZO-ROBLES, M.E. Efficient Application of Hybrid 150/90 Cellular Automata to Symmetric Cryptography. In:

- 
- ALEXANDROV, V.N. et al. (Ed.). *International Conference on Computational Science (3)*. Springer, 2006. (Lecture Notes in Computer Science, v. 3993), p. 337-344.
- [42] FUSTER-SABATER, A.; CABALLERO-GIL, P. On the use of cellular automata in symmetric cryptography. *Acta Applicandae Mathematicae*, v. 93, p. 215-236, 2006.
- [43] WUENSCHÉ, A.; LESSER, M. *The Global Dynamics of Cellular Automata*. Massachusetts: Addison-Wesley, Reading, 1992.
- [44] STEVENS, J.G. On the construction of state diagrams for cellular automata with additive rules. *Information Sciences*, v. 115, p. 43-59, 1999.