
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MARCELO AUGUSTO RIBEIRO DE OLIVEIRA

TEORIA DA INFORMAÇÃO E APRENDIZAGEM
DE MÁQUINA APLICADAS A DINÂMICA DE
ANIQUILAÇÃO DE DEFEITOS EM CRISTAIS
LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Maringá, Outubro de 2025

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

MARCELO AUGUSTO RIBEIRO DE OLIVEIRA

TEORIA DA INFORMAÇÃO E APRENDIZAGEM DE
MÁQUINA APLICADAS A DINÂMICA DE ANIQUILAÇÃO
DE DEFEITOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS NEMÁTICOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Rafael Soares Zola

Maringá, Outubro de 2025

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
(Biblioteca Central - UEM, Maringá - PR, Brasil)

O48t

Oliveira, Marcelo Augusto Ribeiro de

Teoria da informação e aprendizagem de máquina aplicadas à dinâmica de aniquilação de defeitos em cristais líquidos nemáticos / Marcelo Augusto Ribeiro de Oliveira. -- Maringá, PR, 2025.

126 f. : il. color., figs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Rafael Soares Zola.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, 2025.

1. Cristais líquidos. 2. Teoria da informação. 3. Aprendizado de máquina. 4. Defeitos topológicos. I. Zola, Rafael Soares, orient. II. Universidade Estadual de Maringá. Centro de Ciências Exatas. Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 23.ed. 530.429

MARCELO AUGUSTO RIBEIRO DE OLIVEIRA

**TEORIA DA INFORMAÇÃO E APRENDIZAGEM DE MÁQUINA APLICADAS A
DINÂMICA DE ANIQUILAÇÃO DE DEFEITOS EM CRISTAIS LÍQUIDOS
NEMÁTICOS**

Dissertação apresentada à Universidade Estadual de Maringá, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre.

Aprovado em: Maringá, 10 de outubro de 2025.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Rafael Soares Zola – UTFPR/Apucarana e PFI/UEM
Orientador – Presidente

Prof. Dr. Italo Marcos Nunes de Oliveira – UFAL
Membro Externo

Prof. Dr. Haroldo Valentin Ribeiro – DFI/UEM
Membro Interno

Agradecimentos

Cada página desta dissertação carrega muito mais do que resultados e referências: ela carrega encontros, conversas, aprendizados, gestos silenciosos e a presença invisível de todos que caminharam ao meu lado e tornaram este trabalho possível.

À minha família — em especial, meus amados pais, Mario Antônio e Maria de Fátima, e minha irmã, Luana Vitória — por todo amor, apoio, incentivo, inspiração e, por incontáveis vezes, pela paciência e compreensão durante minhas diversas formas de ausência e silêncios, minha gratidão eterna. Sem vocês, esta conquista, a qual também é de vocês, não teria sido possível.

Ao meu orientador, Professor Dr. Rafael Soares Zola, expresso minha mais profunda e sincera gratidão. Agradeço pela confiança depositada, pela inestimável e constante paciência, pelos direcionamentos precisos e pelo rigor acadêmico. Sua presença, exemplo e ensinamentos foram fundamentais não somente para esta dissertação, mas para a minha formação como pesquisador.

Aos membros da banca examinadora, Professores Doutores Haroldo Valentin Ribeiro e Italo Marcos Nunes de Oliveira, expresso minha gratidão pelo tempo dedicado à leitura e avaliação deste trabalho. Suas críticas e sugestões foram de grande valor para o fortalecimento e a clareza desta dissertação. Agradeço igualmente aos membros suplentes, Professores Doutores Rodolfo Teixeira de Souza e Roberta Rarumy Ribeiro de Almeida, pela disponibilidade e pelo interesse em participar deste processo.

À Universidade Estadual de Maringá (UEM) e ao Programa de Pós-Graduação em Física (PFI), meu reconhecimento e gratidão pela oportunidade de fazer parte de um espaço onde o conhecimento é cultivado e compartilhado, e pela estrutura que forneceu sustentação a cada passo deste trabalho.

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) – Câmpus Apucarana – agradeço pela disponibilização da infraestrutura computacional utilizada para a geração dos dados desta pesquisa, recurso essencial para a realização deste projeto.

Aos professores do programa, que, com suas aulas e exemplos, ampliaram meus horizontes e conhecimentos e despertaram novas perspectivas.

Agradeço também aos professores que tive ao longo da trajetória acadêmica, desde a educação básica até a graduação, que, com seu exemplo, dedicação e pelo conhecimento e sabedoria que me transmitiram, despertaram e nutriram meu interesse pela ciência.

Aos colegas do grupo de pesquisa, especialmente ao Luiz, pela troca de ideias, aprendizados compartilhados e pelo companheirismo.

Aos funcionários da secretaria do programa, por toda a atenção e prontidão em ajudar com as questões burocráticas.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e toda a população brasileira, pelo indispensável apoio financeiro, na forma de bolsa de estudos, que

viabilizou a minha dedicação a este projeto.

E, por fim, a todos que, de forma direta ou indireta, visível ou discreta, tocaram este trabalho com sua presença e contribuíram para que este projeto se tornasse realidade, deixo registrado meu sincero e caloroso agradecimento. Cada contribuição é parte viva dessa conquista.

Resumo

Caracterizar a dinâmica de aniquilação de defeitos em cristais líquidos é fundamental para diversas aplicações, mas apresenta um desafio significativo devido à complexidade em acessar e quantificar os processos de relaxação envolvidos. Métricas físicas tradicionais, como o parâmetro de ordem, frequentemente não capturam toda a riqueza da evolução estrutural do sistema. Neste trabalho, propõe-se uma abordagem integrada que combina simulações numéricas baseadas na teoria de Landau-de Gennes com ferramentas da teoria da informação e do aprendizado de máquina, visando analisar e prever a dinâmica de relaxamento de cristais líquidos nemáticos e colestéricos. Investiga-se sistematicamente como a geometria do confinamento (placas paralelas e esferas), o ancoramento de superfície (planar, homeotrópico e híbrido) e a quiralidade influenciam a trajetória do sistema. Utiliza-se a Entropia de Permutação (H) e a Complexidade Estatística (C) como descritores dinâmicos, e emprega-se um conjunto de modelos de aprendizado profundo para tarefas de classificação e regressão. Os resultados mostram que a geometria é o fator dominante na definição do caminho de relaxamento — um processo gradual em placas paralelas contra um colapso rápido em esferas. Observa-se que métricas baseadas em teoria da informação (C e H) são descritores superiores, em comparação com a densidade de defeitos ou o parâmetro de ordem, para classificar condições de contorno, como o tipo de ancoramento, a partir da trajetória temporal. Além disso, estabelece-se que a característica do sistema surge cedo no processo de relaxamento e que a trajetória dinâmica contém mais informação preditiva do que o estado final de equilíbrio. Conclui-se que a interação entre simulação, teoria da informação e aprendizado de máquina fornece uma base para não somente caracterizar, mas também prever o comportamento de sistemas de matéria mole, validando a evolução da complexidade como um indicativo da dinâmica do sistema.

Palavras-chave: *Cristais Líquidos, Teoria de Landau-de Gennes, Dinâmica de Relaxamento, Entropia de Permutação, Complexidade Estatística, Aprendizado de Máquina, Defeitos Topológicos*

Abstract

Characterizing the defect annihilation dynamics in liquid crystals is fundamental for various applications. Still, it presents a significant challenge due to the complexity of accessing and quantifying the relaxation processes involved. Traditional physical metrics, such as the order parameter, often fail to capture the full richness of the system's structural evolution. This work proposes an integrated approach that combines numerical simulations based on the Landau-de Gennes theory with tools from information theory and machine learning to analyze and predict the relaxation dynamics of nematic and cholesteric liquid crystals. The influence of confinement geometry (slabs and spheres), surface anchoring (planar, homeotropic, and hybrid), and chirality on the system's trajectory is systematically investigated. Permutation Entropy (H) and Statistical Complexity (C) are utilized as dynamic descriptors, and a suite of deep learning models is employed for classification and regression tasks. The results show that geometry is the dominant factor dictating the relaxation pathway—a gradual process in slabs versus a rapid collapse in spheres. Information-theoretic metrics (C and H) are observed to be superior descriptors, compared to defect density or the order parameter, for classifying boundary conditions, such as anchoring type, from the time-series trajectory. Furthermore, it is established that the characteristic of the system emerges early in the relaxation process, and that the dynamic trajectory contains more predictive information than the final equilibrium state. It is concluded that the interaction between simulation, information theory, and machine learning provides a foundation not only to characterize but also to predict the behavior of soft matter systems, validating the evolution of complexity as an indicator of the system's dynamics.

Keywords: *Liquid Crystals, Landau-de Gennes Theory, Relaxation Dynamics, Permutation Entropy, Statistical Complexity, Machine Learning, Topological Defects*

Introdução	19
1 Fundamentos dos Cristais Líquidos	21
1.1 Definição e Características dos Cristais Líquidos	21
1.2 Classificação dos Cristais Líquidos	24
1.2.1 Fase Isotrópica	25
1.2.2 Fase Nemática	25
1.2.3 Fase Colestérica	26
1.2.4 Fases Esméticas	28
1.3 Ancoragem de Superfície	28
1.4 Geometrias de Confinamento	29
1.5 Parâmetro de Ordem Escalar e Tensorial	31
1.6 Defeitos Topológicos em CLs	34
2 Teoria de Landau-de Gennes	38
2.1 Energia Livre de Landau-de Gennes	38
2.1.1 Densidade de Energia Livre termodinâmica	39
2.1.2 Densidade de Energia Livre Elástica	40
2.1.3 Densidade de Energia Livre de Ancoragem	41
2.1.4 Energia Livre Total	44
3 Complexidade e Entropia	46
3.1 Entropia de Permutação	46
3.2 Entropia de Permutação baseada no Vizinho mais Próximo (K -NN PE) . . .	48
3.3 Complexidade Estatística (C)	50

3.4	O Plano Complexidade-Entropia ($C-H$)	52
4	Conceitos Fundamentais e Modelos em Aprendizado de Máquina	54
4.1	Metodologia de Aprendizado de Máquina	54
4.2	Arquiteturas de Aprendizado Profundo para Análise de Séries Temporais . .	56
4.3	Avaliação de Desempenho do Modelo	57
4.3.1	Métricas de Classificação	57
4.3.2	Métricas de Regressão	59
5	Caracterização da Dinâmica de Relaxamento de CLs via Teoria da Informação	61
5.1	Introdução	61
5.2	Dinâmica de Referência: O Sistema em <i>Bulk</i> (Não Confinado)	62
5.3	Dinâmica em Geometria de Placas Paralelas (<i>Slabs</i>)	65
5.3.1	Dinâmica da Complexidade e da Entropia	66
5.3.2	Evolução do Parâmetro de Ordem e Aniquilação de Defeitos	72
5.4	Análise da Dinâmica em Geometria Esférica (<i>Spheres</i>)	75
5.4.1	Velocidade da Dinâmica	77
5.5	Análise e Discussão Comparativa	80
5.5.1	Geometria como Fator Dominante da Dinâmica de Relaxamento . . .	80
5.5.2	O Papel da Quiralidade	83
5.5.3	Ancoramento	85
5.6	Síntese e Discussão Geral dos Resultados da Análise Física	86
6	Análise Preditiva da Dinâmica de CLs com Aprendizado de Máquina	87
6.1	Introdução	87
6.2	Análise de Linha de Base com Modelos de Aprendizado de Máquina Clássico	89
6.2.1	Resultados de Classificação	89
6.2.2	Resultados de Regressão	91
6.2.3	Análise da Importância das <i>Features</i>	92
6.3	Análise Preditiva com Redes Neurais Profundas e a Série Temporal Completa	93
6.3.1	Comparativo de Desempenho entre Arquiteturas de <i>Deep Learning</i> .	94
6.3.2	Poder Preditivo das <i>Features</i> da Teoria de Informação vs. Parâmetros Físicos	95
6.4	Investigando a Dinâmica Temporal para Previsão	97
6.4.1	Análise Progressiva: Quantidade Mínima de Dados para Previsão . .	97
6.5	Análise com Janela Deslizante	100
6.6	Análise Preditiva em Subconjuntos Segmentados	104
6.6.1	Segmentação por Geometria de Confinamento	104

6.6.2	Segmentação por Ancoramento de Superfície	107
6.6.3	Segmentação por Geometria e Ancoramento	108
6.7	Síntese e Discussão Geral dos Resultados da Análise de Aprendizado de Máquina	110
	Conclusão	113
	Referências bibliográficas	124
A	Hiperparâmetros dos Modelos de Aprendizado de Máquina	125

Lista de Figuras

1.1	Comparação esquemática entre os estados (a) sólido cristalino, (b) CL e (c) líquido. No estado sólido, há uma organização estrutural fixa; no líquido, ausência de ordem de longo alcance; enquanto os cristais líquidos exibem ordem direcional sem uma posição fixa. Fonte: Elaborada pelo autor (2025).	22
1.2	Representação esquemática da birrefringência em um meio opticamente anisotrópico. A luz incidente se divide em dois raios polarizados ortogonalmente: o raio ordinário, cujo campo elétrico oscila perpendicularmente ao eixo óptico e experimenta o índice de refração n_o , e o raio extraordinário, que oscila paralelamente e experimenta o índice n_e . Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	24
1.3	Representação esquemática da fase colestérica (N^*). A orientação das moléculas gira continuamente ao longo do eixo z , formando uma estrutura helicoidal com passo d . Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	27
1.4	Ilustração dos três principais tipos de ancoramento de superfície em CLs: (a) Homeotrópico, (b) Planar e (c) Híbrido. Fonte: Elaborado pelo autor (2025)	29
1.5	Diferentes geometrias de confinamento com ancoramento homeotrópico e quiralidade $N_0 = 0$, utilizadas em simulações de CLs. Em (a), a geometria <i>slab</i> e, em (b), a geometria <i>sphere</i> . Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	30

1.6	Exemplos de configurações do campo diretor em duas dimensões associadas a disclinações com diferentes cargas topológicas (s). A orientação de cada padrão é definida por um fator de fase θ_0 . As configurações mostradas são: (a) Campo uniforme sem defeitos ($s = 0$). (b) Disclinação radial ($s = +1$, $\theta_0 = 0$). (c) Disclinação tangencial ($s = +1$, $\theta_0 = \pi/2$). (d) Defeito <i>cometa</i> ($s = +1/2$, $\theta_0 = 0$). (e) Defeito <i>trevo</i> ($s = -1/2$, $\theta_0 = \pi/2$). (f) Disclinação hiperbólica ($s = -1$, $\theta_0 = 0$). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	36
2.1	Representação esquemática das três deformações elásticas fundamentais em um CL nemático: <i>splay</i> , <i>twist</i> e <i>bend</i> , que correspondem energeticamente aos termos da equação de Frank-Oseen. Fonte: Elaborado pelo autor (2025). . .	42
3.1	Ilustração da metodologia de simbolização de Bandt e Pompe. (a) Série temporal original e sua segmentação em vetores de estado. (b) Análise de um segmento com dimensão de embedding $d = 3$, mostrando a atribuição de ranks e os 6 padrões ordinais possíveis. (c) Distribuição de probabilidade relativa dos padrões ordinais encontrados na série temporal completa. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	48
3.2	Ilustração da metodologia da k -NN PE. (a) Conjunto de dados espaciais não estruturado. (b) Construção de um grafo k -NN (com $k=3$) sobre os dados. (c) Geração de uma série temporal a partir de uma caminhada aleatória no grafo, seguida pela aplicação do processo de simbolização de Bandt-Pompe com uma janela de embedding ($d=3$) para obter os padrões ordinais. (d) Cálculo da distribuição de probabilidade dos padrões e da entropia de Shannon final (k -NN PE). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	49
3.3	Exemplo esquemático do plano $C - H$, que relaciona a complexidade estatística (C) e a entropia de permutação (H). Sistemas ordenados se concentram no canto inferior esquerdo, sistemas aleatórios no canto inferior direito, e sistemas com estruturas complexas ocupam a região central do gráfico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	53
4.1	Matriz de confusão normalizada mostrando o desempenho de um classificador em três classes distintas (Classe A, Classe B e Classe C). Os valores nas células representam a porcentagem das previsões para cada classe verdadeira. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	58
5.1	Evolução temporal das isosuperfícies de defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria de <i>bulk</i> . A sequência mostra a aniquilação progressiva da rede de defeitos, partindo de um estado inicial desordenado (esquerda) até um estado final livre de defeitos (direita). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	63

5.2	Evolução temporal das métricas da teoria da informação para o sistema em geometria de <i>bulk</i> com diferentes quiralidades. (a) C descreve um arco característico, atingindo um pico de complexidade estrutural antes de decair para zero. (b) H decai monotonicamente, refletindo o contínuo processo de ordenamento do sistema. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	64
5.3	Trajетórias no plano CE-H para o sistema em geometria de <i>bulk</i> . A curva parabólica universal demonstra o caminho arquetípico do sistema, partindo da desordem (direita), passando por um pico de complexidade estrutural (topo) e convergindo para um estado de ordem perfeita (esquerda). Esta trajetória serve como um indicativo do relaxamento irrestrito. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	64
5.4	Evolução temporal das isosuperfícies de defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria de placas paralelas (<i>slab</i>). As linhas ilustram o processo para ancoragem híbrida (superior), planar (meio) e homeotrópica (inferior). Observa-se a aniquilação gradual dos defeitos, culminando em um estado final livre de defeitos, característico desta geometria. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	66
5.5	Visualização dos estados finais do campo diretor para a geometria de placas paralelas (<i>slab</i>). As colunas representam diferentes quiralidades (N_0 , $N_{0.5}$ e N_1), enquanto as linhas correspondem aos ancoramentos homeotrópico, planar e híbrido. As imagens destacam os estados de ordem e ausência de defeitos topológicos alcançados no equilíbrio. Fonte: Elaborado pelo autor (2025). . .	67
5.6	Comparação da dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes ancoramentos na geometria de placas paralelas (<i>slabs</i>), agrupada por quiralidades comuns. Cada <i>subplot</i> mostra a evolução temporal para um valor de quiralidade específico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	68
5.7	Dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes quiralidades em um sistema de placas paralelas (<i>slab</i>) com ancoramento homeotrópico. As curvas coloridas representam a média para cada quiralidade, enquanto a linha pontilhada é a média geral. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	68
5.8	Comparação da dinâmica da C em geometria de <i>slabs</i> para quiralidades $N_{-0.5}$, N_{-0} e $N_{0.5}$. A curva preta representa a linha de base do sistema em <i>bulk</i> . As curvas coloridas mostram como os diferentes tipos de ancoramento forçam a dinâmica a se desviar da trajetória irrestrita. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	69

5.9	Lado esquerdo: Tempo percentual em que a Complexidade Estatística atinge seu valor máximo, em função da quiralidade, para a geometria de <i>slabs</i> com ancoramento planar, homeotrópico e híbrido. Lado direito: Valor máximo da Complexidade Estatística em função da quiralidade para diferentes ancoramentos correspondentes à geometria de <i>slab</i> . Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	70
5.10	Dinâmica da Entropia de Permutação para diferentes quiralidades em um sistema de placas paralelas (<i>slab</i>) com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	71
5.11	Comparativo do valor máximo da entropia de permutação em função da quiralidade (N^*) para as geometrias de placas paralelas (<i>Slabs</i>). As curvas representam os diferentes tipos de ancoramento: planar (vermelho), homeotrópico (azul) e híbrido (verde). Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	72
5.12	Trajetórias no plano Complexidade-Entropia para diferentes quiralidades na geometria de <i>slab</i> com ancoramento homeotrópico, mostrando a evolução do sistema da desordem para a ordem por meio de um estado de máxima complexidade. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa	73
5.13	Comparação da dinâmica do parâmetro de ordem médio (S) para diferentes quiralidades (N) em geometria <i>slab</i> com ancoramento homeotrópico. O gráfico principal exibe a evolução temporal (normalizada) pelo tempo de aniquilação dos defeitos topológicos. O <i>inset</i> detalha a evolução completa para o caso nemático (N_0), onde o tempo é normalizado por um tempo final maior, mostrando a contínua organização do sistema mesmo após a aniquilação dos defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	74
5.14	Dinâmica da Densidade de Linhas de Defeito para diferentes quiralidades na geometria de <i>slab</i> com ancoramento homeotrópico. As curvas mostram o processo de aniquilação de defeitos ao longo do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	75
5.15	Taxa de decaimento dos defeitos em função da quiralidade para geometrias de <i>slabs</i> , comparando os ancoramentos Planar, Homeotrópico e Híbrido. No gráfico em questão, valores mais negativos no eixo y indicam uma aniquilação mais rápida. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	76

5.16	Evolução da dinâmica dos defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria esférica. As linhas mostram o processo para ancoragem híbrida, planar e homeotrópica. Diferentemente da geometria de <i>slab</i> , a dinâmica é caracterizada por um colapso que resulta em defeitos topológicos estáveis no estado final, devido às restrições impostas pela curvatura. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	77
5.17	Configurações do campo diretor nos estados finais para a geometria esférica. As diferentes combinações de ancoramento (linhas) e quiralidade (colunas) resultam em estruturas complexas. As imagens ilustram a formação de estruturas ordenadas, mas inevitavelmente defeituosas, como o defeito ouriço (homeotrópico, N_0) e outras configurações quirais. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	78
5.18	Lado esquerdo: Dinâmica da Média do Parâmetro de Ordem para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico, ilustrando o rápido aumento para um estado ordenado. Lado direito: Dinâmica da Densidade de Linhas de Defeito para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico, mostrando o <i>colapso</i> quase instantâneo da densidade de defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	79
5.19	Dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	80
5.20	Dinâmica da Entropia de Permutação para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	81
5.21	Comparação da dinâmica da Complexidade Estatística (C) em geometria <i>esférica</i> para as quiralidades -0,5 (a), 0 (b) e 0,5 (c). A curva preta pontilhada (linha de base do <i>bulk</i>) exibe um arco suave, enquanto as curvas de esferas (coloridas) mostram um pico agudo e instantâneo seguido por uma estabilização em um valor de complexidade final significativamente maior que zero. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	82
5.22	Valores finais da Entropia de Permutação (a) e da Complexidade Estatística (b) em função da quiralidade para os ancoramentos homotrópico (verde), híbrido (azul) e planar (vermelho) para a geometria esférica. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	82
5.23	Trajetórias no plano Complexidade-Entropia para a geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	83

5.24	Comparação direta da dinâmica da Complexidade Estatística para uma quiralidade fixa ($N^* = 1$) entre a geometria de <i>slab</i> (esquerda) e esférica (direita), destacando os diferentes caminhos de relaxamento. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	83
5.25	Valor máximo da Complexidade Estatística em função da quiralidade para diferentes ancoramentos correspondentes à geometria esférica. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	85
6.1	Evolução do F1- <i>Score</i> médio para a classificação de ancoragem de superfície em função do tempo, utilizando a estratégia ponto a ponto. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	92
6.2	Desempenho (R^2 médio) na regressão do parâmetro de ordem final em função do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	93
6.3	Importância relativa da Entropia de Permutação e da Complexidade Estatística para a regressão do parâmetro de ordem final em função do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	94
6.4	Matriz de confusão normalizada para a tarefa de classificação da magnitude da quiralidade, utilizando o modelo BiLSTM no conjunto de dados completo. A forte concentração de valores na diagonal principal (acima de 80% para a maioria das classes) demonstra a alta capacidade do modelo em distinguir entre diferentes intensidades de torção. As miscigenações ocorrem predominantemente entre classes vizinhas, indicando um aprendizado coerente da escala quiral.	96
6.5	Comparação da acurácia média na classificação do ancoramento de superfície utilizando diferentes conjuntos de <i>features</i> de entrada com as arquiteturas 1D-CNN e BiLSTM. As barras azuis, laranjas, verdes, vermelhas e roxas representam, respectivamente, os conjuntos de <i>features</i> (C e H), (Densidade de Defeitos), (C, H e Parâmetro de Ordem), (Parâmetro de Ordem) e (Parâmetro de Ordem e Densidade de Defeitos). Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	97
6.6	Evolução da acurácia média para a classificação de (a) geometria (b) Ancoramento e (c) Magnitude da quiralidade em função da porcentagem de dados iniciais da série temporal utilizados no treinamento. As curvas representam diferentes arquiteturas de <i>deep learning</i> . Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	99
6.7	Desempenho da regressão (R^2 <i>Score</i>) em função da porcentagem de dados iniciais utilizados. (a) Decaimento (aniquilação) dos Defeitos, (b) Parâmetro de Ordem e (c) Densidade de Defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	101

6.8	Desempenho ($F1-Score$) na classificação de diferentes alvos em função da posição inicial da janela deslizante (tamanho 20%). (a) Geometria, (b) Ancoramento e (c) A Magnitude da Quiralidade. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	103
6.9	Coefficiente de determinação (R^2) na regressão em função da posição da janela deslizante. (a) A predição da Densidade de Defeitos é mais forte na fase inicial da dinâmica. (b) A predição da Taxa de Decaimento (aniquilação) é quase perfeita, mas apenas com informações do início da simulação. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	105
6.10	Matrizes de Confusão dos modelos BiLSTM e 1D-CNN aplicados a diferentes geometrias (<i>Slab</i> /Esfera) e ancoragens (Planar, Homeotrópica e Híbrida), considerando a previsão da Magnitude da Quiralidade, com H e C como <i>features</i> de entrada. Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa. .	111

Lista de Tabelas

6.1	Resumo do melhor desempenho dos modelos de linha de base (<i>Random Forest</i> e <i>K-NN</i>) para cada alvo e estratégia. O valor apresentado para classificação é a acurácia máxima e para regressão é o R^2 máximo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	90
6.2	Resumo do desempenho das arquiteturas de <i>Deep Learning</i> utilizando 100% da série temporal de H e C. Os valores representam a Acurácia Média para classificação e o R^2 médio para regressão. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.	94
6.3	Desempenho dos melhores modelos de classificação (Acurácia média) para o conjunto de dados geral e subconjuntos segmentados. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	108
6.4	Desempenho dos melhores modelos de regressão (R^2 médio) para o conjunto de dados geral e subconjuntos segmentados. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).	109
6.5	Resultados de melhor desempenho para o alvo Magnitude da quiralidade nas tarefas de classificação, por geometria e ancoramento. Elaborado pelo autor (2025).	109
A.1	Hiperparâmetros explorados para os Modelos de Linha de Base.	125
A.2	Arquitetura e Hiperparâmetros dos Modelos de Aprendizado Profundo. . . .	126

A matéria condensada mole, especialmente os cristais líquidos (CLs), constitui uma classe de materiais de significativo valor científico e tecnológico, servindo de fundamento para tecnologias modernas e difundidas, como as telas de cristal líquido (CL) e sensores sofisticados. A riqueza de seu comportamento surge de um equilíbrio delicado entre entropia e energia, que dá origem a uma diversidade de fases com diferentes graus de ordem posicional e orientacional. No entanto, a caracterização e a previsão da dinâmica desses sistemas — especialmente em cenários de não equilíbrio, como o relaxamento de um estado desordenado ou a resposta a confinamentos geométricos — continuam a ser um desafio importante. A evolução de suas texturas, a nucleação e a aniquilação de defeitos topológicos são processos complexos que não são completamente descritos por métricas físicas tradicionais, como o parâmetro de ordem, de forma isolada [1–6].

Em contraste, métodos quantitativos provenientes da física estatística e da teoria da informação têm-se mostrado ferramentas para a análise de sistemas complexos. Em particular, a Entropia de Permutação (H) e a Complexidade Estatística (C), frequentemente visualizadas através do plano complexidade-entropia, oferecem uma forma de quantificar não apenas a aleatoriedade, mas também a presença de estruturas e correlações nos dados [7, 8]. Essas métricas foram aplicadas com sucesso para caracterizar uma grande variedade de sistemas, desde a detecção de anomalias em sinais biomédicos e financeiros até a identificação de transições de fase em modelos de matéria condensada, incluindo os próprios CLs. O poder desses métodos está em sua capacidade de extrair uma informação característica da dinâmica, baseando-se na ordem relativa dos valores em uma série temporal, em vez de suas magnitudes absolutas [9, 10].

Apesar de seu poder descritivo, o potencial completo dessas métricas de informação como base para modelos preditivos no contexto de CLs ainda é um campo em desenvolvimento. A maioria dos estudos se concentra na caracterização de estados de equilíbrio ou na detecção de

transições, mas a questão de saber se a trajetória dinâmica completa de um sistema, conforme capturada pela evolução temporal da C e da H , contém informação suficiente para classificar suas condições de contorno (como geometria e ancoragem) ou para prever quantitativamente suas propriedades físicas finais, permanece um problema em aberto [11–13]. Esta dissertação procura preencher essa lacuna ao integrar uma abordagem que combina simulações numéricas fundamentadas na teoria de Landau-de Gennes, análise conforme a teoria da informação e métodos de aprendizado de máquina. A hipótese central é que a série temporal das métricas de complexidade e entropia serve como um descritor de estado rico e preciso, a partir do qual é possível não apenas distinguir entre diferentes dinâmicas, mas também construir modelos preditivos.

Este trabalho está estruturado da seguinte maneira. O Capítulo 1 apresenta uma introdução conceitual aos CLs, abordando suas propriedades fundamentais e principais fases. No Capítulo 2, detalha-se o formalismo da teoria de Landau-de Gennes, que forma a base teórica para as simulações. O Capítulo 3 é dedicado aos fundamentos das ferramentas de análise, explicando os conceitos de Entropia de Permutação, Complexidade Estatística e o plano complexidade-entropia. No Capítulo 4, descreve-se a metodologia de aprendizado de máquina utilizada, incluindo as arquiteturas de redes neurais e as métricas de avaliação para as tarefas de classificação e regressão. No Capítulo 5, apresentam-se os resultados, analisando a dinâmica de relaxamento sob diferentes geometrias de confinamento, ancoragens de superfície e quiralidades. No Capítulo 6 demonstram-se e discutem-se os resultados relativos ao poder preditivo das métricas de informação, Entropia de Permutação, Complexidade Estatística, empregando diferentes abordagens de aprendizado de máquina. Por fim, na [Conclusão](#), resumimos as principais contribuições e apontamos direções para pesquisas futuras.

Fundamentos dos Cristais Líquidos

Neste capítulo, apresentamos os conceitos fundamentais necessários para a compreensão dos CLs. Inicialmente, introduz-se a definição de CLs e suas principais características ([Seção 1.1](#)). Posteriormente, discutem-se as classificações, considerando-se mecanismos de transição de fase, forma molecular e simetrias ([Seção 1.2](#)), abordando também as principais fases líquido-cristalinas, como a isotrópica, nemática e colestérica. Em seguida, analisa-se o papel da ancoragem de superfície na orientação molecular ([Seção 1.3](#)) e a influência das geometrias de confinamento no comportamento desses materiais ([Seção 1.4](#)). Por fim, apresenta-se o conceito de defeitos topológicos nos CLs ([Seção 1.6](#)).

1.1 Definição e Características dos Cristais Líquidos

Embora este trabalho se concentre na simulação de CLs e, portanto, ainda que não envolva abordagens experimentais, é importante compreender a natureza e as características desses materiais para contextualizar adequadamente os resultados obtidos. Neste sentido, a seguir é apresentada uma discussão aprofundada sobre as propriedades fundamentais dos CLs, sua classificação e a relevância dessas características para aplicações científicas e tecnológicas.

Os CLs constituem um estado intermediário da matéria, situando-se entre os sólidos cristalinos e os líquidos isotrópicos. Diferentemente dos sólidos convencionais, nos quais as moléculas ocupam posições fixas em uma estrutura altamente ordenada, e dos líquidos tradicionais, nos quais as moléculas, apesar de exibirem ordem de curto alcance, não possuem a organização de longo alcance característica dos cristais, os cristais líquidos exibem um grau significativo de organização molecular em uma ou mais direções, enquanto ainda mantêm a capacidade de fluir [1, 2, 6]. Essa diferença de organização molecular está ilustrada na Figura

1.1, a seguir.

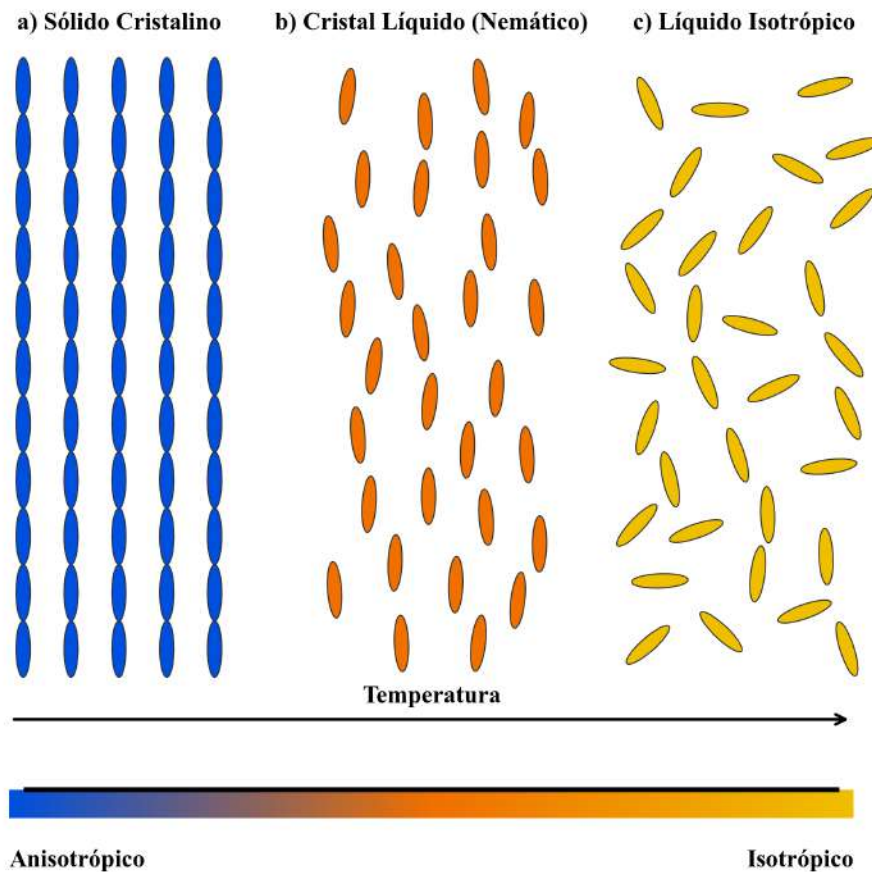


Figura 1.1: Comparação esquemática entre os estados (a) sólido cristalino, (b) CL e (c) líquido. No estado sólido, há uma organização estrutural fixa; no líquido, ausência de ordem de longo alcance; enquanto os cristais líquidos exibem ordem direcional sem uma posição fixa. Fonte: Elaborada pelo autor (2025).

Essa combinação de características confere aos CLs propriedades únicas, como a anisotropia óptica, ou seja, a capacidade de interagir com a luz de maneira dependente da orientação molecular. Esse fenômeno, amplamente explorado na fabricação de dispositivos eletro-ópticos, resulta do alinhamento preferencial das moléculas em resposta a campos elétricos ou magnéticos. Além disso, a coexistência de fluidez e ordenação molecular caracteriza o comportamento mesogênico, termo utilizado para descrever as fases intermediárias entre os estados sólido e líquido [1, 2, 6].

Os CLs podem ser classificados em diferentes categorias, dependendo da natureza da ordenação molecular e das condições ambientais que determinam sua formação. As duas principais classes são os CLs termotrópicos e os liotrópicos. Os CLs termotrópicos surgem devido a variações de temperatura e apresentam transições de fase bem definidas entre di-

ferentes estados mesofásicos. Já os CLs liotrópicos resultam da interação entre moléculas anfifílicas¹ e solventes, formando estruturas organizadas cuja estabilidade depende da concentração e da temperatura [1, 2, 6]. Este trabalho foca nos materiais termotrópicos.

A etimologia da expressão *cristal líquido* ilustra bem a dualidade inerente a esses materiais. A palavra cristal deriva do grego *krústallos*, que significa gelo transparente, remetendo à estrutura ordenada dos sólidos cristalinos. Por outro lado, o termo líquido provém do latim *liquere* ou *liquidus*, que se traduz como fluido ou capaz de fluir, evidenciando a mobilidade molecular característica desse estado intermediário [14, 15].

A descoberta dos CLs remonta ao final do século XIX, quando o químico e botânico austríaco Friedrich Reinitzer (1857-1927) investigava a síntese de esteres de colesterol para seus estudos botânicos. Em 1888, ao analisar as propriedades do benzoato de colesterila ($C_{34}H_{50}O_2$), Reinitzer observou um comportamento térmico incomum: em vez de apresentar um único ponto de fusão, como esperado para sólidos cristalinos, o composto exibia dois pontos de fusão distintos. Inicialmente, ao ser aquecido, transformava-se em um líquido turvo, para, em uma temperatura mais elevada, tornar-se completamente transparente. Adicionalmente, mesmo na fase turva, o material apresentava propriedades ópticas típicas de cristais, mas ainda assim mantinha sua fluidez [16].

Essas observações pioneiras despertaram o interesse da comunidade científica e levaram a um estudo mais aprofundado das propriedades dos CLs, culminando no desenvolvimento de modelos teóricos e experimentais para descrever suas características estruturais e dinâmicas. Desde então, esses materiais vêm sendo amplamente investigados devido ao seu potencial tecnológico, especialmente em aplicações que envolvem dispositivos de exibição, sensores e sistemas biológicos [3, 4].

A propriedade mais notável dos cristais líquidos, explorada em inúmeras aplicações tecnológicas, é a sua anisotropia óptica. Diferentemente de um líquido isotrópico, que interage com a luz da mesma forma independentemente da direção, um cristal líquido exibe um comportamento óptico que depende diretamente da orientação de suas moléculas [17]. Essa dependência se manifesta fisicamente na forma de múltiplos índices de refração. Quando a luz polarizada atravessa o material, ela experimenta um índice de refração diferente dependendo de sua orientação em relação ao eixo óptico do cristal líquido (geralmente alinhado com o diretor nemático, $\mathbf{n}$). Especificamente, distinguimos dois índices principais: o índice de refração ordinário (n_o), experimentado pela luz polarizada em uma direção perpendicular ao eixo óptico, e o índice de refração extraordinário (n_e), experimentado pela luz polarizada paralelamente ao eixo óptico. A diferença entre esses dois índices é a medida quantitativa da anisotropia óptica, conhecida como birrefringência (Δn), ilustrada na Figura 1.2, e é expressa pela Equação .

¹Moléculas que possuem uma parte hidrofóbica e uma parte hidrofílica, o que as torna capazes de interagir tanto com substâncias lipofílicas quanto com substâncias hidrofílicas.

$$\Delta n = n_e - n_o \quad (1.1)$$

Um valor de Δn diferente de zero é a assinatura fundamental de um meio opticamente anisotrópico. É essa propriedade que permite aos cristais líquidos manipular a polarização da luz, um fenômeno essencial para a operação de dispositivos como as telas de cristal líquido (LCDs).

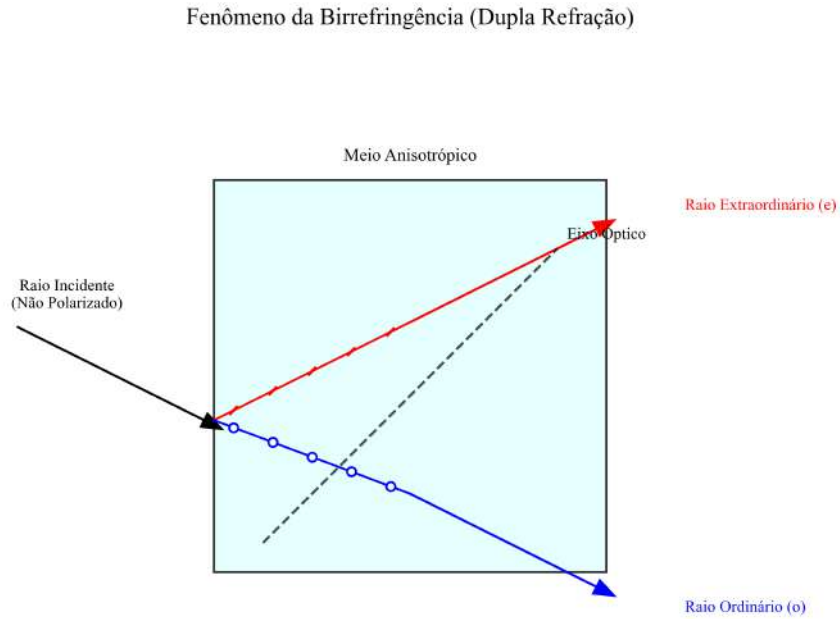


Figura 1.2: Representação esquemática da birrefringência em um meio opticamente anisotrópico. A luz incidente se divide em dois raios polarizados ortogonalmente: o raio ordinário, cujo campo elétrico oscila perpendicularmente ao eixo óptico e experimenta o índice de refração n_o , e o raio extraordinário, que oscila paralelamente e experimenta o índice n_e . Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

1.2 Classificação dos Cristais Líquidos

A classificação dos CLs envolve a consideração de diversas características estruturais. Nesse caso, os materiais líquido-cristalinos podem ser compostos por moléculas que apresentem diferentes formatos. Alguns desses materiais são em forma de disco, sendo denominados discóticos, enquanto outros possuem a forma de banana, ou *banana-shaped* em inglês, porque o núcleo da molécula é curvado. Há também os materiais com moléculas em formato semelhante ao de tigela, conhecidos como *bowlics*, e aqueles compostos por moléculas em forma de bastões, rotuladas como calamíticas. Cada uma dessas formas influencia as propriedades

anisotrópicas dos CLs, contribuindo para os diferentes comportamentos e características observados nesses materiais [1, 2, 18]. Este trabalho foca nos materiais calamíticos, de longe os mais estudados e utilizados em aplicações tecnológicas. Existem diferentes mesofases que esses materiais podem adotar, levando em consideração os distintos graus de ordem molecular que caracterizam cada uma delas. Dentre as várias fases, destacam-se as descritas a seguir.

1.2.1 Fase Isotrópica

A fase isotrópica ocorre em temperaturas elevadas e corresponde a um verdadeiro estado líquido. Nessa fase, embora as moléculas não apresentem ordem posicional ou orientacional de longo alcance, elas não se encontram em um estado de desordem completa. Pelo contrário, o líquido isotrópico é caracterizado pela presença de uma ordem de curto alcance, onde as correlações na posição e orientação entre moléculas vizinhas decaem exponencialmente com a distância. Isso significa que, em escalas locais, ainda existe uma organização preferencial, embora esta se perca rapidamente em distâncias maiores. Essa ausência de estruturação faz com que as propriedades ópticas, mecânicas, elétricas e magnéticas do material sejam isotrópicas, ou seja, independentes da direção considerada, assim como ocorre nos líquidos convencionais [1]. Do ponto de vista termodinâmico, a fase isotrópica é caracterizada por uma elevada entropia, refletindo o alto grau de desordem molecular. No entanto, à medida que a temperatura do sistema diminui, surgem flutuações locais de ordem, especialmente em regiões próximas a superfícies que favorecem o alinhamento molecular. Essas flutuações atuam como precursores da transição para fases mais organizadas, influenciando a estabilidade e a dinâmica do sistema [19]. A transição da fase isotrópica para a fase mesomórfica pode acontecer de forma contínua ou abrupta, dependendo do tipo de líquido cristalino (CL) e das condições experimentais. Esse tema ainda é objeto de estudo, pois compreender os mecanismos e os fatores que afetam esse processo é importante para várias aplicações dos CLs [19].

1.2.2 Fase Nemática

Abaixo da temperatura de transição isotrópica-nemática (T_{NI}), as moléculas dos CLs nemáticos passam a exibir um alinhamento orientacional de longo alcance. Seus eixos preferencialmente se orientam em uma direção comum, denominada diretor nemático ($\mathbf{n}$), conferindo ao sistema propriedades anisotrópicas. Essa anisotropia afeta diretamente as características ópticas, mecânicas, elétricas e magnéticas do material, conforme discutido no início deste capítulo [20].

Apesar do alinhamento orientacional, os centros de massa das moléculas continuam desordenados, mantendo um comportamento semelhante ao de líquidos convencionais. A direção do diretor nemático é arbitrária e geralmente influenciada pelas condições de contorno da

amostra. Além disso, como os estados $\mathbf{n}$ e $-\mathbf{n}$ são indistinguíveis, a fase nemática não é ferroelétrica. Ela também não exibe lateralidade, ou seja, quiralidade, o que significa que as moléculas devem ser simétricas ou formar uma mistura racêmica no caso de compostos quirais² [21].

Entretanto, estudos recentes identificaram exceções a esse comportamento geral. Especificamente, certas fases nemáticas ferroelétricas foram descobertas, caracterizadas por polarização elétrica espontânea acoplada a uma ordem orientacional de longo alcance. Essas descobertas sugerem que, sob condições específicas, as fases nemáticas podem exibir propriedades ferroelétricas [22].

Além disso, a confirmação da presença de fases nemáticas biaxiais em CLs termotrópicos, como os mesogênicos de núcleo curvo³, tem sido um avanço importante. Tais fases apresentam comportamentos de alinhamento e simetrias que oferecem propriedades ópticas únicas, de grande relevância para aplicações tecnológicas [23, 24].

1.2.3 Fase Colestérica

A fase colestérica, também conhecida como nemática quiral (N^*), compartilha diversas características com a fase nemática, sendo a principal distinção a presença de moléculas quirais no sistema. Assim como na fase nemática, as moléculas colestéricas possuem liberdade de deslocamento relativo, ou seja, podem deslizar umas sobre as outras, não apresentam ordem posicional nos centros de massa e tendem a se alinhar preferencialmente ao longo de um eixo descrito pelo diretor nemático $\mathbf{n}$. Entretanto, devido à quiralidade das moléculas constituintes - característica que define essa mesofase - o plano de simetria especular é quebrado e a organização espacial do sistema é alterada [25].

Diferentemente da fase nemática, em que $\mathbf{n}$ é aproximadamente constante no espaço, nesta fase, o diretor nemático, que descreve a orientação molecular preferida, não é mais espacialmente uniforme. Em vez disso, devido a interações quirais, ele sofre uma rotação contínua ao longo de um eixo específico — por convenção, o eixo $\mathbf{z}$ — formando tipicamente uma estrutura helicoidal perpendicular à orientação molecular local. Matematicamente, essa dependência espacial do diretor pode ser descrita como:

$$\mathbf{n}(z) = (\cos(q_0 z + \phi), \sin(q_0 z + \phi), 0), \quad (1.2)$$

em que q_0 representa o vetor de onda associado à estrutura helicoidal e ϕ é um fator de fase

²Uma mistura racêmica é uma mistura equimolar de dois enantiômeros, os quais são formas de imagem espelhada não sobreponíveis de uma molécula quiral. Em tais misturas, as atividades ópticas dos enantiômeros se cancelam, resultando em nenhuma rotação óptica líquida.

³Mesogênicos de núcleo curvo são moléculas de CL com uma estrutura em forma de "V" ou semelhante a uma banana, o que pode induzir biaxialidade e levar à formação de fases nemáticas e esmétricas não convencionais.

inicial que determina a orientação do diretor em $z = 0$. A estrutura helicoidal repete-se, ou seja, o diretor completa uma rotação de 360° , após uma distância P , conhecida como passo helicoidal ou *pitch*, que se relaciona com o vetor de onda por $P = 2\pi/q_0$.

A Figura 1.3 ilustra o arranjo molecular característico da fase colestérica, na qual a orientação das moléculas sofre uma rotação contínua, formando uma estrutura helicoidal.

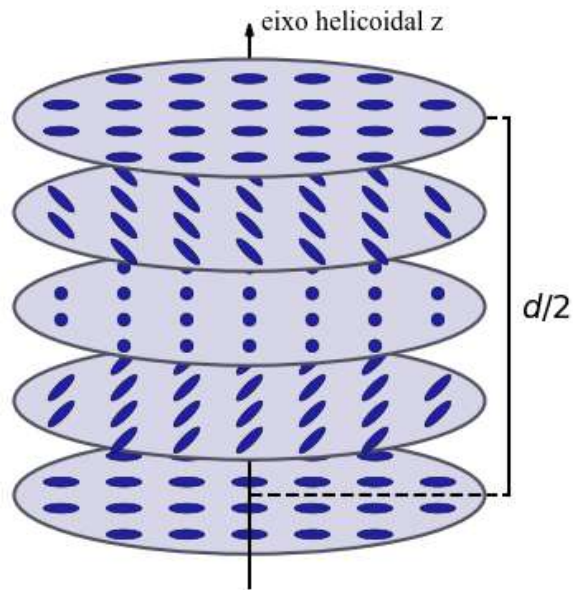


Figura 1.3: Representação esquemática da fase colestérica (N^*). A orientação das moléculas gira continuamente ao longo do eixo z , formando uma estrutura helicoidal com passo d . Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Em geral, o passo helicoidal na fase colestérica é significativamente maior do que a escala molecular, sendo frequentemente na ordem de centenas de nanômetros, ou seja, $q_0 a \approx 10^{-2}$, em que a é a dimensão molecular, tipicamente cerca de $20 \text{ \AA}$. O sentido da hélice é definido pelo sinal de q_0 : $q_0 > 0$ representa hélices dextrogiros, enquanto $q_0 < 0$ representa hélices levógiros. Além disso, esse passo é altamente dependente da temperatura e da composição química das moléculas, o que pode levar a transições de fase ou variações significativas nas propriedades do material.

Uma propriedade notável da fase colestérica é sua reflexão seletiva da luz, conhecida como reflexão de Bragg. Quando o passo helicoidal d é comparável ao comprimento de onda da luz visível, o material reflete comprimentos de onda específicos, resultando em cores vívidas. Essa reflexão seletiva é devida à modulação periódica do índice de refração na estrutura helicoidal, que causa interferência construtiva para certos comprimentos de onda, conforme a equação de Bragg:

$$\lambda = \langle n \rangle d \quad (1.3)$$

em que λ é o comprimento de onda central refletido e $\langle n \rangle$ é o índice de refração médio do meio [26–28]. Essas características ópticas tornam os CLs colestéricos valiosos em várias aplicações, incluindo filtros ópticos ajustáveis, *displays* reflexivos e sensores de polarização. Sua capacidade de refletir seletivamente comprimentos de onda e polarizações de luz específicos permite desenvolver dispositivos com propriedades ópticas personalizadas [29].

1.2.4 Fases Esméticas

À medida que a temperatura de um CL nemático é reduzida ainda mais, o sistema pode sofrer uma transição para um estado de maior organização estrutural, resultando em um dos diversos estados conhecidos como fases esméticas. As fases mais comuns desse grupo são a esmética A (*SmA*) e a esmética C (*SmC*). A principal característica dessas fases é a disposição das moléculas em camadas distintas, um aumento notável na ordem em comparação com a fase nemática, que exibe apenas ordem orientacional. Esta organização em camadas surge em temperaturas mais baixas do que aquelas típicas da fase nemática, indicando uma progressão em direção a uma maior ordem estrutural no sistema. A fase esmética não será estudada neste trabalho, porém o leitor pode encontrar mais informações nas referências [1, 2].

1.3 Ancoragem de Superfície

A orientação molecular em um CL não depende só das interações entre as moléculas, mas também das condições de contato com as superfícies com as quais estão em contato. Esse efeito, conhecido como ancoragem de superfície, é importante para entender como as moléculas se organizam próximo às interfaces. Ou seja, no contexto dos CLs, a ancoragem se refere à forma como as moléculas do material interagem com as superfícies ao seu redor. Existem dois tipos principais de ancoragem: planar, quando as moléculas se alinham paralelamente à superfície, e homeotrópica, quando se orientam perpendicularmente a ela [30].

Além dessas configurações básicas, é possível estabelecer condições em que diferentes tipos de ancoragem coexistem na mesma amostra. Um exemplo notável é a ancoragem híbrida, na qual uma extremidade da amostra apresenta alinhamento homeotrópico, enquanto a outra exibe alinhamento planar. Esse tipo de configuração pode influenciar significativamente as propriedades ópticas e dinâmicas do material [31]. As três configurações de ancoragem — planar, homeotrópica e híbrida — são ilustradas na Figura 1.4.

A orientação das moléculas de CL na superfície é frequentemente induzida por tratamentos específicos no substrato. Métodos como fricção unidirecional ou fotoalinhamento são amplamente utilizados para criar padrões que direcionam o alinhamento molecular. A

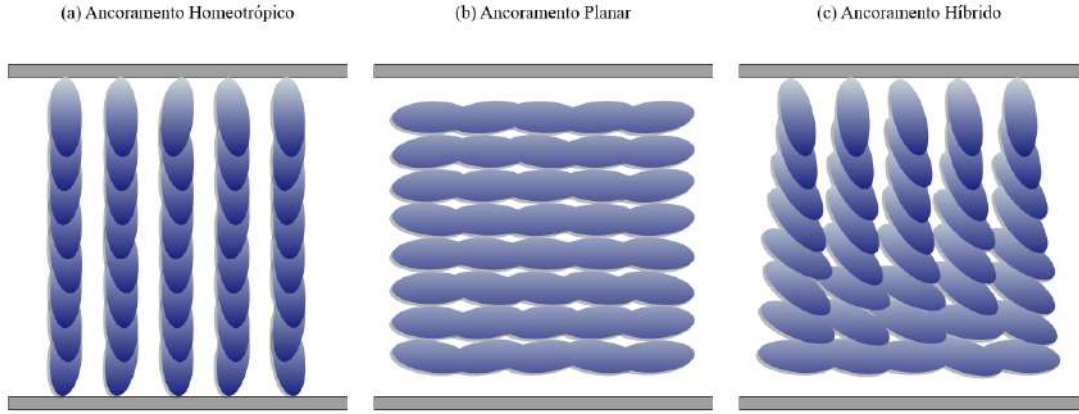


Figura 1.4: Ilustração dos três principais tipos de ancoramento de superfície em CLs: (a) Homeotrópico, (b) Planar e (c) Híbrido. Fonte: Elaborado pelo autor (2025)

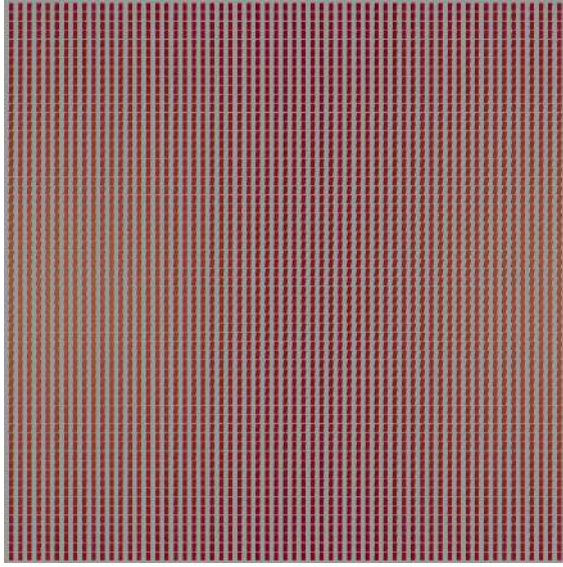
intensidade com que as moléculas permanecem fixadas a uma determinada orientação é quantificada pela energia de ancoragem, discutida na Seção 2.1. Quanto maior essa energia, mais forte é a preferência do sistema por um alinhamento específico. A consideração da ancoragem influencia diretamente o comportamento molecular sob diferentes condições experimentais. As simulações buscam replicar efeitos reais, como tempos de resposta e variações nas propriedades ópticas, variando as condições de ancoragem nos limites da amostra.

1.4 Geometrias de Confinamento

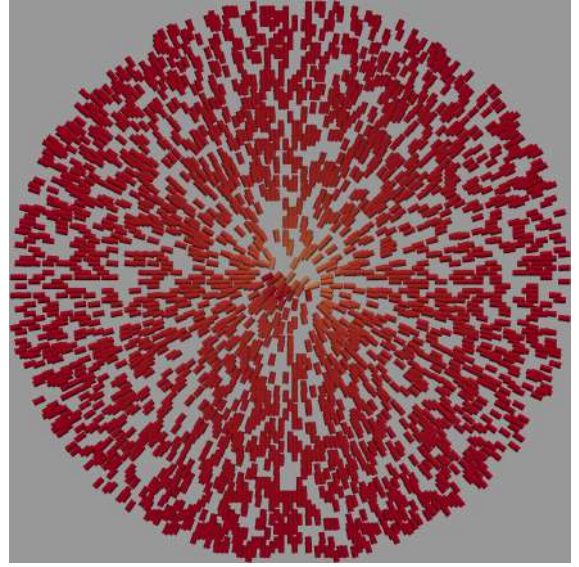
Para prosseguir com o estudo dos fundamentos de CLs, é essencial entender como a geometria de confinamento afeta a organização molecular, a estabilidade de fases e as transições entre diferentes estados. As propriedades ópticas e mecânicas dos CLs são afetadas diretamente por suas configurações geométricas, que são importantes tanto para a pesquisa quanto para as aplicações tecnológicas [32].

Neste trabalho, exploraram-se duas geometrias principais: a geometria plana, conhecida como *slab*, e a geometria esférica. Cada uma delas apresenta características distintas que afetam a organização molecular e o comportamento dos CLs sob diferentes condições experimentais. A Figura 1.5 ilustra essas geometrias e suas características principais.

A geometria de confinamento chamada *slab* diz respeito a uma disposição de CLs confinados entre duas superfícies paralelas, normalmente placas de vidro. Esse arranjo cria uma estrutura plana, na qual a espessura desempenha um papel importante na orientação molecular e nas características ópticas do sistema. As condições de ancoragem das superfícies confinantes podem influenciar a orientação do diretor, como discutido anteriormente, na Seção 1.3 [33].



(a) Geometria *slab* (placa plana).



(b) Geometria *sphere* (esfera).

Figura 1.5: Diferentes geometrias de confinamento com ancoramento homeotrópico e quiralidade $N_0 = 0$, utilizadas em simulações de CLs. Em (a), a geometria *slab* e, em (b), a geometria *sphere*. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A geometria de confinamento esférica apresenta desafios adicionais devido à curvatura da superfície confinante. Nesse tipo de configuração, o alinhamento das moléculas do CL é afetado pela necessidade de acomodar o campo diretor à curvatura esférica, resultando na formação de defeitos topológicos. Essa impossibilidade de um alinhamento uniforme em superfícies esféricas leva ao surgimento desses defeitos, cuja distribuição e tipo variam conforme as condições de contorno e o tipo de CL empregado. As interações entre esses defeitos podem influenciar diretamente a organização molecular e as propriedades de fase do sistema [34].

Além das geometrias *slab* e esférica, existem outras configurações geométricas, comumente empregadas em simulações de CLs. A geometria hemisférica, por exemplo, é semelhante à esférica, mas limitada a um hemisfério, permitindo o estudo de defeitos topológicos em sistemas parcialmente confinados. Já a geometria cilíndrica é utilizada para investigar o comportamento dos CLs sob confinamento linear, sendo particularmente relevante para aplicações em fibras ópticas e sistemas microfluídicos. A geometria de tectoides envolve pequenas gotas de CLs, nas quais a forma e o tamanho das gotas têm um impacto significativo nas transições de fase e na organização molecular do material. Além disso, estudos recentes têm se aprofundado em geometrias mais complexas, como toróides e estruturas biomiméticas, que podem exibir dinâmicas de defeitos e transições de fase únicas [35].

A escolha da geometria de confinamento exerce uma influência significativa sobre diversas propriedades dos CLs. O alinhamento molecular, por exemplo, é diretamente determinado pela forma do confinamento, afetando a orientação das moléculas e, consequentemente, as

propriedades ópticas do material, além de sua resposta a estímulos externos. A estabilidade de fase também é impactada pela geometria, já que diferentes formas podem favorecer ou inibir a estabilidade de certas fases. Um exemplo disso é a curvatura esférica, que pode estabilizar configurações de defeitos que não surgiriam em confinamentos planos. Além disso, as transições de fase, que envolvem mudanças no estado das moléculas, dependem fortemente da geometria.

1.5 Parâmetro de Ordem Escalar e Tensorial

O parâmetro de ordem desempenha um papel essencial na descrição da ordem líquido-cristalina. Para quantificar o grau de alinhamento molecular e caracterizar a ordem orientacional das moléculas, utiliza-se o parâmetro de ordem escalar nemático S . Em um CL, as moléculas tendem a se alinhar ao longo de uma direção preferencial, descrita pelo diretor nemático $\mathbf{n}$, conforme discutido anteriormente. No entanto, devido à agitação térmica, as moléculas individuais podem apresentar desvios em relação a essa orientação média. Sendo assim, para quantificar esse desvio da orientação média, define-se o parâmetro de ordem escalar S . Seja $\theta(\mathbf{r})$ o ângulo entre o eixo longo de uma molécula individual, representado pelo vetor de orientação $\mathbf{m}(\mathbf{r})$, e o diretor nemático $\mathbf{n}$. Esse ângulo varia de molécula para molécula e depende da posição $\mathbf{r}$ no material. Para quantificar o alinhamento médio das moléculas, calcula-se o valor esperado do cosseno ao quadrado do ângulo θ . A média orientacional é dada por:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \cos^2 \theta_i. \quad (1.4)$$

Em que N é o número total de moléculas no sistema. Essa média reflete o grau de alinhamento das moléculas em relação ao diretor nemático. Desta maneira, o parâmetro de ordem escalar S é definido a partir da média orientacional $\langle \cos^2 \theta \rangle$. Logo, a expressão matemática para S é:

$$S = \left\langle \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right\rangle \quad (1.5)$$

em que $\langle \cdot \rangle$ representa a média sobre todas as moléculas da amostra. O valor de S reflete o grau de ordem orientacional do sistema e varia de $-\frac{1}{2}$ a 1 [2]. Quando $S = 1$, o sistema apresenta uma ordem máxima, como em um sólido cristalino ideal, representando um alinhamento totalmente ordenado. Valores de S entre 0 e 1 indicam um alinhamento parcial, que é típico da fase nemática. A ausência de ordem orientacional, como em um líquido isotrópico, é representada por $S = 0$. Em um caso extremo, $S = -1/2$ descreve uma situação onde as moléculas se alinham no plano perpendicular ao diretor médio. Valores negativos de S

sugerem um anti-alinhamento, observável em certos elastômeros de CL⁴[2].

Contudo, embora o parâmetro de ordem escalar S seja adequado para descrever CLs do ponto de vista microscópico, um parâmetro de ordem que descreva as simetrias básicas, ou seja, um parâmetro de ordem macroscópico, faz-se necessário. Para uma descrição mais abrangente da ordem do sistema, é introduzido o parâmetro de ordem tensorial $\mathbf{Q}$ [36]. Este tensor captura variações locais na orientação molecular e fornece uma visão mais detalhada da estrutura do CL, incorporando não apenas o grau de alinhamento, mas também informações sobre a anisotropia da distribuição molecular. No caso de sistemas uniaxiais, esse tensor assume uma forma específica que reflete a simetria característica da fase [36].

O parâmetro de ordem tensorial $\mathbf{Q}$ é definido de forma que capture a simetria das orientações moleculares em relação aos eixos coordenados. Para isso, a princípio, considera-se o produto escalar entre as orientações das moléculas. Nesse sentido, seja $\mathbf{m}_i(\mathbf{r})$ um vetor unitário que descreve a orientação de uma molécula i na posição $\mathbf{r}$. Ao tomarmos dois desses vetores de orientação $\mathbf{m}_i$ e $\mathbf{m}_j$ de duas moléculas i e j , respectivamente, podemos calcular o produto escalar entre eles, isto é:

$$\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j = m_i m_j \cos(\theta_{ij}), \quad (1.6)$$

em que θ_{ij} é o ângulo entre as moléculas i e j . No entanto, é necessário introduzir uma forma que capture a simetria das fases e possa ser utilizada para a descrição de transições de fase. Sendo assim, o tensor Q_{ij} é definido como uma média estatística da orientação molecular local, expresso por:

$$Q_{ij} = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{3}{2} m_i m_j - \frac{\delta_{ij}}{2} \right). \quad (1.7)$$

Portanto, a partir da definição anterior, ao simplificar a notação, o tensor Q_{ij} passa a ser expresso de forma mais compacta como:

$$Q_{ij} = \left\langle \frac{3}{2} m_i m_j - \frac{\delta_{ij}}{2} \right\rangle. \quad (1.8)$$

Aqui, a expressão $\frac{3}{2} m_i m_j$ representa o produto escalar entre os vetores de orientação das moléculas i e j considerando a contribuição das orientações moleculares. Esse termo pode ser visto como uma medida da interação entre essas partículas ao longo de uma direção específica. O termo (δ_{ij}) é o delta de Kronecker. A subtração de $\frac{\delta_{ij}}{2}$ garante que a média das orientações de partículas seja zero em um sistema isotrópico. Esse termo assegura que a definição de Q_{ij} seja bem comportada e considere a simetria isotrópica e a anisotropia do sistema. A notação $\langle \dots \rangle$ indica que a média é feita sobre todas as moléculas do volume de

⁴Elastômeros de CL são polímeros com propriedades elásticas que combinam características de CLs com a flexibilidade de elastômeros convencionais, que por sua vez são polímeros capazes de suportar grandes deformações elásticas e retornar à sua forma original quando a tensão é removida.

interesse, ponderada conforme a distribuição das orientações das moléculas [5].

Em sistemas uniaxiais, nos quais a simetria é dominada pelo diretor $\mathbf{n}$, a orientação molecular média pode ser simplificada. Assume-se que $\langle m_i m_j \rangle$ depende apenas de $n_i n_j$. Assim, para sistemas uniaxiais, o tensor Q_{ij} assume a forma compacta:

$$Q_{ij} = \frac{3}{2}S \left(n_i n_j - \frac{\delta_{ij}}{3} \right). \quad (1.9)$$

Por construção, o tensor Q_{ij} possui duas propriedades: Q_{ij} é simétrico de segunda ordem, o que significa que ($Q_{ij} = Q_{ji}$). Além disso, Q_{ij} não possui traço, ou seja, a soma dos elementos diagonais de Q_{ij} é nula:

$$\text{Tr}(Q_{ij}) = Q_{11} + Q_{22} + Q_{33} = 3/2S (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 - 1) = 0, \quad (1.10)$$

pois $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$. Essas propriedades refletem a natureza orientacional média e a ausência de direção privilegiada no espaço. A simetria de Q_{ij} implica que ele pode ser diagonalizado, dessa forma, levando a três autovalores. Para sistemas uniaxiais, os autovalores de Q_{ij} são $S, -\frac{S}{2}, -\frac{S}{2}$. Isso reflete a simetria axial: dois autovalores são iguais e negativos e correspondem a direções transversais ao diretor $\mathbf{n}$, enquanto o terceiro é positivo e está associado à direção de alinhamento preferencial [5,37].

A magnitude dos autovalores positivos corresponde ao grau de ordem do sistema em questão, de maneira que valores maiores indicam maior alinhamento molecular. O comportamento anisotrópico dos CLs está profundamente ligado às propriedades do tensor Q_{ij} . Como mencionado anteriormente, Q_{ij} é um tensor simétrico de traço nulo, o que significa que ele tem cinco componentes independentes, com significados físicos e propriedades específicas. Como veremos adiante (Seção 2.1), a energia associada a um sistema líquido-cristalino pode ser expressa como uma função de Q_{ij} permitindo previsões sobre transições de fase e estabilidade sob várias condições. Ademais, o comportamento de Q_{ij} está associado às constantes elásticas, as quais descrevem como o CL responde à deformação, como veremos adiante.

As simetrias de diferentes fases de CL influenciam significativamente a forma do tensor de ordem Q_{ij} . A estrutura do tensor reflete os arranjos moleculares subjacentes e suas interações, que variam entre diferentes fases. Em sistemas biaxiais, por exemplo, define-se um vetor auxiliar $\mathbf{m}(z)$, perpendicular a $\mathbf{n}(z)$, que descreve o segundo eixo óptico. $\mathbf{m}(z)$, chamado de codiretor, pode ser expresso de maneira análoga a $\mathbf{n}(z)$. Nesse sentido, a expressão completa para Q_{ij} , representando diferentes estruturas, pode ser escrita como:

$$Q_{ij} = \frac{3}{2}S \left(n_i n_j - \frac{1}{3}\delta_{ij} \right) + \frac{1}{2}P (m_i m_j - l_i l_j), \quad (1.11)$$

em que S é o parâmetro de ordem uniaxial, que mede o grau de alinhamento molecular local, discutido anteriormente. P é o parâmetro de ordem biaxial, e $l = n \times m$ [38–40].

1.6 Defeitos Topológicos em CLs

Os defeitos topológicos são regiões localizadas em que a ordem orientacional é reduzida ou perdida, ou seja, regiões nas quais a simetria do sistema não é satisfeita, tornando o campo diretor indefinido ou abruptamente alterado. Estas singularidades surgem frequentemente de restrições ao sistema líquido cristalino, como condições de contorno específicas ou impurezas, impedindo um estado orientacional uniforme global. Uma propriedade central dos defeitos topológicos é sua estabilidade intrínseca. Essa estabilidade decorre da topologia do espaço e da distribuição espacial do parâmetro de ordem, que determina que esses defeitos não podem ser eliminados ou transformados em um estado uniforme por meio de deformações contínuas do campo do diretor. Isso implica que defeitos topológicos frequentemente representam mínimos locais de energia ou configurações metastáveis no sistema de CL [41–44].

Matematicamente, defeitos topológicos podem ser entendidos como singularidades dentro do campo diretor contínuo. A ocorrência generalizada de defeitos topológicos em diversas disciplinas científicas, estendendo-se da física da matéria condensada à vastidão da cosmologia, destaca sua natureza como uma manifestação de mecanismos universais de quebra de simetria [41–44]. Paralelamente às investigações experimentais, simulações computacionais tornaram-se uma ferramenta indispensável para o estudo de defeitos topológicos em CLs. A modelagem numérica, empregando particularmente a teoria tensorial de Landau-de Gennes, fornece uma compreensão detalhada sobre as intrincadas estruturas e energéticas associadas a uma vasta gama de possíveis configurações de defeitos [41–44].

Defeitos topológicos em CLs nemáticos podem ser classificados com base em sua dimensionalidade no espaço tridimensional que ocupam e com base em sua carga topológica associada. Considerando sua extensão espacial, os defeitos podem ser categorizados como defeitos pontuais (zero-dimensionais), defeitos de linha ou disclinações (unidimensionais) e defeitos de superfície ou paredes (bidimensionais).

A carga topológica s fornece uma classificação mais sutil, quantificando o número de vezes que o campo diretor rotaciona por 2π ao redor do núcleo do defeito. Em nemáticos bidimensionais, a carga topológica é frequentemente um semi-inteiro ($s = \pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2, \dots$) devido à simetria $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$, enquanto defeitos pontuais em três dimensões podem possuir cargas topológicas inteiras [45–47]. A carga topológica é uma quantidade conservada em um sistema de CL. Esta lei de conservação determina como os defeitos interagem entre si. Em geral, defeitos com cargas topológicas opostas podem se aniquilar quando se encontram, restaurando efetivamente uma ordem mais uniforme. Por outro lado, defeitos com a mesma carga topológica, tipicamente exibem interações repulsivas, tendendo a se afastar para mi-

nimizar a energia livre total do sistema. No entanto, é importante notar que a natureza precisa dessas interações pode ser mais complexa e depende dos tipos específicos de defeitos envolvidos e das propriedades do meio líquido cristalino [48].

A carga topológica s de um defeito relaciona-se ao comportamento angular ao longo de um caminho fechado ao redor do núcleo. Para defeitos lineares, como disclinações, a carga topológica está intimamente relacionada ao número de enrolamento. Em muitos contextos, o próprio número de enrolamento é considerado a força ou carga topológica da disclinação [49–51].

Considere um pequeno caminho fechado C que envolve um único defeito topológico. Conforme se move ao longo desse caminho, o ângulo $\theta(\mathbf{r})$ do campo diretor geralmente mudará. A mudança total nesse ângulo, $\Delta\theta$, ao longo de um percurso completo do laço é quantizada e diretamente relacionada à carga topológica do defeito envolvido. A carga topológica s para defeitos de linha (ou disclinações) pode ser matematicamente expressa como a integral de linha do gradiente do ângulo θ ao redor do laço fechado C :

$$s = \frac{1}{2\pi} \oint_C \nabla\theta \cdot d\mathbf{l} = \frac{1}{2\pi} \oint_C d\theta. \quad (1.12)$$

Esta integral mede essencialmente o enrolamento total do campo diretor ao redor do núcleo do defeito. O resultado s representa o número de enrolamento, que é o número de rotações completas de 2π que o diretor completa conforme o laço C é atravessado. Para um defeito com uma carga topológica s , o ângulo θ a uma distância r do núcleo, como uma função do ângulo azimutal ϕ , pode frequentemente ser expresso na forma $\theta(\phi) = s\phi + \theta_0$, em que θ_0 é um fator de fase constante. Esta formulação da carga topológica fornece uma maneira precisa de quantificar a natureza dos defeitos e entender suas propriedades topológicas, que permanecem invariantes sob deformações contínuas do campo diretor. [52].

Defeitos com uma carga topológica de $+1$ (ou -1) são disclinações inteiras, às vezes referidas como disclinações de cunha. Em duas dimensões, um defeito $+1$ pode se manifestar como uma configuração radial (*aster*) na qual o campo diretor irradia para fora do núcleo (Figura 1.6b), ou como uma configuração tangencial (*vórtice*) na qual o campo diretor circula ao redor do núcleo (Figura 1.6c). Inversamente, um defeito -1 em 2D tipicamente exibe uma configuração antirradial (*antiaster*) (Figura 1.6f). Estendendo-se para três dimensões, defeitos pontuais com cargas inteiras existem, como os defeitos ouriço (*hedgehog*). Um ouriço $+1$ apresenta um campo diretor que irradia radialmente para fora de um ponto central, enquanto um ouriço -1 , também conhecido como ouriço hiperbólico, possui uma configuração mais complexa do campo diretor [47, 50, 51, 53].

Defeitos com cargas topológicas de $+1/2$ e $-1/2$ são disclinações de semi-inteiro, frequentemente referidas como disclinações de Möbius. Em duas dimensões, um defeito $+1/2$ tipicamente exibe uma configuração de *cometa* (Figura 1.6d), caracterizada por uma simetria

de dois eixos no campo diretor, enquanto um defeito $-1/2$ frequentemente apresenta uma configuração de *trevo* (Figura 1.6e) com uma simetria de três eixos. Essas disclinações de semi-inteiro são topologicamente estáveis em duas dimensões, o que significa que não podem ser removidas por deformações contínuas do campo diretor [48–50, 54].

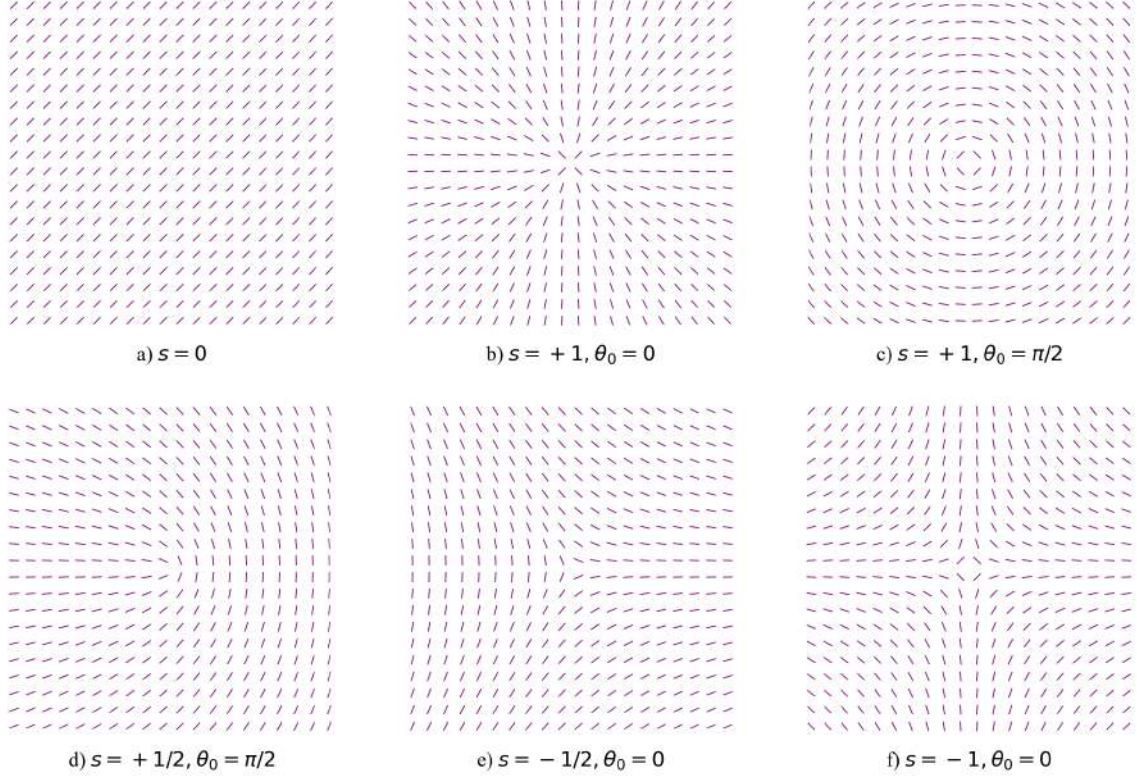


Figura 1.6: Exemplos de configurações do campo diretor em duas dimensões associadas a disclinações com diferentes cargas topológicas (s). A orientação de cada padrão é definida por um fator de fase θ_0 . As configurações mostradas são: (a) Campo uniforme sem defeitos ($s = 0$). (b) Disclinação radial ($s = +1$, $\theta_0 = 0$). (c) Disclinação tangencial ($s = +1$, $\theta_0 = \pi/2$). (d) Defeito *cometa* ($s = +1/2$, $\theta_0 = 0$). (e) Defeito *trevo* ($s = -1/2$, $\theta_0 = \pi/2$). (f) Disclinação hiperbólica ($s = -1$, $\theta_0 = 0$). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Para quantificar a evolução das estruturas topológicas e o processo de relaxamento do sistema, duas métricas principais foram extraídas dos dados de simulação: a Densidade de Linhas de Defeito e a Taxa de Decaimento de Defeitos. A metodologia para obtenção de cada uma é detalhada a seguir.

A Densidade de Linhas de Defeito (DDL) foi calculada numericamente a partir dos dados do campo do tensor de ordem Q_{ij} para cada instante de tempo registrado na simulação. Como os defeitos topológicos são regiões onde a ordem nemática é localmente suprimida, adota-se um critério numérico baseado no parâmetro de ordem escalar local, S . Para um dado instante de tempo t , o procedimento foi o seguinte. Primeiramente, determina-se o

valor máximo do parâmetro de ordem escalar, $S_{max}(t)$, em todo o volume de simulação. Este valor de referência representa o grau de ordenamento nas regiões mais organizadas do sistema naquele momento. Em seguida, define-se um limiar de defeito, $S_{defeito}(t)$, como uma fração do valor máximo, conforme a equação:

$$S_{defeito}(t) = 0,9 \cdot S_{max}(t) \quad (1.13)$$

Cada ponto (nó da malha de simulação) cujo parâmetro de ordem local S for menor ou igual a este limiar ($S \leq S_{defeito}(t)$) é classificado como parte de uma região de defeito. A Densidade de Linhas de Defeito para o instante t é, então, calculada como a razão entre o número total de pontos classificados como defeituosos, $N_{defeitos}(t)$, e o número total de pontos no volume de simulação, N_{total} :

$$DDL(t) = \frac{N_{defeitos}(t)}{N_{total}} \quad (1.14)$$

Este processo, executado para cada arquivo de dados sequencial, gera a série temporal da Densidade de Linhas de Defeito, que descreve a aniquilação dessas estruturas ao longo do tempo. Para quantificar a velocidade com que os defeitos são aniquilados, especialmente na fase inicial e mais intensa do relaxamento, calculou-se a Taxa de Decaimento. Esta taxa foi obtida por meio de um ajuste linear aplicado aos pontos iniciais da curva da DDL média (calculada a partir de todas as *seeds* de uma mesma configuração). O modelo linear utilizado foi o descrito pela Equação 1.15.

$$DDL(t) \approx at + b \quad (1.15)$$

Neste ajuste, o coeficiente angular a representa a Taxa de Decaimento de Defeitos. Um valor de a mais negativo indica um processo de aniquilação mais rápido. O coeficiente linear b fornece uma estimativa da Densidade Inicial de Defeitos no início do processo de relaxamento. Este ajuste foi realizado nos primeiros 7 pontos da curva de DDL média, para capturar a dinâmica predominante do início da simulação.

Teoria de Landau-de Gennes

Neste capítulo, apresenta-se a formulação teórica de Landau-de Gennes para descrever CLs, a qual serve de base para as simulações computacionais que geram os dados analisados nesse trabalho. Primeiramente, baseado nos conceitos do parâmetro de ordem escalar (S) e tensorial ($\mathbf{Q}$) introduzidos no Capítulo 1, responsáveis por quantificar o grau e a orientação do ordenamento molecular, detalha-se a expansão da energia livre em termos desse parâmetro, detalhando as contribuições de volume ou termodinâmicas e de superfície (Seção 2.1).

Nesse contexto, a teoria de Landau-de Gennes é um modelo teórico usado para descrever as propriedades termodinâmicas e transições de fase de CLs. Ela se baseia nos princípios da teoria de transições de fase de Landau, estendendo-os para explicar as características únicas de materiais líquido-cristalinos. No cerne desta teoria está o tensor de ordem $\mathbf{Q}$, o qual serve como parâmetro para quantificar o grau e a orientação do alinhamento molecular [5].

2.1 Energia Livre de Landau-de Gennes

A teoria de Landau-de Gennes desempenha um papel fundamental para entender as propriedades termodinâmicas dos CLs, por oferecer uma estrutura para descrever sua energia livre em função do parâmetro de ordem. Nesta teoria, a densidade de energia livre é uma quantidade que descreve o estado termodinâmico do CL. [55, 56]. Desta forma, a densidade de energia livre f de um CL pode ser expressa como a soma de três contribuições principais: a energia livre termodinâmica $f_{\text{termodinâmica}}$, a energia livre elástica ou de distorção $f_{\text{elástica}}$ e a energia livre de superfície $f_{\text{ancoragem}}$. Dessa maneira, a forma geral da densidade de energia

livre é dada por [55, 56]:

$$f = f_{\text{termodinâmica}} + f_{\text{elástica}} + f_{\text{ancoragem}} + \dots \quad (2.1)$$

2.1.1 Densidade de Energia Livre termodinâmica

A contribuição associada ao volume do sistema na expressão da densidade de energia livre, $f_{\text{termodinâmica}}$, na teoria de Landau-de Gennes, depende do parâmetro de ordem Q_{ij} e é responsável pela energia livre associada ao grau de ordenação nemática local e à transição de fase entre as fases nemática e isotrópica. Neste sentido, ele é expresso como uma expansão polinomial em termos do parâmetro de ordem do tensor Q_{ij} , até a quarta ordem. A forma geral de $f_{\text{termodinâmica}}$ é [56, 57]:

$$f_{\text{termodinâmica}} = \frac{1}{2}A(T)\text{Tr}(Q^2) - \frac{1}{3}B\text{Tr}(Q^3) + \frac{1}{4}C[\text{Tr}(Q^2)]^2 + \dots, \quad (2.2)$$

em que, os traços da n -ésima potência do tensor Q_{ij} :

$$\text{Tr}(Q^2) = Q_{ij}Q_{ji}, \quad \text{Tr}(Q^3) = Q_{ij}Q_{jk}Q_{ki}, \quad (2.3)$$

representam os invariantes tensoriais, e a soma sobre índices repetidos é implícita. Assim, podemos representar $f_{\text{termodinâmica}}$ como:

$$f_{\text{termodinâmica}} = \frac{1}{2}A(T) Q_{ij}Q_{ji} - \frac{1}{3}B Q_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}C (Q_{ij}Q_{ji})^2 + \dots \quad (2.4)$$

Essa expansão descreve o comportamento termodinâmico dos CLs e suas transições de fase. A seguir, é apresentado o significado associado aos termos invariantes tensoriais presentes na expansão: O termo $\text{Tr}(Q^2) = Q_{ij}Q_{ji}$ quantifica o grau de alinhamento molecular local e está associado à magnitude do parâmetro de ordem. O termo $\text{Tr}(Q^3) = Q_{ij}Q_{jk}Q_{ki}$, por sua vez, reflete interações de ordem superior e quebra a simetria entre as fases isotrópica e nemática. Finalmente, o termo $[\text{Tr}(Q^2)]^2$ garante a estabilidade da energia livre, evitando que ela divirja, e influencia a amplitude do parâmetro de ordem.

Cada um desses termos é acompanhado por um coeficiente que regula sua contribuição física e influência no comportamento de fase. coeficiente do termo quadrático, $A(T)$, é o único coeficiente que se assume depender fortemente da temperatura, com uma forma linear simples [55, 57]:

$$A(T) = a(T - T^*), \quad (2.5)$$

onde a é uma constante positiva do material e T^* é a temperatura de transição nemático-isotrópica. Para temperaturas acima de T^* ($T > T^*$), temos $A(T) > 0$, e o termo quadrático favorece o estado isotrópico ($Q = 0$), que minimiza a energia. Abaixo de T^* ($T < T^*$), temos

$A(T) < 0$, tornando o estado isotrópico instável e favorecendo um estado ordenado ($Q \neq 0$). Já a existência do coeficiente B associado ao termo cúbico é permitida porque a energia livre do sistema não precisa ser simétrica sob inversão do parâmetro de ordem ($S \rightarrow -S$). O termo $\text{tr}(Q^3)$ muda de sinal quando Q muda de sinal, quebrando essa simetria possível. Esta assimetria é característica de transições de fase de primeira ordem. Para CLs nemáticos convencionais, assume-se $b > 0$, o que favorece estados com $S > 0$ [55]. Finalmente, o coeficiente C do termo quártico, com $C > 0$, é essencial para garantir a estabilidade termodinâmica do sistema. Ele impede que o parâmetro de ordem cresça indefinidamente quando $A < 0$, assegurando que a energia livre seja limitada inferiormente. Também influencia a magnitude do parâmetro de ordem e pode afetar a presença de fases biaxiais ou a existência de pontos tricríticos¹ [55].

A forma polinomial de $f_{\text{termodinâmica}}$ é uma aproximação válida perto da transição entre a fase isotrópica e a fase nemática. Em temperaturas muito baixas, a minimização deste polinômio pode levar a valores não físicos do parâmetro de ordem ($S > 1$), indicando que a teoria em sua forma mais simples perde precisão quantitativa longe de T_{NI} . Para analisar a transição, consideramos a forma uniaxial, descrita pela equação 1.9. Substituindo-a na expressão de $f_{\text{termodinâmica}}$, encontramos os invariantes $\text{tr}(Q^2) = \frac{2}{3}S^2$ e $\text{tr}(Q^3) = \frac{2}{9}S^3$. A densidade de energia torna-se uma função apenas do parâmetro de ordem escalar S [56]:

$$f_{\text{termodinâmica}}(S) = f_0 + \frac{1}{3}a_0(T - T^*)S^2 - \frac{2}{27}BS^3 + \frac{1}{9}CS^4. \quad (2.6)$$

A minimização de $f_{\text{termodinâmica}}(S)$ em relação a S ($\partial f_{\text{termodinâmica}}/\partial S = 0$) revela dois mínimos locais: um em $S = 0$ (fase isotrópica) e outro em $S \neq 0$ (fase nemática). A transição de fase ocorre na temperatura T_{NI} onde ambas as fases têm a mesma energia livre, ou seja, $f_{\text{termodinâmica}}(S = 0) = f_{\text{termodinâmica}}(S_{NI})$. Isso acontece a uma temperatura:

$$T_{NI} = T^* + \frac{2B^2}{27a_0C}. \quad (2.7)$$

Nesta temperatura, o parâmetro de ordem salta descontinuamente de $S = 0$ para um valor finito $S_{NI} = \frac{2B}{9C}$. Este salto é a característica definidora de uma transição de fase de primeira ordem, uma previsão que está em excelente acordo com observações experimentais [56].

2.1.2 Densidade de Energia Livre Elástica

Posto isso, dando continuidade à discussão da forma da densidade de energia livre, há também o termo associado à contribuição da densidade de energia livre elástica. Qualquer

¹Pontos tricríticos são pontos críticos onde três fases distintas se tornam indistinguíveis. Eles ocorrem em sistemas termodinâmicos com transições de fase mais complexas, como em certos materiais líquido-cristalinos ou magnéticos.

variação espacial ou desvio na orientação uniforme do campo diretor nemático $\mathbf{n}$ ou na magnitude da ordem do CL acarreta um custo energético, descrito pela densidade de energia elástica, $f_{\text{elástica}}$ [57, 58].

A energia elástica penaliza as distorções espaciais do campo $Q_{ij}(\mathbf{r})$. Para deformações suaves, $f_{\text{elástica}}$ pode ser expandida em uma série de potências dos gradientes espaciais do parâmetro de ordem tensorial, $\partial_k Q_{ij}$, com cada termo multiplicado pelas constantes elásticas correspondentes. A energia deve ser não negativa e nula para um estado uniforme ($\nabla Q = 0$). O termo de mais baixa ordem que satisfaz essa condição é quadrático nos gradientes. A forma geral de $f_{\text{elástica}}$ é construída a partir de todos os invariantes escalares independentes, quadráticos em $\partial_k Q_{ij}$. Para um fluido isotrópico, a simetria restringe o número de termos possíveis. A expressão mais geral até a ordem cúbica em Q é [57, 58]:

$$f_{\text{elástica}} = \frac{1}{2}L_1(\partial_k Q_{ij})^2 + \frac{1}{2}L_2(\partial_i Q_{ik})(\partial_j Q_{jk}) + \frac{1}{2}L_3 Q_{ij}(\partial_i Q_{kl})(\partial_j Q_{kl}), \quad (2.8)$$

em que $(\partial_k Q_{ij})^2 = (\partial_k Q_{ij})(\partial_k Q_{ij})$. Os coeficientes L_1 , L_2 e L_3 são constantes elásticas fenomenológicas². O termo com L_1 é o mais simples e, em muitas simulações, é o único considerado (aproximação de uma constante). O termo com L_3 é cúbico no total (um Q e dois ∇Q). Para materiais quirais, um termo adicional, $L_4 \epsilon_{ikl} Q_{ij} \partial_k Q_{lj}$, pode ser incluído para descrever a tendência à torção espontânea (fases colestéricas).

Por outro lado, na teoria clássica de Frank-Oseen é apresentada uma descrição alternativa da energia livre elástica em CLs nemáticos, que descreve a elasticidade em termos de três deformações do diretor $\mathbf{n}$: *splay* (divergência), *twist* (rotação) e *bend* (curvatura), ilustradas na Figura 2.1, com as respectivas constantes elásticas K_{11} , K_{22} e K_{33} . Neste sentido, a densidade de energia elástica $f_{\text{elástica}}$ para um CL nemático não quiral é dada pela equação a 2.9:

$$f_{\text{elástica}} = \frac{1}{2}K_{11}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_{22}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2}K_{33}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (2.9)$$

Nesse contexto, os termos $(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2$, $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2$ e $(\hat{\mathbf{n}} \times \nabla \times \hat{\mathbf{n}})^2$ quantificam a extensão de *splay*, *twist* e *bend* no campo diretor, respectivamente. Para conectar a teoria de Landau-de Gennes com a de Frank-Oseen, substitui-se a forma uniaxial de Q_{ij} em $f_{\text{elástica}}$ e compara-se o resultado termo a termo com a expressão de Frank-Oseen, assumindo que o parâmetro de ordem S é espacialmente constante [57, 58].

2.1.3 Densidade de Energia Livre de Ancoragem

Uma das principais contribuições adicionais à densidade de energia livre são as interações de superfície, que estão relacionadas ao comportamento das moléculas de CL nas interfaces,

²Cada termo e sua respectiva constante elástica estão associados a determinados tipos de distorções ou deformações no material, que contribuem para a energia elástica total, refletindo diferentes modos de comportamento elástico sob variações no tensor Q_{ij} .

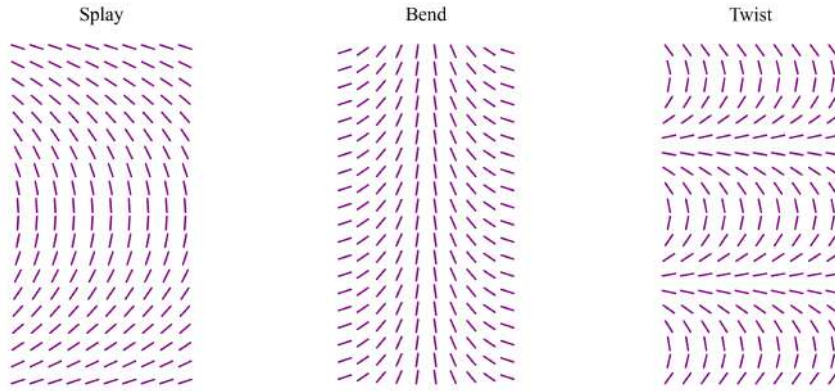


Figura 2.1: Representação esquemática das três deformações elásticas fundamentais em um CL nemático: *splay*, *twist* e *bend*, que correspondem energeticamente aos termos da equação de Frank-Oseen. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

como as superfícies das paredes de um recipiente ou as interfaces entre diferentes fases do material. Essas interações são chamadas de energias de ancoragem ou energias de acoplamento [59–61].

Desta maneira, as energias de ancoragem se referem ao custo energético necessário para fazer com que as moléculas de CL não se alinhem de uma maneira preferencial nas interfaces. Isso acontece porque pode ocorrer uma certa perturbação (como um campo externo) ou desvio dessa orientação preferencial imposta pelas superfícies, resultando em uma energia adicional associada à superfície. A força dessa interação determina o tipo de condição de contorno a ser usado no problema de minimização de energia [59–61]. Existem dois regimes principais. No caso da Ancoragem Forte, a energia necessária para desviar as moléculas da orientação preferencial na superfície é considerada infinita. A configuração do tensor Q na superfície é, portanto, fixa. Isso corresponde a uma condição de contorno de Dirichlet, $Q_{\text{superfície}} = Q^0$, onde Q^0 é o tensor de ordem preferencial na superfície [59]. Por outro lado, no regime de Ancoragem Fraca, a energia de ancoragem é finita. A orientação na superfície resulta de uma competição entre a energia elástica do volume, que tende a propagar uma orientação, e a energia de superfície, que favorece outra. Isso leva a uma condição de contorno natural (ou de Robin) derivada do processo de minimização [59].

Neste sentido, essa interação pode ser matematicamente representada por um termo de densidade de energia livre de ancoragem adicionado à densidade de energia livre total. Uma forma amplamente usada para a densidade de energia de ancoragem fraca é a generalização da energia livre de Rapini-Papoular, a qual quantifica a penalidade energética associada a desvios quadráticos do tensor de ordem Q em relação a um tensor de ordem preferencial Q_0 imposto pela superfície [57].

A formulação da densidade de energia livre de ancoragem parte da hipótese de que a superfície impõe um alinhamento preferencial, representado por Q_0 . Para obter uma

expressão funcional para a energia de ancoragem, consideramos a expansão da energia em série de Taylor em torno de $Q = Q_0$. Suponha que a energia de ancoragem $f_{\text{ancoragem}}$ seja uma função analítica de Q , e definimos o desvio em relação ao estado preferencial como [57] $\delta Q_{ij} = Q_{ij} - Q_{ij}^0$. Expandindo $f_{\text{ancoragem}}$ em torno de $Q = Q_0$, obtemos:

$$f_{\text{ancoragem}}(Q) \approx f(Q_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial Q_{ij}} \right|_{Q_0} \delta Q_{ij} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial Q_{ij} \partial Q_{kl}} \right|_{Q_0} \delta Q_{ij} \delta Q_{kl} + \dots \quad (2.10)$$

Como $Q = Q_0$ corresponde ao mínimo da energia, o gradiente da energia se anula nesse ponto e o termo linear desaparece. Além disso, o termo constante $f(Q_0)$ pode ser ignorado por não afetar a minimização da energia. Dessa forma, a forma dominante da energia de ancoragem para pequenos desvios é o termo quadrático:

$$f_{\text{ancoragem}} \approx \frac{1}{2} A \delta Q_{ij} \delta Q_{ij} = \frac{1}{2} A \text{Tr}[(\delta Q)^2], \quad (2.11)$$

onde A é um coeficiente positivo relacionado à rigidez da ancoragem, e utiliza-se a notação de traço para representar a soma das contribuições quadráticas dos elementos do tensor.

Substituindo explicitamente $\delta Q_{ij} = Q_{ij} - Q_{ij}^0$, reescrevendo o coeficiente A como W , e definindo a constante de ancoragem como positiva, temos que a expressão final para a energia de ancoragem fraca é:

$$f_{\text{ancoragem}} = \frac{1}{2} W \text{Tr} [(Q_{ij} - Q_{ij}^0)^2], \quad (2.12)$$

onde W representa a força da ancoragem (quanto maior W , mais fortemente o sistema é penalizado por se afastar de Q_0) e $\text{Tr}[(Q - Q_0)^2]$ mede a magnitude do desvio entre o estado atual e o preferencial imposto pela superfície.

Esta representação permite a incorporação de diferentes condições de ancoragem na estrutura da energia livre de Landau-de Gennes, facilitando a análise das configurações de equilíbrio e transições de ancoragem em sistemas de CLs. Especificamente, as condições de ancoragem podem promover ou suprimir a formação de certos defeitos topológicos. No âmbito do trabalho em questão, as condições de ancoragem empregadas foram as ancoragens homeotrópicas, planares e híbridas, conforme descrito a seguir.

A primeira delas é Ancoragem Homeotrópica, na qual as moléculas se alinham perpendicularmente à superfície. Se $\mathbf{v}$ é o vetor normal à superfície, o diretor preferencial é $\mathbf{n}^0 = \mathbf{v}$. O tensor de ordem preferencial é dado por:

$$Q_{ij}^0 = S^0 \left(v_i v_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right), \quad (2.13)$$

onde S^0 é o parâmetro de ordem escalar preferido na superfície, que pode ser diferente do

valor de equilíbrio no volume [62].

A segunda é Ancoragem Planar, onde as moléculas se alinham paralelamente à superfície. Se houver uma direção preferencial e no plano da superfície (por exemplo, devido a ranhuras ou a um processo de fricção), o diretor preferencial é $\mathbf{n}^0 = \mathbf{e}$, e o tensor é:

$$Q_{ij}^0 = S^0 \left(e_i e_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right). \quad (2.14)$$

Se todas as direções no plano são equivalentes (ancoragem planar degenerada), a descrição é mais complexa e geralmente envolve penalizar qualquer componente do diretor que seja normal à superfície [57, 61, 63].

A formulação da ancoragem em termos do tensor Q é intrinsecamente mais rica do que a forma clássica baseada no diretor ($f_s \propto \sin^2 \theta$). Ela permite modelar fenômenos como a variação do grau de ordem na superfície e a indução de biaxialidade pela superfície, que estão fora do alcance da teoria do diretor [59].

2.1.4 Energia Livre Total

Posto isto, a configuração de equilíbrio observada em um sistema de CL é aquela que minimiza a energia livre total, sujeita às condições de contorno impostas. A energia livre total do sistema, $F[Q]$, é obtida integrando as densidades de energia termodinâmica e elástica sobre o volume V e a densidade de energia de ancoragem sobre a superfície de contorno Σ [57, 64, 64] :

$$F[Q] = \int_V (f_{\text{termodinâmica}} + f_{\text{elástica}}) dV + \int_{\Sigma} f_{\text{ancoragem}} d\Sigma. \quad (2.15)$$

O estado de equilíbrio do sistema é encontrado através da minimização do funcional $F[Q]$. Este problema variacional leva a um conjunto de equações de Euler–Lagrange a partir da condição de que a primeira variação de F em relação a Q_{ij} seja nula, $\delta F / \delta Q_{ij} = 0$. Desta minimização, resultam duas equações principais que governam o comportamento do sistema. A primeira é a Equação no Volume, que descreve a dinâmica no material:

$$-\frac{\Lambda_{mlj}}{\mu} \left[\frac{\partial f_V}{\partial Q_{ij}} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial f_V}{\partial_k Q_{ij}} \right) \right] = \frac{\partial Q_{ml}}{\partial t}, \quad (2.16)$$

onde $f_V = f_t + f_{el}$, μ é a viscosidade de volume, e Λ_{mlj} é um tensor que garante que $\mathbf{Q}$ permaneça simétrico e com traço zero. O termo da direita representa o processo de dissipação no tempo, associado à dinâmica de relaxação do CL. Isso constitui um sistema de cinco equações diferenciais parciais, elípticas e não lineares para as componentes independentes de Q [64–66].

A segunda é a Condição de Contorno, aplicável a casos de Ancoragem Fraca, que dita o

comportamento nas interfaces:

$$-\frac{\Lambda_{mlj}}{\mu_s} \left[\left(\frac{\partial f_V}{\partial_k Q_{ij}} \right) \nu_k + \frac{\partial f_{ancoragem}}{\partial Q_{ij}} \right] = \frac{\partial Q_{ml}}{\partial t}, \quad (2.17)$$

onde v_m é a m -ésima componente da normal à superfície e μ_s é a viscosidade de superfície. Esta equação descreve o balanço de momentos generalizados na superfície, ou seja, o equilíbrio entre as contribuições variacionais associadas às variações do campo Q_{ij} tanto no interior quanto na fronteira do sistema. Esses momentos generalizados representam o efeito das forças internas resultantes da energia elástica e das condições de contorno impostas pela ancoragem. Assim, a tendência elástica do volume é contrabalançada pela tendência de ancoragem da superfície [64–66].

A resolução analítica deste complexo sistema de equações diferenciais parciais é, em geral, impraticável, tornando a abordagem numérica uma ferramenta indispensável para a investigação científica. Neste contexto, todas as simulações que geraram os dados para este trabalho foram realizadas com o *software* Marlics (*Maringá Liquid Crystal Simulator*) [67]. Este programa de código aberto, projetado para modelar sistemas de CLs, implementa o formalismo de Landau-de Gennes ao discretizar o campo tensorial $\mathbf{Q}$ em uma malha tridimensional pelo Método das Diferenças Finitas. A parte de evolução temporal da simulação utiliza, no nosso contexto, o método de Dormand-Prince para simular a dinâmica do processo de relaxação. As configurações do tensor de ordem obtidas por este processo constituem a base de dados para todas as análises desenvolvidas nos capítulos subsequentes [67].

Complexidade e Entropia

Este capítulo aborda inicialmente a Entropia de Permutação (Seção 3.1), conceito introduzido por Bandt & Pompe em 2002 [7], os quais apresentaram um esquema de codificação simbólica baseado na relação ordinal entre a amplitude de valores vizinhos de uma dada sequência de dados, ignorando suas magnitudes absolutas, a partir do qual H pode ser avaliada. Na Seção 3.2, é apresentada a Entropia de Permutação baseada no Vizinho mais Próximo (K -NN PE). A Seção 3.3 discute a Complexidade Estatística (C), seus componentes e a Divergência de Jensen-Shannon, culminando com a definição formal de C . Finalmente, a Seção 3.4 interpreta o Plano Complexidade-Entropia ($C - H$), que integra essas métricas para analisar a dinâmica do sistema.

3.1 Entropia de Permutação

A Entropia de Permutação é uma medida de complexidade amplamente reconhecida, projetada para analisar a estrutura temporal de séries de dados. Diferentemente de outras métricas que se baseiam na distribuição de probabilidade dos valores, H foca nos padrões ordinais — permutações que descrevem a ordem relativa dos pontos em pequenas janelas de tempo. Ao quantificar a diversidade e a frequência desses padrões, H oferece uma maneira prática de investigar a dinâmica de sistemas complexos, sendo especialmente útil para inferir informações sobre a estrutura subjacente de um sistema a partir de seus dados [8, 9]. H é uma ferramenta de análise versátil, destacando-se por sua simplicidade e eficiência computacional, ideal para grandes conjuntos de dados. Sua solidez assegura a confiabilidade mesmo com dados ruidosos, permitindo aplicação em diversas séries temporais, como sistemas determinísticos, caóticos, estocásticos e não estacionários.

A formulação matemática da entropia de permutação segue uma sequência de etapas bem definidas, desde a construção de vetores de estado até o cálculo final da entropia. O procedimento da simbolização de Bandt & Pompe, ilustrado esquematicamente na Figura 3.1, pode ser decomposto em três etapas principais.

A primeira etapa é Segmentação da Série Temporal (Figura 3.1a), que consiste em particionar a série temporal original em vetores de estado sobrepostos e de tamanho fixo. A construção desses vetores é governada pela dimensão de imersão ou dimensão de *embedding* d , que define o número de pontos em cada segmento, e pelo atraso temporal τ , que determina o espaçamento entre esses pontos. Para o exemplo ilustrado, utiliza-se $d = 3$ e $\tau = 1$, de modo que cada segmento é formado por três pontos consecutivos da série [9, 68].

Em seguida, realiza-se o Mapeamento para Padrões Ordinais (Figura 3.1b), no qual cada vetor de estado é mapeado para um padrão ordinal simbólico. Este mapeamento não considera as amplitudes absolutas dos valores, mas sim sua ordem relativa. A cada valor do vetor é atribuído um *rank*, de 1 (menor valor) a d (maior valor). O padrão ordinal é, então, a sequência desses *ranks* na ordem onde os valores apareceram originalmente no tempo. Em casos de valores repetidos, a ordem de ocorrência é preservada. Por exemplo, um vetor com os valores $[5, 2; 1, 8; 9, 5]$ seria mapeado para o padrão ordinal $(2, 1, 3)$, pois o segundo valor (1,8) é o menor (*rank* 1), o primeiro valor (5,2) é o intermediário (*rank* 2) e o terceiro valor (9,5) é o maior (*rank* 3). Para uma dimensão d , existem $d!$ (d fatorial) padrões ordinais possíveis, conforme ilustrado para $d = 3$ na figura [9, 13, 69–71].

A etapa final é Construção da Distribuição de Probabilidade (Figura 3.1c), que envolve a quantificação da frequência relativa $p(\pi_i)$ de cada padrão ordinal π_i (equação 3.1). O processo de mapeamento é repetido para todos os vetores de estado possíveis ao longo de toda a série temporal. A frequência de ocorrência de cada padrão ordinal único, π_i , é então calculada e normalizada pelo número total de vetores, resultando em uma distribuição de probabilidade discreta, $P = \{p(\pi_i)\}$. Esta distribuição contém informações da dinâmica da série, revelando quais padrões são dominantes e quais são raros [13, 70].

$$p(\pi_i) = \frac{\#\{s \mid s \leq n - (d-1)\tau; (x_s, \dots, x_{s+(d-1)\tau}) \text{ tem tipo } \pi_i\}}{n - (d-1)\tau}. \quad (3.1)$$

Com a distribuição de probabilidade em mãos, a entropia de permutação é calculada como a entropia de Shannon desta distribuição:

$$H(P) = - \sum_i p(\pi_i) \log(p(\pi_i)). \quad (3.2)$$

Essa medida reflete a incerteza ou aleatoriedade na ordem dos valores. Séries com alta diversidade de padrões terão uma entropia maior, enquanto séries ordenadas apresentarão uma entropia menor [9, 10, 70]. Para facilitar a comparação, conforme a equação 3.3, H pode ser normalizada pela entropia máxima possível, $\log(d!)$. A entropia normalizada varia entre

Ilustração da Metodologia de Simbolização de Bandt e Pompe

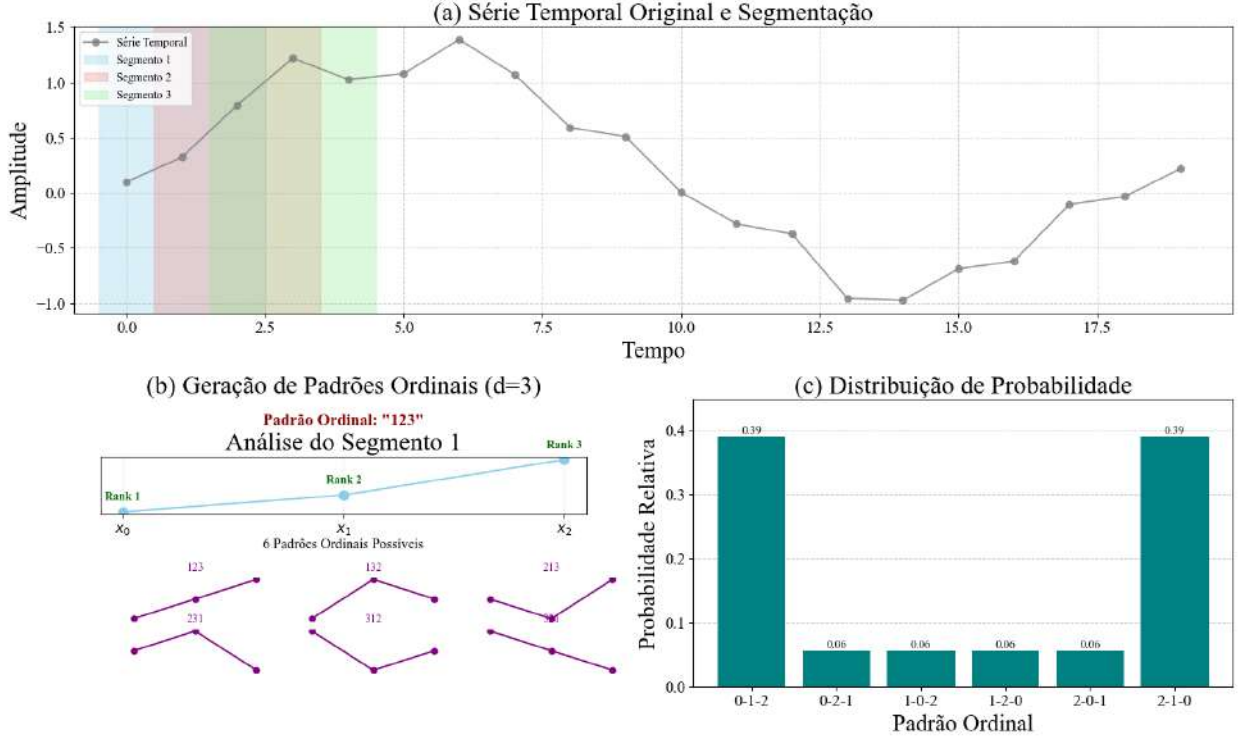


Figura 3.1: Ilustração da metodologia de simbolização de Bandt e Pompe. (a) Série temporal original e sua segmentação em vetores de estado. (b) Análise de um segmento com dimensão de embedding $d = 3$, mostrando a atribuição de ranks e os 6 padrões ordinais possíveis. (c) Distribuição de probabilidade relativa dos padrões ordinais encontrados na série temporal completa. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

0 (para séries completamente previsíveis) e 1 (para séries completamente aleatórias, onde todos os padrões são equiprováveis) [10, 70].

$$H_{\text{norm}} = \frac{H(P)}{\log(d!)}. \quad (3.3)$$

3.2 Entropia de Permutação baseada no Vizinho mais Próximo (K -NN PE)

A entropia de permutação baseada no vizinho mais próximo (k -Nearest Neighbors Permutation Entropy, ou k -NN PE) estende a entropia de permutação para dados não estruturados, como imagens e nuvens de pontos. Em vez de apenas considerar a ordem sequencial de uma série temporal, a k -NN PE analisa os k vizinhos mais próximos de cada ponto para gerar padrões ordinais, incorporando também a estrutura espacial dos dados. Essa generalização torna a k -NN PE simples, interpretável e eficiente [13]. A metodologia da k -NN PE, na

Figura 3.2, apresenta dois parâmetros essenciais para calcular a entropia. Inicia-se com um conjunto de dados não estruturado (a), onde é construído um grafo k -NN (b). Depois, uma caminhada aleatória pelo grafo (c) gera valores convertidos em padrões ordinais, e calcula-se a distribuição de probabilidade para a entropia final (d).

Visão Detalhada da Entropia de Permutação dos K Vizinhos Mais Próximos (k-NN PE)

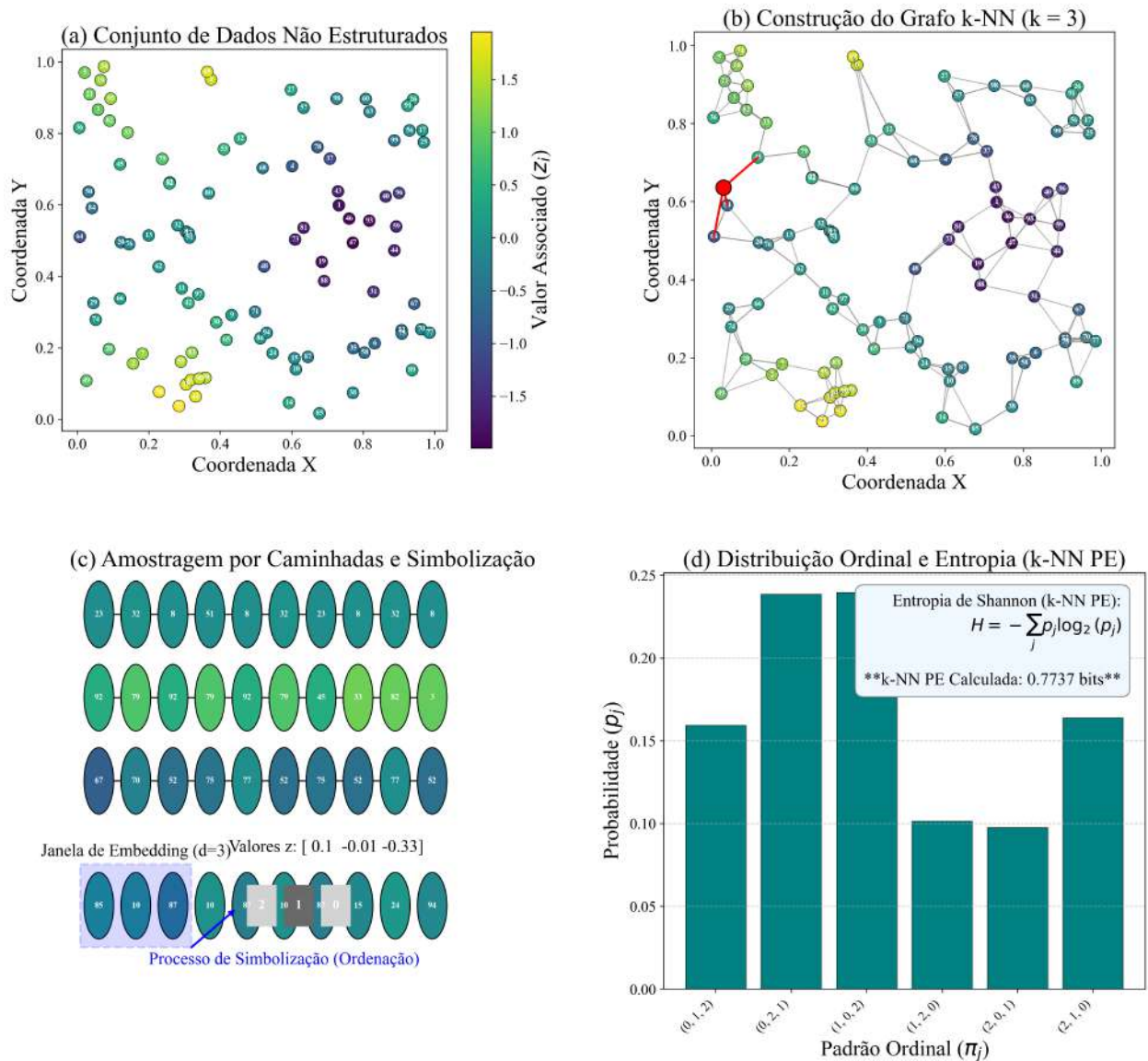


Figura 3.2: Ilustração da metodologia da k -NN PE. (a) Conjunto de dados espaciais não estruturado. (b) Construção de um grafo k -NN (com $k=3$) sobre os dados. (c) Geração de uma série temporal a partir de uma caminhada aleatória no grafo, seguida pela aplicação do processo de simbolização de Bandt-Pompe com uma janela de embedding ($d=3$) para obter os padrões ordinais. (d) Cálculo da distribuição de probabilidade dos padrões e da entropia de Shannon final (k -NN PE). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Os parâmetros que governam este processo são a dimensão de *embedding* (d), que, assim

como na H padrão, define a escala para a análise dos padrões ordinais; e o número de vizinhos mais próximos (k), que estabelece a estrutura de um grafo de vizinhança e controla a ênfase da análise, que pode variar de estruturas puramente locais a globais.

O parâmetro k impacta diretamente nos resultados. Um k muito pequeno cria um grafo com componentes desconexas, limitando a análise a pequenas áreas e dificultando a identificação de padrões entre pontos distantes. Um k muito grande torna o grafo quase totalmente conectado, fazendo as trajetórias parecerem aleatórias e aumentando os valores de entropia. Neste trabalho, foram testados vários valores para k , e optou-se por $k = 24$ nas análises de CLs. Para os parâmetros dimensão de *embedding* (d) e atraso (τ), foram usados $d = 3$ e $\tau = 1$, respectivamente. A aplicabilidade da k -NN PE é evidente em contextos nos quais a proximidade espacial entre os elementos possui maior relevância do que suas amplitudes. É o caso das texturas de CLs — os padrões visíveis que emergem da organização espacial das moléculas — onde a orientação e a disposição local influenciam diretamente as propriedades físicas do material [13]. Nesse campo, a k -NN PE e a entropia de permutação são aplicadas com sucesso em diversas tarefas. Na Análise de Texturas Complexas, em CLs colesterol, as medidas diferenciam texturas com diferentes *pitches*. Finalmente, na Integração com Aprendizado de Máquina, os valores de entropia e complexidade são empregados como características (*features*) para treinar algoritmos, alcançando alta precisão na classificação e regressão de propriedades físicas [9, 10, 13, 70]. Para a implementação e cálculo da k -NN PE, foi utilizado o módulo de código aberto knnpe para *Python*, desenvolvido pelos autores do método original [13].¹

3.3 Complexidade Estatística (C)

A entropia de permutação (H) mede a aleatoriedade de um sistema, enquanto a Complexidade Estatística (C) avalia sua organização. Ela distingue entre desordem verdadeira (ruído estocástico) e complexidade estrutural (dinâmica caótica). Sistemas com complexidade próxima de zero ($C \approx 0$) são simples, mostrando completa ordem (sinal periódico, onde $H \approx 0$) ou desordem (ruído branco, onde H é máximo). Em contrapartida, sistemas que exibem uma rica estrutura de correlações e padrões complexos têm complexidade acima de zero ($C > 0$).

A formulação da complexidade estatística é definida como o produto de duas quantidades: a entropia do sistema e uma medida de seu afastamento em relação a um estado de desordem máxima. Matematicamente, ela integra a entropia de permutação (H) com a Divergência de Jensen-Shannon (D) [11, 72]. A Divergência de Jensen-Shannon (D) mede a dissimilaridade entre a distribuição de probabilidades dos padrões ordinais observados, P , e a distribuição

¹O módulo knnpe está disponível publicamente no *GitHub* (github.com/hvribeiro/knnpe) e pode ser instalado através do *Python Package Index* (PyPI).

uniforme, U , que representa o caso de máxima aleatoriedade. A sua definição formal é:

$$D(P, U) = S\left(\frac{P + U}{2}\right) - \frac{S(P) + S(U)}{2}, \quad (3.4)$$

onde S é a funcional da entropia de Shannon. Considerando que $S(P) = H(P)$ e $S(U) = H(U)$, a fórmula pode ser reescrita como:

$$D(P, U) = H\left(\frac{P + U}{2}\right) - \frac{H(P)}{2} - \frac{H(U)}{2}. \quad (3.5)$$

Essa medida quantifica o quanto a distribuição P se desvia da uniformidade [11]. Para tornar a divergência comparável entre diferentes sistemas, ela é normalizada:

$$D^* = \frac{D(P, U)}{D_{\max}}, \quad (3.6)$$

onde $D_{\max}$ é o valor máximo possível de D , que ocorre quando a probabilidade P está totalmente concentrada em um único padrão ordinal [11, 72].

A Complexidade Estatística (C) é então definida como o produto da entropia de permutação normalizada e da divergência de Jensen-Shannon normalizada:

$$C = H \cdot D^*. \quad (3.7)$$

A entropia H quantifica a aleatoriedade ou o grau de desordem do sistema, enquanto a divergência D^* mede o quão estruturada ou distante a distribuição de probabilidade do sistema está de uma distribuição puramente aleatória (uniforme). Por ser um produto, o valor da Complexidade Estatística (C) será baixo (próximo de zero) em ambos os extremos: primeiro, para sistemas perfeitamente ordenados (como um sinal periódico), onde há estrutura máxima, mas a entropia é nula ($H \rightarrow 0$); e segundo, para sistemas perfeitamente aleatórios (como um ruído branco), onde a entropia é máxima, mas não há estrutura discernível, fazendo com que a distribuição seja uniforme e a divergência nula ($D^* \rightarrow 0$). Desta forma, a complexidade atinge seus valores máximos apenas em regimes intermediários, onde o sistema exibe simultaneamente um grau significativo de aleatoriedade ($H > 0$) e uma estrutura de correlações que o diferencia da desordem total ($D^* > 0$) [11, 72].

No domínio temporal, os parâmetros de *embedding* τ (atraso) e d (dimensão) são essenciais. A escolha de τ afeta a resolução temporal, enquanto d define o número de padrões ordinais possíveis, como discutido em [9, 72]. Um conceito importante é o tempo característico do sistema, a escala de tempo típica de suas dinâmicas. A entropia de permutação é mínima quando τ coincide com esse tempo, indicando maior previsibilidade [9]. Em dados espaciais bidimensionais como imagens, os parâmetros de *embedding* d_x e d_y definem o tamanho das janelas de análise. Para dados tridimensionais, considera-se uma janela $d_x \times d_y \times d_z$.

Janelas menores capturam detalhes locais, enquanto maiores identificam padrões em larga escala [11, 70]. Em sistemas de partículas como CLs, pode-se usar a discretização do espaço em *voxels*² ou métodos de vizinhança como a k -NN PE. A escolha da dimensão de *embedding* espacial deve cumprir a condição $d_x d_y d_z \ll N_x N_y N_z$, onde N_x, N_y, N_z são as dimensões da matriz de dados, garantindo estimativas confiáveis da distribuição de probabilidade ordinal [11]. Estudar a complexidade em sistemas de CLs é vital para entender seus comportamentos e desenvolver tecnologias. Ferramentas como entropia de permutação e complexidade estatística quantificam sistematicamente a variedade de estruturas e dinâmicas nesses materiais [73, 74]. As principais áreas de atuação incluem: a investigação de defeitos topológicos, na qual a análise de complexidade é importante para analisar defeitos como disclinações que influenciam as propriedades ópticas e a estabilidade das fases [74–76]; a compreensão da auto-organização, que quantifica a emergência de ordem em sistemas complexos sem intervenção externa [73, 77]; e a análise das dinâmicas fora do equilíbrio, essencial para estudar a evolução de padrões e comportamentos emergentes em sistemas que não estão em equilíbrio termodinâmico [78].

3.4 O Plano Complexidade-Entropia (C - H)

A análise combinada de H e C dá origem ao plano de complexidade-entropia, frequentemente designado como plano C-H, uma ferramenta de visualização para a análise de sistemas complexos [68, 70, 72]. Ele representa graficamente a complexidade estatística (C) em função da entropia de permutação (H), proporcionando uma visão integrada das duas métricas [11]. No plano C - H , a posição de cada ponto é determinada pelos valores calculados de H e C para um dado sistema ou conjunto de dados. Esta representação permite uma distinção entre diferentes regimes de ordem e aleatoriedade, conforme ilustrado esquematicamente na Figura 3.3.

A distribuição dos pontos no plano segue um padrão característico. Sistemas Altamente Ordenados, como sinais periódicos, concentram-se na região de baixa entropia e baixa complexidade (canto inferior esquerdo). Enquanto Sistemas Aleatórios, como ruído branco, ocupam a região de alta entropia, porém com baixa complexidade, uma vez que carecem de estrutura correlacional (canto inferior direito). Por fim, Sistemas Complexos, que exibem uma estrutura interna mais sofisticada e correlações não triviais, situam-se na região central do plano, onde tanto a entropia quanto a complexidade assumem valores significativos.

A análise do plano C - H revela diversas propriedades dos sistemas em estudo. A sua utilidade se manifesta em várias aplicações, como na comparação entre sistemas, onde aqueles com características dinâmicas ou estruturais semelhantes tendem a se agrupar em regiões

²No contexto, *voxels* são unidades discretas de volume (análogas a *pixels* em 2D) usadas para dividir dados tridimensionais em regiões de análise.

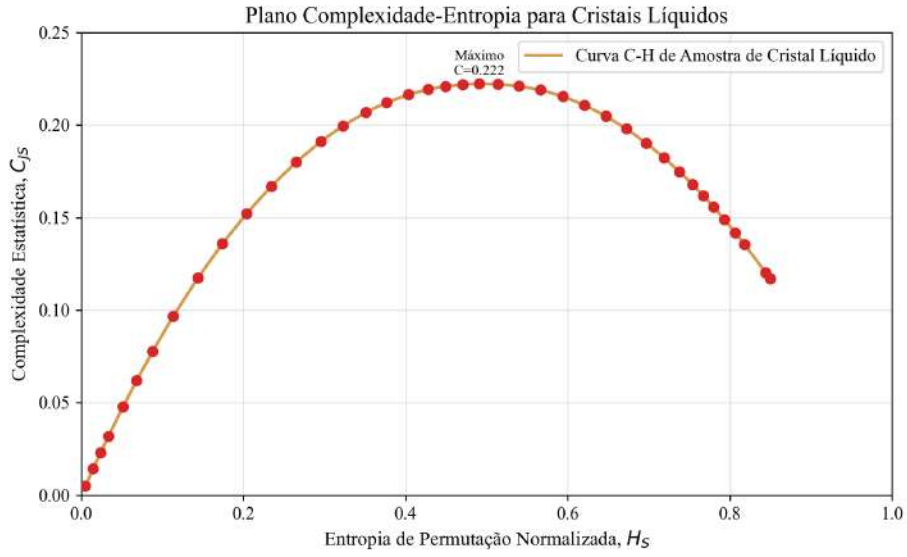


Figura 3.3: Exemplo esquemático do plano $C - H$, que relaciona a complexidade estatística (C) e a entropia de permutação (H). Sistemas ordenados se concentram no canto inferior esquerdo, sistemas aleatórios no canto inferior direito, e sistemas com estruturas complexas ocupam a região central do gráfico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

próximas do plano, facilitando a sua classificação [68]. O plano também é eficaz na caracterização de padrões [9, 11, 68]. Uma de suas aplicações mais importantes é a capacidade de distinção entre caos e ruído, diferenciando sistemas determinísticos caóticos (alta complexidade) de sistemas puramente aleatórios (baixa complexidade), fundamental em estudos de fenômenos biológicos, econômicos e físicos [9, 11, 68].

Conceitos Fundamentais e Modelos em Aprendizado de Máquina

Com base na fundamentação teórica sobre a física dos CLs, suas fases, defeitos e parâmetros de ordem, este capítulo estabelece a metodologia computacional empregada para analisar os dados gerados pelas simulações. O objetivo central é transpor a análise de um domínio puramente físico-descritivo para um quantitativo-preditivo, utilizando técnicas de aprendizado de máquina supervisionado. Esta abordagem permite não apenas caracterizar, mas também prever propriedades macroscópicas e condições de contorno do sistema de CL a partir de sua dinâmica. Para tal, este capítulo detalha os conceitos fundamentais de aprendizado supervisionado, os métodos de preparação de dados de séries temporais, as arquiteturas de aprendizado profundo empregadas e as métricas utilizadas para avaliar o desempenho dos modelos.

O capítulo está organizado em três partes principais. A Seção 4.1 detalha a metodologia de aprendizado de máquina, abordando desde a preparação dos dados de séries temporais — incluindo normalização e a técnica de janelas deslizantes — até a formulação dos problemas de classificação e regressão. A Seção 4.2 apresenta as arquiteturas de aprendizado profundo empregadas, com foco em modelos recorrentes, convolucionais e híbridos, contrastando-os com modelos de *Machine Learning* clássicos. Por fim, a Seção 4.3 estabelece o protocolo de validação, descrevendo as métricas de classificação e regressão usadas para aferir o desempenho dos modelos.

4.1 Metodologia de Aprendizado de Máquina

O aprendizado de máquina supervisionado é um modelo computacional que aprende a mapear entradas para saídas com base em um conjunto de dados de treinamento previamente

rotulado. O objetivo é que o modelo generalize o conhecimento adquirido para fazer previsões precisas sobre dados novos e não vistos. No âmbito desta pesquisa, duas tarefas primárias de aprendizado supervisionado são empregadas para investigar a dinâmica dos CLs: classificação e regressão [79, 80].

Classificação

A tarefa de classificação consiste em prever um rótulo categórico a partir dos dados de entrada [81]. Neste trabalho, a classificação foi utilizada para identificar as condições de simulação a partir da dinâmica temporal das métricas de informação, incluindo: a Geometria (placas paralelas ou esféricas), o Ancoramento de superfície (planar, homeotrópico ou híbrido) e a Quiralidade (magnitude).

Regressão

A regressão, por sua vez, visa prever um valor de saída contínuo. Em vez de encontrar uma fronteira de decisão para separar classes, um modelo de regressão busca uma linha de melhor ajuste (ou curva) que modele a relação funcional entre as variáveis de entrada e a variável de saída contínua [82]. Nesta pesquisa, a regressão foi aplicada para quantificar propriedades físicas macroscópicas do sistema, como a previsão do Parâmetro de Ordem, da Densidade de Linhas de Defeito e da Taxa de Decaimento de Defeitos no estado de equilíbrio.

O Método da Janela Deslizante

Para aplicar algoritmos de aprendizado supervisionado a séries temporais, foi utilizado o método da janela deslizante para transformar a estrutura sequencial em pares de entrada-saída (X, y) . Uma janela de tamanho fixo desliza sobre a série, onde os valores dentro da janela formam o vetor de entrada (X) e o valor subsequente é o alvo (y) . Para as arquiteturas de aprendizado profundo, que exigem a preservação da ordem temporal, o conjunto de dados foi remodelado para um *array* 3D com as dimensões (amostras, passos de tempo, características), permitindo que os modelos processem cada janela como uma sequência distinta [83–86]

Normalização de Dados para Treinamento de Redes Neurais

A normalização dos dados é uma etapa de pré-processamento para redes neurais, visando colocar as características em uma escala semelhante. Este procedimento acelera a convergência do treinamento, previne instabilidades numéricas e garante que o modelo aprenda os

pesos apropriadamente, sem atribuir importância indevida a *features* com maiores magnitudes. Neste trabalho, foi utilizada a escala *Z-Score*:

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (4.1)$$

onde os parâmetros de normalização (média da característica μ e desvio padrão σ) foram calculados exclusivamente no conjunto de treinamento para evitar o vazamento de dados (*data leakage*) e garantir uma avaliação realista do desempenho do modelo nos dados de teste [87–89].

4.2 Arquiteturas de Aprendizado Profundo para Análise de Séries Temporais

A análise das séries temporais geradas pelas simulações de CLs exige modelos capazes de capturar padrões temporais complexos. Esta seção detalha as arquiteturas de aprendizado profundo empregadas neste trabalho, abrangendo modelos recorrentes, convolucionais e híbridos, além dos modelos de *machine learning* clássicos usados como linha de base. Uma explicação aprofundada da formulação matemática da arquitetura e do funcionamento de cada um dos modelos pode ser consultada em suas respectivas referências citadas.

Arquiteturas Recorrentes

Foram empregadas Redes Neurais Recorrentes (RNNs), projetadas para dados sequenciais. Utilizaram-se arquiteturas como *Long Short-Term Memory* (LSTM) e *Gated Recurrent Unit* (GRU), que empregam mecanismos de portões para diminuir o problema do desaparecimento do gradiente, ou seja, a dificuldade de aprender com informações do início de sequências longas, e capturar dependências de longo prazo. Adicionalmente, foi usada a LSTM Bidirecional (BiLSTM), que processa a sequência em ambas as direções (passado-futuro e futuro-passado) para obter uma representação contextual mais rica da dinâmica [90–93].

Arquiteturas Convolucionais

Arquiteturas baseadas em convoluções também foram exploradas. A Rede Neural *Convolutional 1D* (1D-CNN) aplica filtros que deslizam ao longo da dimensão temporal para extrair padrões locais hierárquicos da série. Uma variante mais avançada, a Rede Convolucional Temporal (TCN), utiliza convoluções causais e dilatadas para garantir que as previsões dependam apenas de observações passadas e para expandir exponencialmente seu campo receptivo, capturando dependências temporais muito longas de forma eficiente [94–96].

Arquiteturas Híbridas

Para alavancar as forças complementares das abordagens anteriores, foi implementada uma arquitetura híbrida CNN-LSTM. Este modelo utiliza um componente CNN para extrair características locais da sequência de entrada, sendo então processadas por um componente LSTM para modelar suas dependências temporais de longo prazo [97, 98].

Modelos de *Machine Learning* Clássico

Em contraposição às arquiteturas de aprendizado profundo que analisam a trajetória temporal completa, este trabalho também investiga o poder preditivo contido em segmentos locais da evolução do sistema. Para esta finalidade, também foram empregados modelos de aprendizado de máquina clássicos, especificamente *K-Nearest Neighbors* (K-NN) e *Random Forest* [82, 99].

A análise foi conduzida sob duas estratégias distintas. A primeira abordagem consistiu em tratar cada ponto individual das séries temporais (C e H) como uma entrada independente, visando avaliar a capacidade preditiva de um estado instantâneo do sistema. A segunda abordagem empregou a técnica de janelas deslizantes, com larguras de 5 e 10 pontos, para capturar a dinâmica local e as dependências temporais de curto prazo.

Os modelos de *machine learning* clássico utilizados como linha de base, para análise com os modelos de *aprendizado profundo*, foram o *K-Nearest Neighbors* (K-NN), um método não paramétrico que faz previsões com base nos "vizinhos" mais próximos no espaço de características, e o *Random Forest* (RF), um método de conjunto que constrói múltiplas árvores de decisão para melhorar a precisão do modelo [82, 99].

4.3 Avaliação de Desempenho do Modelo

A avaliação quantitativa do desempenho dos modelos treinados é essencial para validar sua eficácia e comparar diferentes arquiteturas. As métricas de avaliação devem ser escolhidas segundo a natureza da tarefa, seja ela de classificação ou de regressão.

4.3.1 Métricas de Classificação

Para as tarefas de classificação (previsão de *Geometria*, *Ancoramento* e *Quiralidade*), as seguintes métricas são utilizadas.

Matriz de Confusão

A Matriz de Confusão (Figura 4.1) foi utilizada para uma visão detalhada do desempenho do classificador, resumindo as predições corretas, ou seja, Verdadeiros Positivos (TP) e

Verdadeiros Negativos (TN), e incorretas, isto é, Falsos Positivos (FP) e Falsos Negativos (FN) para cada classe [100, 101].

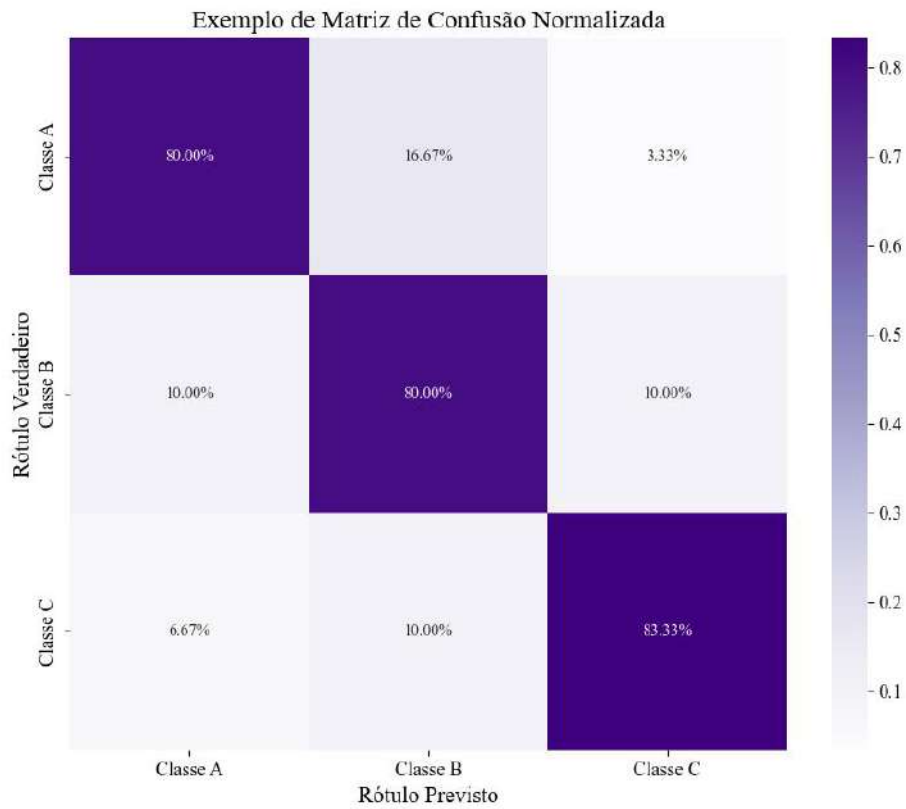


Figura 4.1: Matriz de confusão normalizada mostrando o desempenho de um classificador em três classes distintas (Classe A, Classe B e Classe C). Os valores nas células representam a porcentagem das previsões para cada classe verdadeira. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Acurácia

A acurácia (Equação 4.2) é a métrica mais intuitiva e mede a proporção de todas as previsões que o modelo acertou. É calculada como a soma das previsões corretas, verdadeiros positivos (TP) e negativos (TN) dividida pelo número total de previsões, ou seja, $TN + TP + FP + FN$ (equação 4.2) [100, 101]:

$$\text{Acurácia} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}. \quad (4.2)$$

Precisão e Revocação

Enquanto a acurácia fornece uma visão geral, a precisão (Equação 4.3) e a revocação (Equação 4.4) oferecem uma análise mais detalhada do desempenho, especialmente em con-

juntos de dados desbalanceados. A Precisão mede a exatidão das predições positivas, indicando uma baixa taxa de falsos positivos quando alta:

$$\text{Precisão} = \frac{TP}{TP + FP}. \quad (4.3)$$

A Revocação, por sua vez, mede a capacidade do modelo de identificar todas as amostras que eram realmente positivas, indicando uma baixa taxa de falsos negativos quando alta: [100, 101].

$$\text{Revocação} = \frac{TP}{TP + FN}. \quad (4.4)$$

F1-Score

O *F1-Score* é a média harmônica da precisão e da revocação. Ele combina ambas as métricas em um único valor balanceado. É particularmente útil quando as classes são desbalanceadas e atinge seu valor máximo em 1 (precisão e revocação perfeitas) [100, 101]. A formulação matemática dessa métrica é:

$$F1\text{-Score} = 2 \cdot \frac{\text{Precisão} \cdot \text{Revocação}}{\text{Precisão} + \text{Revocação}} = \frac{2 \cdot TP}{2 \cdot TP + FP + FN}. \quad (4.5)$$

4.3.2 Métricas de Regressão

Para as tarefas de regressão (previsão do *Parâmetro de Ordem*, *Densidade de linhas de defeito*, *Taxa de Decaimento de Defeitos* e *Quiralidade*), as seguintes métricas são utilizadas.

Erro Absoluto Médio (MAE)

O Erro Absoluto Médio (MAE) calcula a média das diferenças absolutas entre os valores previstos e os valores reais, fornecendo uma medida direta da magnitude média dos erros. Um valor menor indica um melhor ajuste [102]. A formulação matemática dessa métrica é:

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|, \quad (4.6)$$

onde n é o número total de amostras, y_i é o valor real para a amostra i , e $\hat{y}_i$ é o valor previsto para a amostra i .

Coefficiente de Determinação (R^2 Score)

O R^2 Score, ou coeficiente de determinação, mede a proporção da variância na variável dependente que é previsível a partir das variáveis independentes. Um valor de 1 indica que o modelo explica toda a variabilidade dos dados, enquanto valores próximos ou abaixo

de 0 indicam um ajuste inadequado. Em casos excepcionais, quando o modelo é pior que simplesmente usar a média dos dados, o R^2 pode assumir valores negativos [102, 103]. A formulação matemática do R^2 *Score* é:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (4.7)$$

em que n é o número total de amostras, y_i é o valor real para a amostra i , $\hat{y}_i$ é o valor previsto para a amostra i e $\bar{y}$ é a média dos valores reais de y_i . Desta forma, $\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ é a soma dos quadrados dos resíduos (SSR), que representa a variação não explicada pelo modelo, e $\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$ é a soma dos quadrados (SST), que representa a variação total nos dados.

Caracterização da Dinâmica de Relaxamento de CLs via Teoria da Informação

5.1 Introdução

Este capítulo apresenta e analisa os resultados obtidos a partir das simulações de dinâmica de CLs. O objetivo central é investigar o processo de relaxamento (ou seja, a evolução de um estado inicial completamente desordenado para um estado ordenado) e a evolução estrutural de sistemas nemáticos e colestéricos sob diferentes condições de controle. Recapitulando, as simulações foram desenhadas para explorar sistematicamente a influência de três fatores principais: a geometria de confinamento (placas paralelas, ou *slabs*, e esferas), o ancoramento de superfície (planar, homeotrópico e híbrido) e a quiralidade intrínseca (representada pelo parâmetro N^* que mede o número de voltas permitidas ao colestérico no espaço confinante). A análise acompanha o parâmetro de ordem nemático, a densidade de linhas de defeito e as métricas derivadas da teoria da informação — a Complexidade Estatística (C) e a Entropia de Permutação (H). Essas ferramentas permitem uma caracterização da dinâmica, capturando não apenas o grau de ordem, mas também a complexidade estrutural e a aleatoriedade do sistema ao longo do tempo.

Em todas as simulações na geometria plana (*slab* ou *bulk*), foram utilizadas redes com 61^3 pontos, enquanto nas esferas foi utilizado 121^3 . Por simplicidade, utilizamos apenas a constante elástica $L_1 = 40$ pN, representando isotropia elástica e é uma forma muito utilizada na literatura para simulações com o modelo de Landau-de Gennes. O espaço entre cada ponto de rede é $dx = 10$ nm. As energias de ancoramento utilizadas foram sempre $W = 10^{-2}$ J/m² e a viscosidade $\mu = 0.3$ Pa·m. Todos os casos estudados aqui foram simulados 20 vezes, cada

um partindo de um estado aleatório diferente (mudando as *seeds*). Esses estados aleatórios (*seeds*) foram os mesmos em todas as simulações de uma dada geometria. Por exemplo, a amostra 1 de todos os slabs (e *bulk*) teve a mesma condição inicial, assim como a amostra 2 até a 20. Como o tempo de relaxação depende de parâmetros como quiralidade, tipo de ancoramento e geometria, deixamos as amostras relaxar por um longo tempo. Ao final, pegamos o tempo em que o processo terminou para cada amostra e normalizamos os valores entre 0 e 1 para que diferentes amostras possam ser comparadas. Os dados apresentados nas figuras correspondem à média realizada das 20 amostras representando cada caso. No caso das geometrias planas, o valor do número de voltas relaciona-se com o passo por meio da equação $N = 2d/P$, onde d é a espessura da amostra na direção z . Para as esferas, $N = 4R/P$, onde R é o raio da gota. Os valores de C e H foram calculados com o método k -NN PE utilizando-se os valores do parâmetro de ordem (atualizado em cada iteração no modelo de Landau-de Gennes) em cada ponto da rede. Entre o tempo inicial da simulação e o tempo final, foram impressos 50 *snapshots* de forma logarítmica, ou seja, foram colhidos mais dados nos instantes iniciais, onde o número de defeitos é mais alto, e menos dados nos instantes finais, quando a amostra está próxima de atingir o estado final.

A estrutura deste capítulo está da seguinte forma: Inicia-se estabelecendo uma linha de base com a análise da dinâmica de um sistema sem paredes confinantes em *bulk* (Seção 5.2). A partir dessa referência, investiga-se o primeiro nível de perturbação introduzido pelo confinamento em placas paralelas (*slabs*) na Seção 5.3. Em seguida, na Seção 5.4, contrastaremos esses resultados com a dinâmica observada na geometria esférica, destacando os efeitos impostos pelo confinamento curvo. A Seção 5.5 oferece uma análise comparativa e integrada, sintetizando o papel dominante da geometria e os efeitos do ancoramento e da quiralidade. Finalmente, a Seção 5.6 consolida a análise física, estabelecendo a base para a hipótese a ser explorada no Capítulo 6: Se a dinâmica temporal contém informações das condições do sistema, é plausível que possam ser usadas para fins preditivos.

5.2 Dinâmica de Referência: O Sistema em *Bulk* (Não Confinado)

Para entender o impacto do confinamento geométrico e do ancoramento de superfície, é necessário caracterizar a dinâmica de relaxamento intrínseca de um sistema de CL em condições de *bulk*, sem contornos de superfície. Com condições de contorno periódicas em todas as direções, elimina-se a influência das superfícies, representando a transição da desorganização à organização do material.

Conforme ilustrado na Figura 5.1 para o caso aquiral ($N = 0$), o sistema parte de uma rede densa e desordenada de defeitos. Com a evolução do tempo, esses defeitos interagem,

se simplificam e se aniquilam progressivamente, até que o sistema atinja um estado final ordenado e livre de defeitos.

Evolução da Dinâmica dos Defeitos - Geometria em Bulk ($N = 0$)

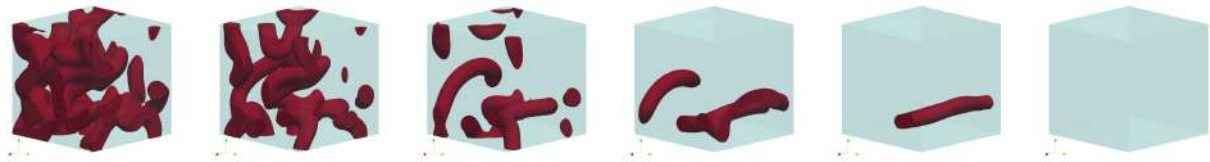


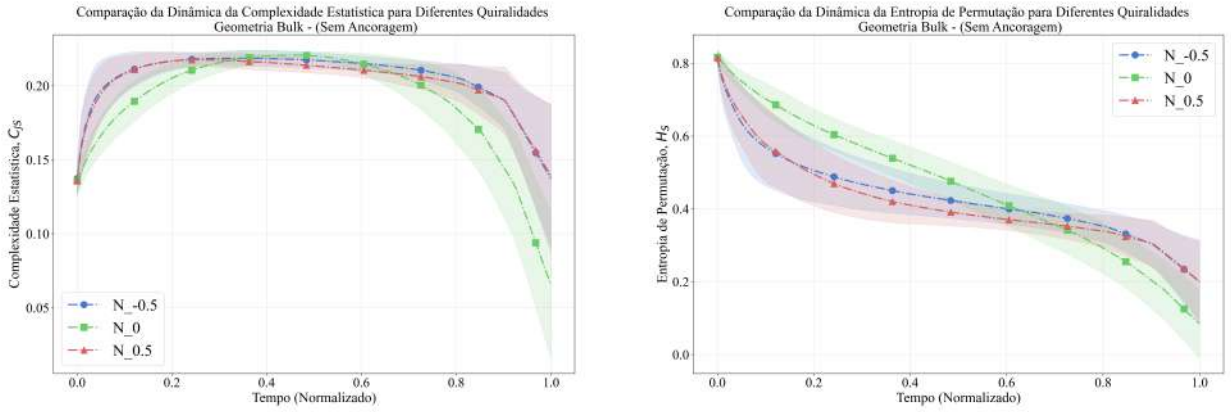
Figura 5.1: Evolução temporal das isosuperfícies de defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria de *bulk*. A sequência mostra a aniquilação progressiva da rede de defeitos, partindo de um estado inicial desordenado (esquerda) até um estado final livre de defeitos (direita). Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Para quantificar a dinâmica visualizada na Figura 5.1, analisamos a evolução da Complexidade Estatística (C) e da Entropia de Permutação (H). Nesta primeira análise, utilizamos apenas o caso nemático ($N = 0$) e duas amostras colestéricas com o mesmo valor de quiralidade, porém com sentidos de rotação contrários, cada uma com $|N| = 0.5$ rotações. Na Figura 5.2a, que mostra a C vs. o tempo (normalizado), a C segue uma trajetória em arco parabólico para todas as quiralidades. Inicia com baixa complexidade no estado aleatório, aumenta durante a auto-organização, atingindo um máximo intermediário, e depois relaxa para alta ordem e baixa complexidade, com a C tendendo a zero.

De forma complementar, H mostrada na Figura 5.2b exibe um decaimento monotônico ao longo do tempo. Partindo de um valor elevado que reflete a alta aleatoriedade da configuração inicial, H diminui progressivamente conforme o sistema se ordena e sua dinâmica se torna mais previsível, também tendendo a um valor próximo de zero no estado de equilíbrio, indicando a formação de um domínio único e homogêneo.

A relação entre ordem e estrutura é sintetizada no plano Complexidade-Entropia (C - H), apresentado na Figura 5.3. A trajetória do sistema em *bulk* é um arco parabólico que atravessa o plano da direita para a esquerda. Partindo do canto inferior direito (alta H , baixa C), representativo da desordem máxima, o sistema evolui, atingindo a região de máxima complexidade, antes de convergir para o canto inferior esquerdo (baixa H , baixa C), o ponto que caracteriza a ordem perfeita. Esta trajetória descreve o comportamento dinâmico característico do relaxamento do CL. É notável como a quiralidade afeta os formatos das curvas de C e H , resultando em diferença de trajetória perceptível no plano C - H , inclusive em relação aos dois casos quirais. Nestes casos, embora os processos pareçam imperceptíveis quando apenas o sentido de rotação é mudado, existe diferença na dinâmica, que pode ser visualizada nas curvas de C e H .

O comportamento observado nas métricas de informação é diretamente corroborado pe-



(a) Dinâmica da Complexidade Estatística (C). (b) Dinâmica da Entropia de Permutação (H).

Figura 5.2: Evolução temporal das métricas da teoria da informação para o sistema em geometria de *bulk* com diferentes quiralidades. (a) C descreve um arco característico, atingindo um pico de complexidade estrutural antes de decair para zero. (b) H decai monotonicamente, refletindo o contínuo processo de ordenamento do sistema. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

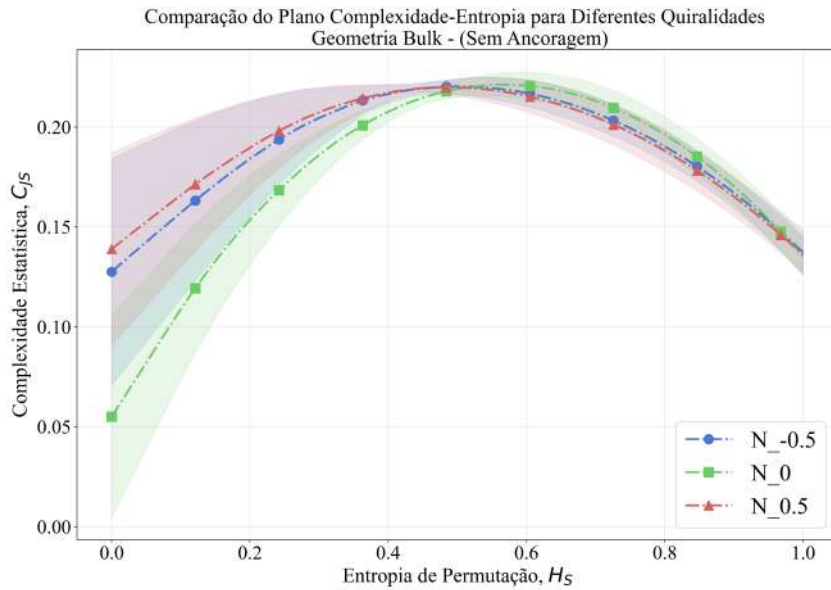


Figura 5.3: Trajetórias no plano CE-H para o sistema em geometria de *bulk*. A curva parabólica universal demonstra o caminho arquetípico do sistema, partindo da desordem (direita), passando por um pico de complexidade estrutural (topo) e convergindo para um estado de ordem perfeita (esquerda). Esta trajetória serve como um indicativo do relaxamento irrestrito. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

los parâmetros do sistema. Como será detalhado e comparado nas seções seguintes (p.ex., Figura 5.13 e 5.15), o relaxamento em *bulk* é caracterizado por um aumento suave do Parâmetro de Ordem (S) até seu valor de saturação, e por uma aniquilação de linhas de defeito,

resultando em um decaimento da densidade de defeitos que vai a zero. A ausência de defeitos residuais no estado final é a manifestação física do estado de baixa entropia e baixa complexidade alcançado.

5.3 Dinâmica em Geometria de Placas Paralelas (*Slabs*)

Nesta seção, analisa-se a dinâmica do sistema para a geometria de confinamento do tipo *slab*, considerando os ancoramentos de superfície planar, homeotrópico e híbrido. Tendo estabelecido a dinâmica de relaxamento irrestrito na 5.2, investiga-se agora o confinamento do CL entre duas superfícies planas e paralelas (*slabs*). Este cenário introduz o efeito do ancoramento de superfície e restringe a aniquilação de defeitos, mudando o processo de aniquilação e resultando em uma mudança perceptível em H e C. A análise a seguir focará em quantificar esses desvios em relação à linha de base do sistema em *bulk*.

A figura 5.4 mostra exemplos de evolução dos defeitos para os três tipos de ancoramento utilizados neste trabalho. As linhas vermelhas representam os defeitos que se aniquilam conforme a amostra se ordena. Note que, ao contrário do caso *bulk*, em todos os casos, após um instante, todos os defeitos se encontram próximos ao centro da amostra. Visualmente, nota-se que os defeitos no caso planar tendem a se aniquilar por meio da formação de domínios com diferentes orientações separados por defeitos tipo *parede* que se aniquilam conforme a amostra evolui para uma estrutura homogênea. No caso homeotrópico, nota-se que os primeiros defeitos se formam também por meio da separação entre diferentes domínios. Porém, estes evoluem para anéis de defeitos que vão se fechando até a extinção completa. O caso híbrido tende a formar linhas que se estendem pelo centro da amostra e que eventualmente se rompem e se aniquilam como anéis.

Com relação à configuração final dos diretores nos *slabs*, a figura 5.5 mostra o corte na direção x para os três ancoramentos e três valores diferentes de N . No caso homeotrópico, é importante perceber que todas as quiralidades tendem para o mesmo estado final. Isso acontece porque a hélice colestérica não é compatível com a condição de contorno. Esse fato é bem documentado na literatura, onde o colestérico é frustrado para $0 \leq N \leq 1$. Para o caso planar, a estrutura é homogênea na direção y conforme estabelece o eixo-fácil. O caso $N = 0.5$ apresenta a mesma configuração. Isso porque, nesse caso, a hélice teria que iniciar apontando no eixo y , mas no topo apontando no eixo x , o que é incompatível, e novamente o material torna-se frustrado. Para $N > 0.5$, todos os casos formam uma volta como o caso $N = 1$, novamente para satisfazer as condições de contorno. No caso híbrido para $N = 0$ apresenta uma configuração onde o diretor muda gradualmente de homeotrópico para planar ao longo de z . Para os casos $N = 0.5$ e $N = 1.0$, além do processo do caso $N = 0$, o diretor roda ao longo de z para satisfazer o ancoramento e a quiralidade do sistema.

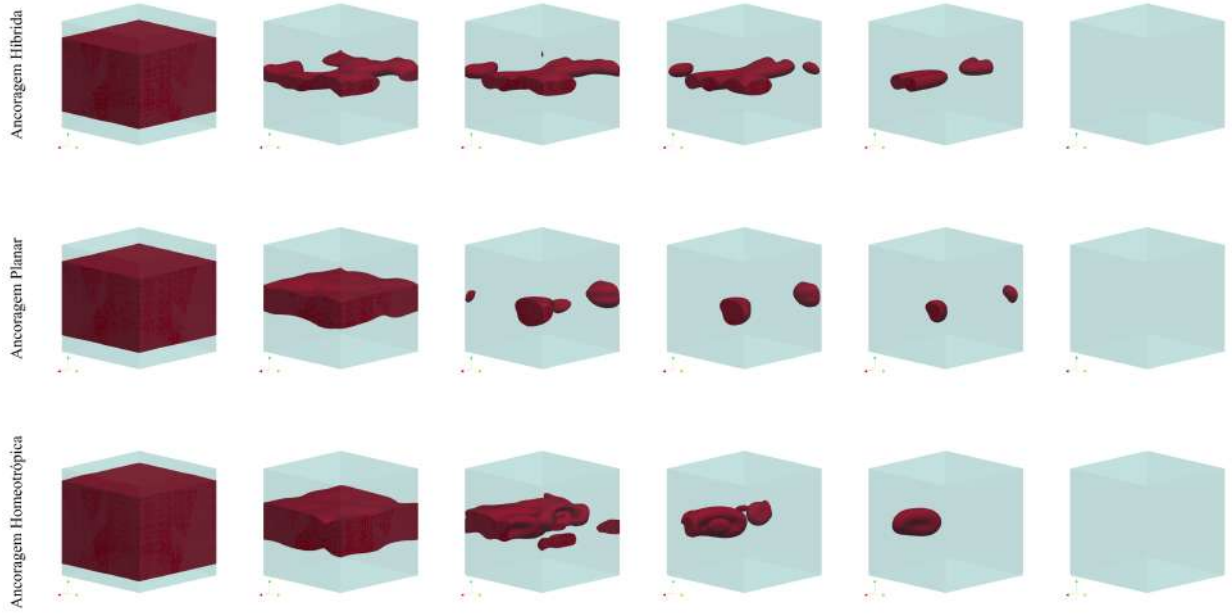


Figura 5.4: Evolução temporal das isosuperfícies de defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria de placas paralelas (*slab*). As linhas ilustram o processo para ancoragem híbrida (superior), planar (meio) e homeotrópica (inferior). Observa-se a aniquilação gradual dos defeitos, culminando em um estado final livre de defeitos, característico desta geometria. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

5.3.1 Dinâmica da Complexidade e da Entropia

As métricas de informação, C e H , mostram uma característica da dinâmica para os sistemas em geometria de *slab*. O comportamento da C ao longo do tempo exibe uma espécie de arco assimétrico, como pode ser visto nos gráficos de comparação por ancoramento (Figura 5.6) e para quiralidades individuais (p.ex. Figura 5.7), exemplificado para o caso homeotrópico. Note que cada geometria apresenta uma característica diferente. O sistema inicia com uma C baixa, correspondendo a um estado inicial altamente desordenado e aleatório. À medida que a simulação progride, a C aumenta, atingindo um pico, antes de decair para um valor final mais baixo. Da Figura 5.6 percebe-se que o valor final da complexidade aumenta com o módulo de N . Isso está relacionado ao fato de que a quiralidade mais alta resulta em padrões mais complexos ao final da simulação, o que é capturado por C . É notório o quanto C muda dependendo de uma pequena mudança na quiralidade da amostra e principalmente no ancoramento. Nota-se que o caso homeotrópico apresenta o máximo da complexidade para tempos mais longos (tornando a curva mais simétrica) do que os casos planares e híbridos.

Para compreender a origem desse comportamento característico e isolar o papel do con-

Estados Finais do Campo Diretor em Geometria Slab

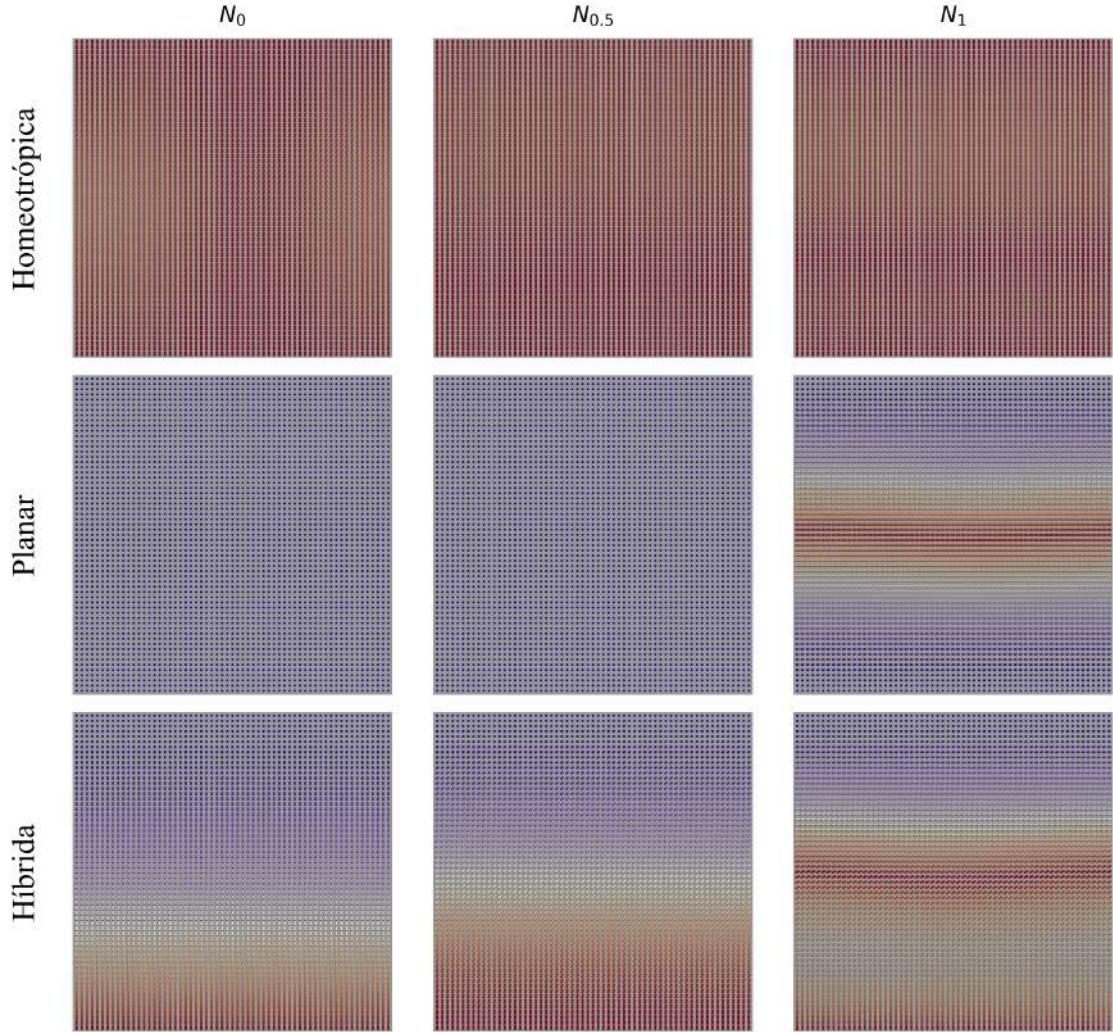


Figura 5.5: Visualização dos estados finais do campo diretor para a geometria de placas paralelas (*slab*). As colunas representam diferentes quiralidades (N_0 , $N_{0.5}$ e N_1), enquanto as linhas correspondem aos ancoramentos homeotrópico, planar e híbrido. As imagens destacam os estados de ordem e ausência de defeitos topológicos alcançados no equilíbrio. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

finamento imposto pelas superfícies, a dinâmica do sistema em *slabs* foi comparada à de um sistema irrestrito, conhecido como *bulk*. Essa abordagem permite usar a dinâmica em *bulk* como uma linha de base para quantificar como o confinamento e o ancoramento de superfície modulam a trajetória de relaxamento do sistema.

A Figura 5.8 revela o impacto direto do confinamento na dinâmica de C. A primeira observação notável é que todas as configurações confinadas (curvas coloridas) apresentam um pico de complexidade que ocorre mais cedo. Isso sugere que a presença das superfícies, ao impor uma ordem inicial nas bordas, acelera o processo de aniquilação dos defeitos. Além disso, o ancoramento de superfície modula essa trajetória: para o caso aquiral ($N = 0$), o

Comparação dos ancoramentos (quiralidades comuns): Complexidade Estatística

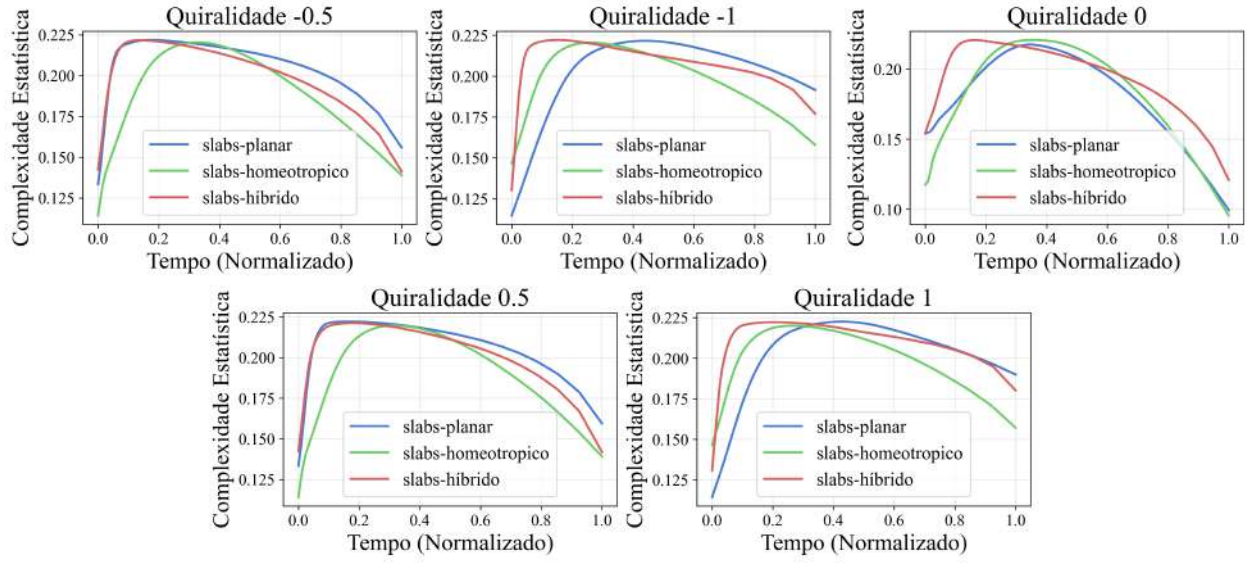


Figura 5.6: Comparação da dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes ancoramentos na geometria de placas paralelas (*slabs*), agrupada por quiralidades comuns. Cada *subplot* mostra a evolução temporal para um valor de quiralidade específico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

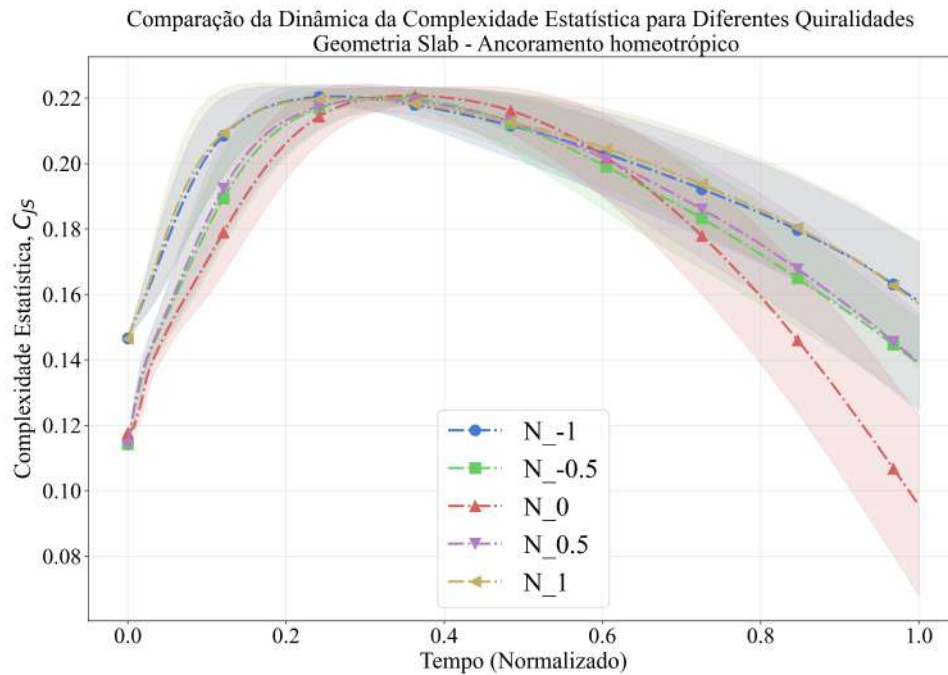


Figura 5.7: Dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes quiralidades em um sistema de placas paralelas (*slab*) com ancoramento homeotrópico. As curvas coloridas representam a média para cada quiralidade, enquanto a linha pontilhada é a média geral. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

ancoramento híbrido é o que mais se aproxima da dinâmica em bulk, enquanto o ancoramento planar exibe o maior desvio, com um decaimento mais lento da complexidade.

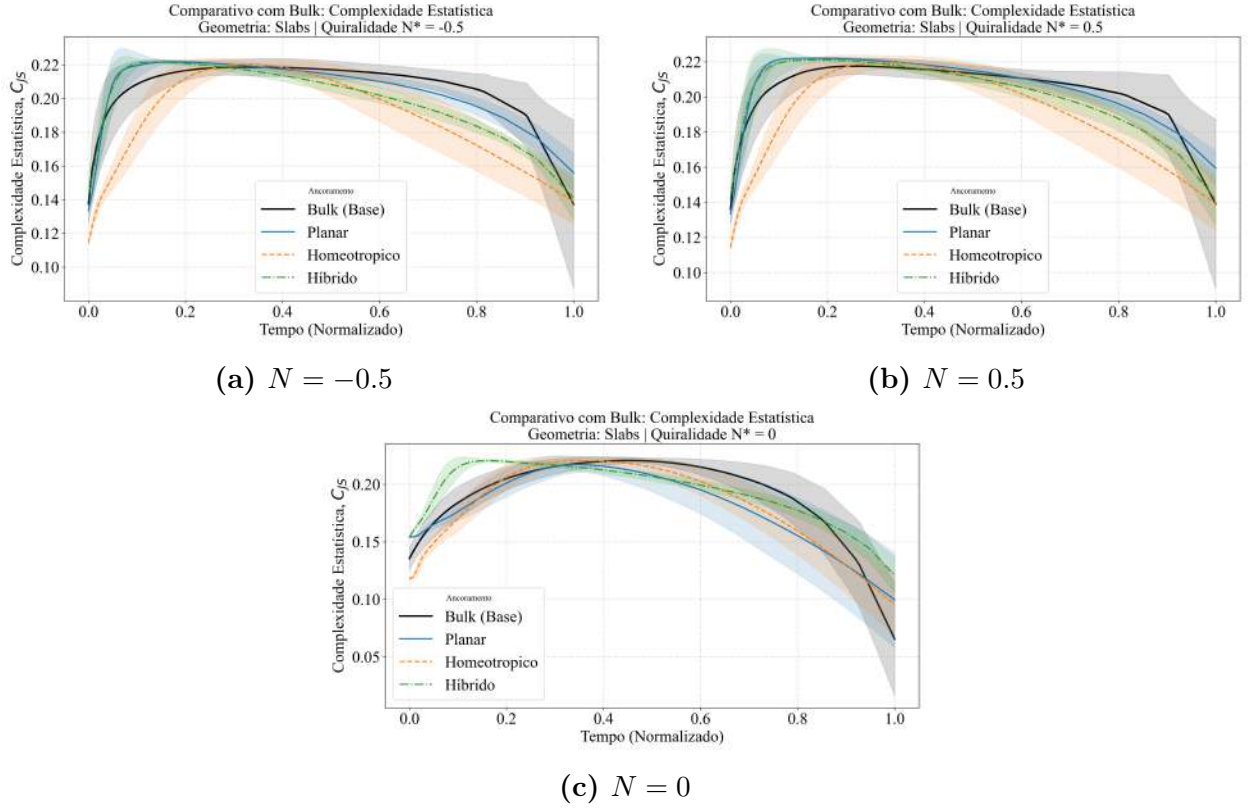


Figura 5.8: Comparação da dinâmica da C em geometria de *slabs* para quiralidades $N_{-0.5}$, N_0 e $N_{0.5}$. A curva preta representa a linha de base do sistema em *bulk*. As curvas coloridas mostram como os diferentes tipos de ancoramento forçam a dinâmica a se desviar da trajetória irrestrita. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

Fisicamente, este arco na C reflete a aniquilação de defeitos e o processo de minimização da energia elástica do sistema. A fase ascendente corresponde à transição de um estado de alta entropia (desordenado) para uma região do espaço de fase caracterizada por múltiplos estados metaestáveis com estruturas correlacionadas (domínios), ou seja, diferentes configurações de orientação das moléculas de CL e a distribuição de defeitos, implicando na elevação da complexidade. Essa região descreve um conjunto de configurações nas quais o sistema pode ficar temporariamente confinado antes de relaxar para um estado de energia mais baixa. Em outras palavras, a fase ascendente representa a auto-organização do sistema, onde as interações locais começam a formar estruturas correlacionadas e domínios com orientações distintas, mas ainda não há uma ordem global. A fase descendente representa o processo de coalescência desses domínios e aniquilação de defeitos, no qual o sistema supera barreiras de energia menores para relaxar em direção a um mínimo de energia mais profundo, estruturalmente mais simples e energeticamente favorável.

O pico da C (conforme a Figura 5.9) marca o ponto de máxima complexidade dos defeitos topológicos — um estado transitório onde o sistema não é nem totalmente aleatório, nem perfeitamente ordenado, mas sim uma mistura de regiões ordenadas separadas por defeitos. A Figura 5.9 detalha o instante em que este pico ocorre para a geometria de *slabs*. Embora o sistema na totalidade possua uma quiralidade intrínseca, esses domínios quirais são, em essência, a expressão localizada e temporária da quiralidade durante certas fases da evolução estrutural do sistema. Este pico, que ocorre entre 20% e 40% do tempo total de simulação para a maioria das configurações em *slabs* (Figura 5.9), representa o momento em que a competição entre a energia elástica, que favorece a ordem, e a entropia, que favorece a desordem, atinge um ponto de máxima complexidade estrutural, antes que os processos de aniquilação de defeitos comecem a dominar e simplificar o sistema em direção ao equilíbrio. O valor máximo que a C atinge também é uma característica importante da dinâmica, ao quantificar o pico de complexidade estrutural para cada configuração. A Figura 5.9 mostra como esse valor máximo varia em função da quiralidade para os diferentes tipos de ancoramento.

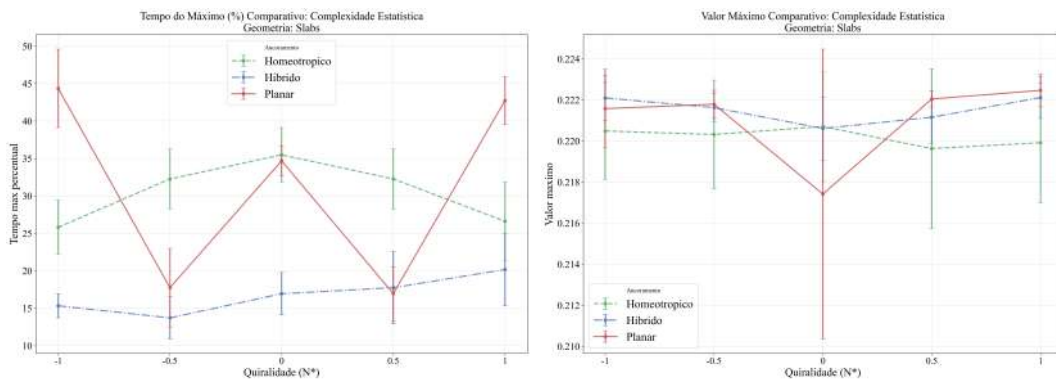


Figura 5.9: Lado esquerdo: Tempo percentual em que a Complexidade Estatística atinge seu valor máximo, em função da quiralidade, para a geometria de *slabs* com ancoramento planar, homeotrópico e híbrido. Lado direito: Valor máximo da Complexidade Estatística em função da quiralidade para diferentes ancoramentos correspondentes à geometria de *slab*. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A Entropia de Permutação, por sua vez, atua como um indicador do processo de ordenamento. Em todas as configurações de *slab* (p.ex. Figura 5.10), H exibe um decaimento monotônico ao longo do tempo. Note que a entropia apresenta um decaimento que pode ser dividido em duas partes: até cerca de $t \approx 0.4$, a curva decresce de forma não-linear, formando uma espécie de arco cujo valor mínimo corresponde ao tempo de máxima complexidade. A partir de $t \approx 0.4$, o decaimento é linear e a taxa de decaimento representa a velocidade de aniquilação dos defeitos. Partindo de um valor inicial alto, que reflete a aleatoriedade da configuração inicial, H diminui à medida que as moléculas se alinham. A curva eventualmente atinge um valor mínimo, indicando que o sistema alcançou um estado de equilíbrio com um alto grau de ordem.

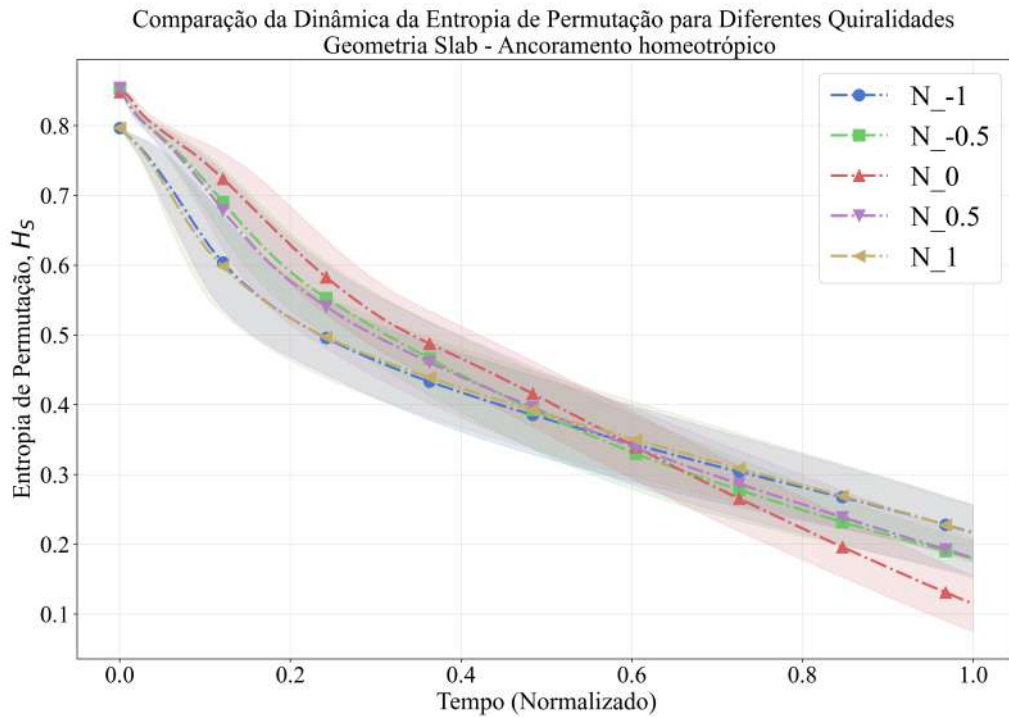


Figura 5.10: Dinâmica da Entropia de Permutação para diferentes quiralidades em um sistema de placas paralelas (*slab*) com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A análise dos valores da Entropia de Permutação revela que existe um valor máximo intrínseco (Figura 5.11), que ocorre em tempos iniciais da simulação e que decai à medida que o sistema evolui. Para esta medida, tiramos o valor inicial, que, como dito anteriormente, é o mesmo para todas as quiralidades, e esperamos o primeiro estado de relaxação, ou seja, quando as propriedades físicas do material começam a dominar. Este valor, mostrado na Figura 5.11, representa então o máximo valor de H instantes após a ordem começar. Nota-se que para os casos planares e híbridos, esse valor é maior quando mais alto for o valor de $|N|$, enquanto para o caso homeotrópico, valores maiores de $|N|$ apresentam menor valor máximo de entropia.

A análise do Plano C-H (Figura 5.12) combina essas duas perspectivas, permitindo observar suas trajetórias dinâmicas conjuntas. Para a geometria de *slab*, a trajetória do sistema no plano *C-H* é um arco parabólico bem definido. O sistema inicia no canto inferior direito do plano (alto H , baixa C), correspondendo a um estado de desordem máxima. Com o tempo, ele se move para cima e para a esquerda. Com a evolução temporal, o sistema desloca-se para a região superior esquerda do plano, percorrendo a trajetória de aumento de complexidade enquanto a entropia diminui, em direção ao pico de máxima complexidade. Após atingir o pico de complexidade, a trajetória continua para a esquerda e para baixo, em direção ao canto inferior esquerdo (baixo H , baixa C), que é a região de sistemas ordenados

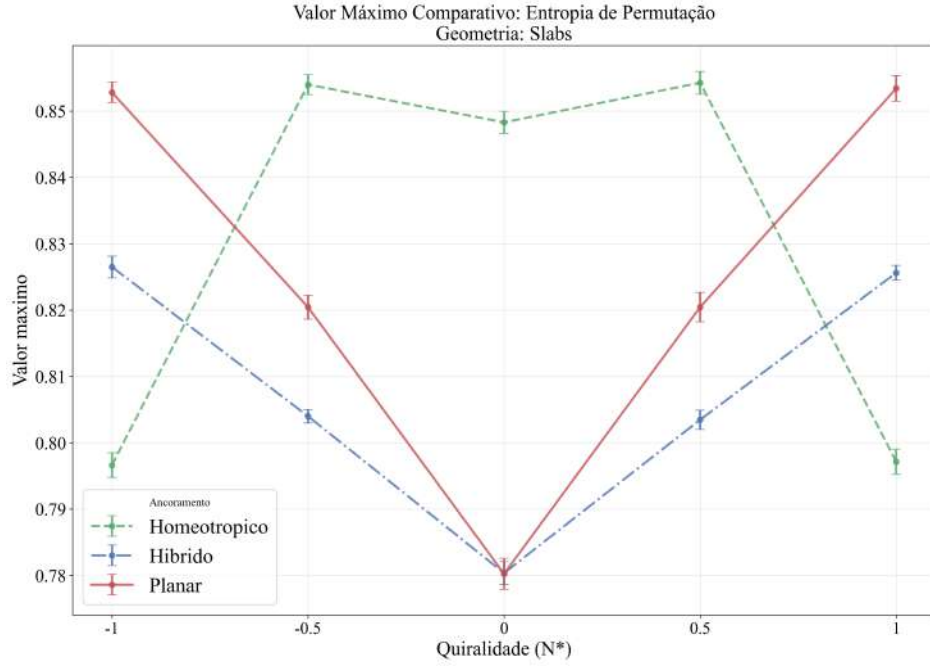


Figura 5.11: Comparativo do valor máximo da entropia de permutação em função da quiralidade (N^*) para as geometrias de placas paralelas (*Slabs*). As curvas representam os diferentes tipos de ancoramento: planar (vermelho), homeotrópico (azul) e híbrido (verde). Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

e previsíveis.

Embora as representações visuais para cada configuração sejam distintas, a percepção geral é que a quiralidade e o ancoramento ditam a forma dessas trajetórias no plano Complexidade-Entropia. Por exemplo, algumas configurações podem apresentar um *arco* mais amplo, indicando uma maior flutuação entre estados ordenados e desordenados, enquanto outras podem exibir uma trajetória mais concisa, sugerindo uma transição mais direta para um estado de equilíbrio.

5.3.2 Evolução do Parâmetro de Ordem e Aniquilação de Defeitos

As métricas clássicas, como o Parâmetro de Ordem (S) médio na amostra e a Densidade de Linhas de Defeito, corroboram e complementam a visão fornecida pelas métricas de informação. A evolução do Parâmetro de Ordem (S) médio em *slabs* (Figura 5.13) mostra uma subida gradual, partindo de um valor próximo de zero e saturando em um valor alto (tipicamente $S > 0.45$), confirmando a formação de uma fase nemática bem ordenada. O caso $N = 0$ distoa dos demais por demorar mais para alcançar a saturação. Isso porque para as amostras nemáticas, mesmo após todos os defeitos serem extintos, os diretores ainda não estão completamente alinhados, o que leva mais tempo e, por isso, o *inset* na Figura 5.13 mostra o comportamento dessa amostra com tempo normalizado novamente, não com relação ao tempo em que os defeitos terminaram, mas sim com o tempo que leva para todos

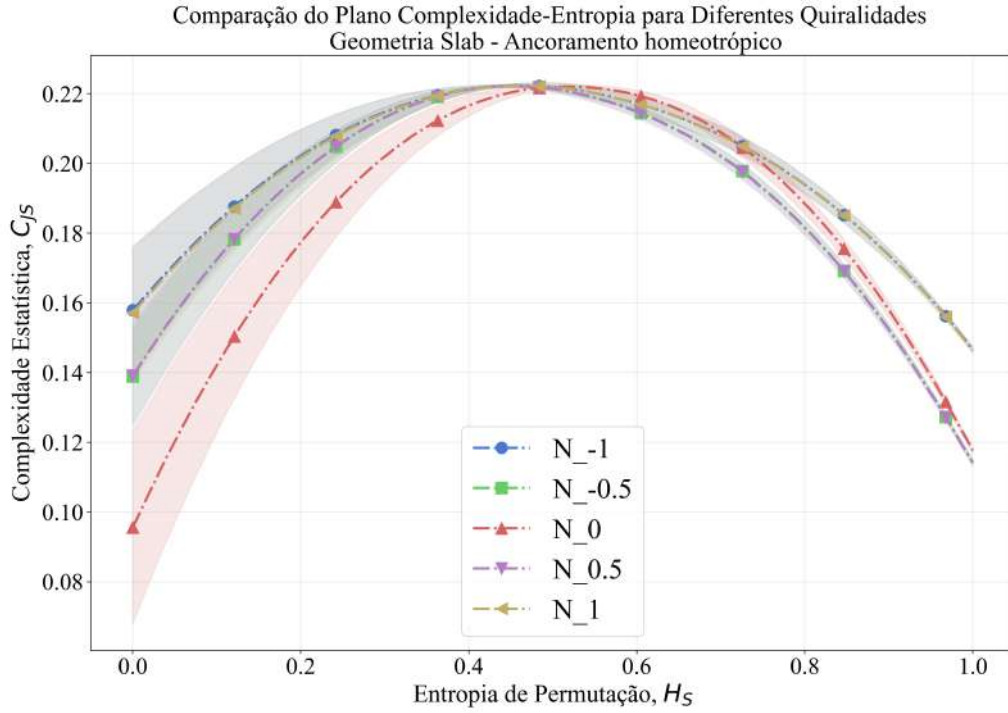


Figura 5.12: Trajetórias no plano Complexidade-Entropia para diferentes quiralidades na geometria de *slab* com ancoramento homeotrópico, mostrando a evolução do sistema da desordem para a ordem por meio de um estado de máxima complexidade. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa

os diretores se alinharem. Note que os valores iniciais são um pouco distintos dependendo da quiralidade. Isso acontece pois no primeiro arquivo impresso na simulação, os casos com quiralidade maior já evoluíram mais do que os com quiralidade baixa, o que pode ser visto na densidade de defeitos que será mostrada adiante. Isto indica que, quanto maior for a quiralidade, mais rápida é a auto-organização inicial. A velocidade de ordenamento e o valor final de S são modulados pela quiralidade e pelo ancoramento, mas a tendência geral de uma transição suave para um estado ordenado é consistente.

A dinâmica da Densidade de Linhas de Defeito (Figura 5.14) é talvez o indicador mais direto do processo de relaxamento. Para calcular a densidade de defeitos, faz-se a soma de todos os valores de S nos pontos da rede cujos valores correspondem a defeitos e divide-se pelo número total de pontos da rede cúbica. As curvas mostram um decaimento acentuado no início da simulação, que depois se torna mais lento, refletindo a aniquilação dos defeitos topológicos. Este processo de aniquilação é ilustrado visualmente na Figura 5.4, que exibe a evolução temporal das isosuperfícies representando os defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$). A taxa de decaimento ou aniquilação inicial dos defeitos (Figura 5.15), extraída do coeficiente angular de ajuste linear da descida inicial da curva da dinâmica da densidade de linhas de defeitos, revela uma forte dependência da quiralidade. Notavelmente, a aniquilação de

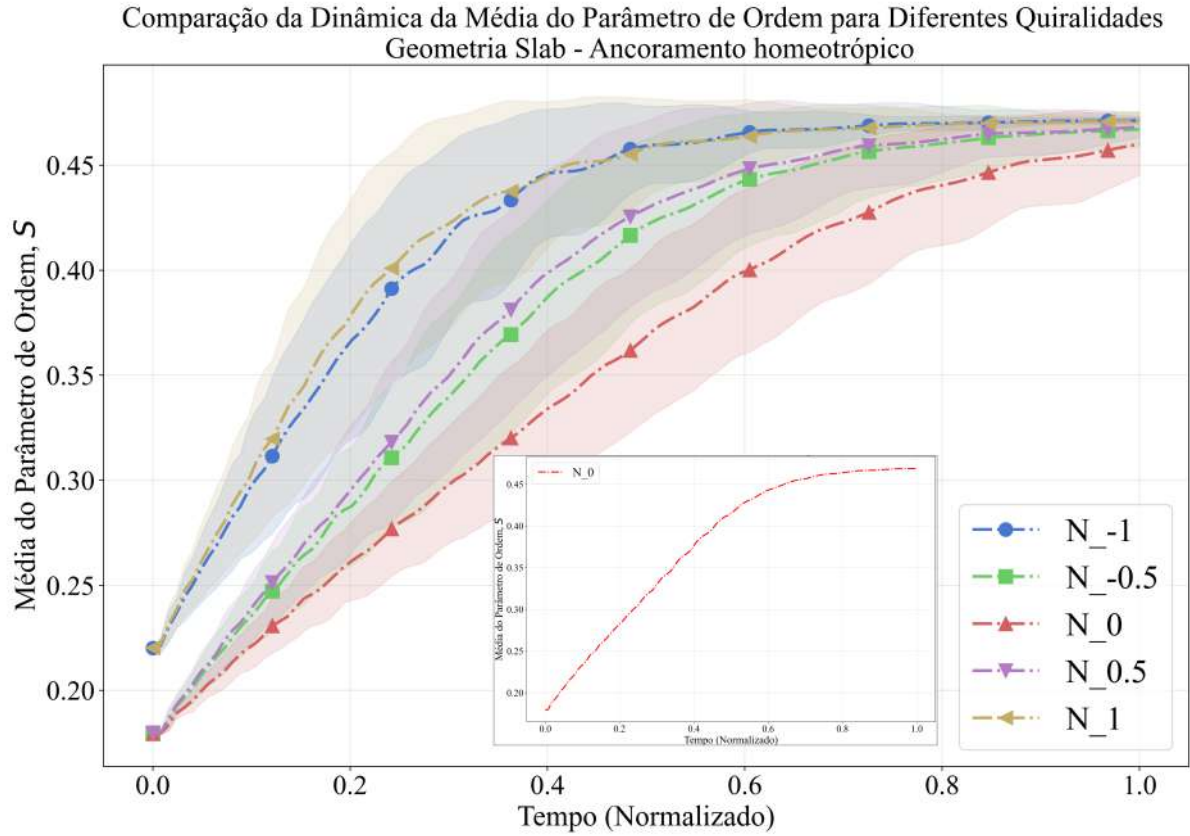


Figura 5.13: Comparação da dinâmica do parâmetro de ordem médio (S) para diferentes quiralidades (N) em geometria *slab* com ancoramento homeotrópico. O gráfico principal exibe a evolução temporal (normalizada) pelo tempo de aniquilação dos defeitos topológicos. O *inset* detalha a evolução completa para o caso nemático (N_0), onde o tempo é normalizado por um tempo final maior, mostrando a contínua organização do sistema mesmo após a aniquilação dos defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

defeitos é dependente da quiralidade e do tipo de ancoramento. Para os casos homeotrópicos e híbridos, a taxa de decaimento é menor para quiralidades maiores, enquanto para o caso planar ela oscila com o valor da quiralidade no intervalo estudado.

Especificamente, para quiralidades intermediárias, a torção intrínseca pode promover a formação de redes de disclinação helicoidais que são topologicamente mais estáveis do que os defeitos pontuais ou lineares simples observados em sistemas aquirais ($N = 0$) ou de alta quiralidade. Essas estruturas complexas possuem uma barreira de energia de aniquilação mais alta, pois exigem um rearranjo molecular coordenado em uma escala maior para serem desfeitas, o que efetivamente *aprisiona* o sistema em um estado com alta densidade de defeitos por mais tempo, explicando a menor taxa de decaimento observada na Figura 5.15 (gráfico à esquerda). Em outras palavras, a torção quiral compete com a energia elástica de tal forma que cria emaranhados topológicos que são mais difíceis de serem desfeitos, retardando

o relaxamento do sistema.

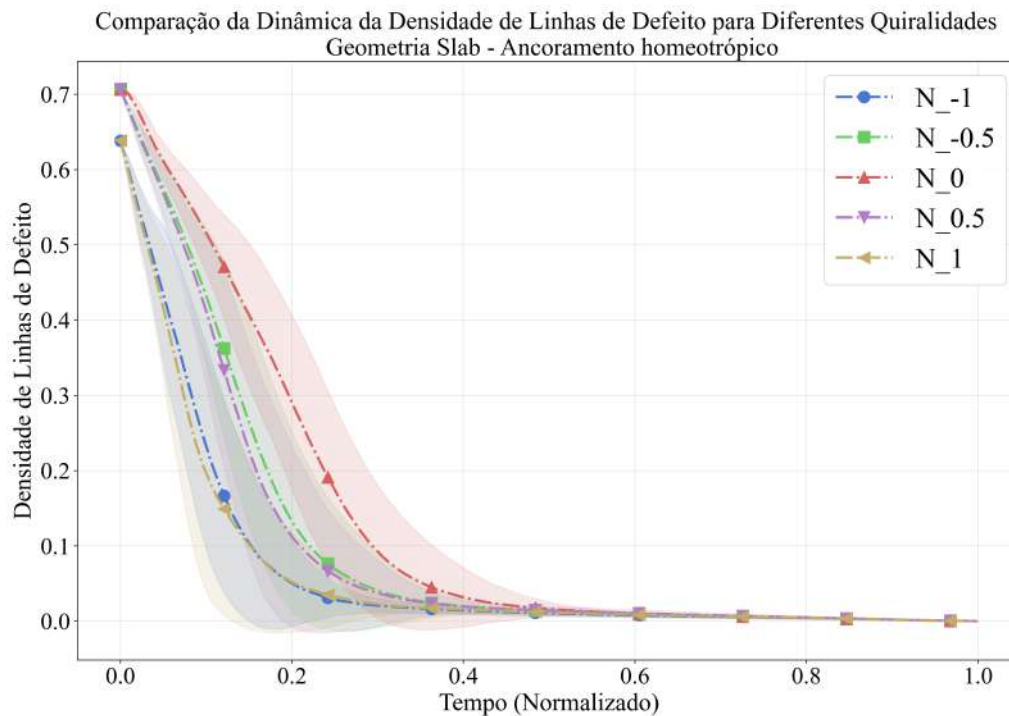


Figura 5.14: Dinâmica da Densidade de Linhas de Defeito para diferentes quiralidades na geometria de *slab* com ancoramento homeotrópico. As curvas mostram o processo de aniquilação de defeitos ao longo do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

O processo de relaxamento na geometria de *slab* leva a um estado de equilíbrio ordenado e livre de defeitos. As configurações moleculares resultantes, que dependem da quiralidade e do ancoramento, são apresentadas na Figura 5.5. A figura mostra o campo diretor final para diferentes condições, destacando a uniformidade estrutural que o sistema atinge após a completa aniquilação dos defeitos.

5.4 Análise da Dinâmica em Geometria Esférica (*Spheres*)

Após analisar o processo de relaxação entre placas paralelas, investiga-se agora o regime de máxima restrição abordado: a geometria esférica. O confinamento em uma geometria esférica impõe restrições topológicas severas que alteram a dinâmica de relaxamento do CL, resultando na inevitabilidade de defeitos topológicos no estado de equilíbrio. Isso altera a natureza do relaxamento, que deixa de ser um processo de minimização de energia em direção à ordem perfeita (como no *bulk*) para se tornar um colapso rápido em um estado topologicamente frustrado.

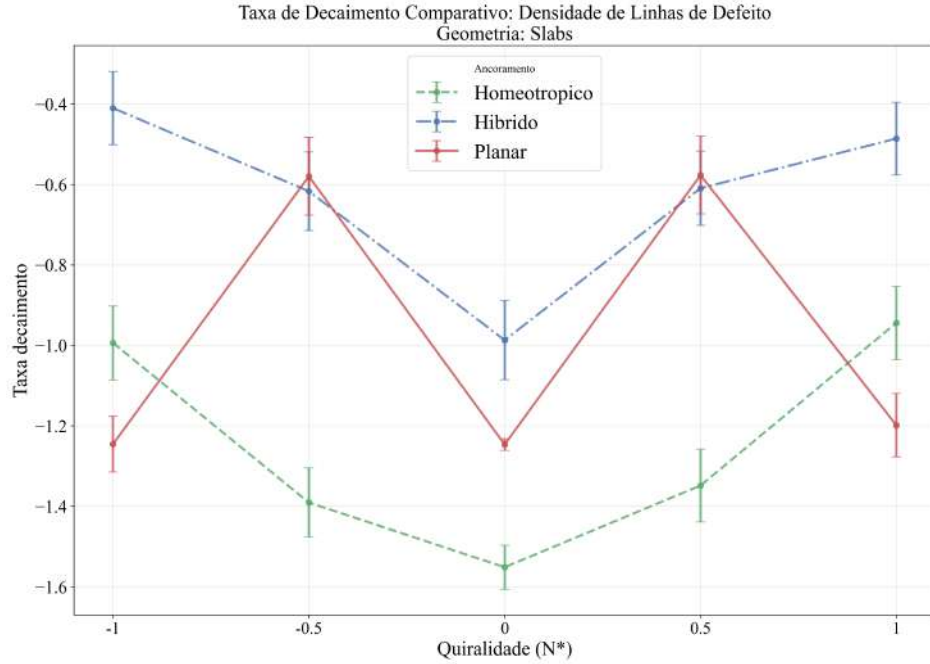


Figura 5.15: Taxa de decaimento dos defeitos em função da quiralidade para geometrias de *slabs*, comparando os ancoramentos Planar, Homeotrópico e Híbrido. No gráfico em questão, valores mais negativos no eixo y indicam uma aniquilação mais rápida. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A Figura 5.16 mostra a evolução temporal dos defeitos nos três tipos de ancoramento em esferas estudados aqui. Note que, no caso planar, os defeitos tendem a se aniquilar nas superfícies, formando linhas de defeito que eventualmente colapsam através da rotação na superfície, formando, ao final, defeitos de carga +1 chamados de *boojums* nos dois polos da esfera. No caso híbrido, é notório como a superfície homeotrópica empurra todos os defeitos para o lado planar, de forma que eles se extinguem da mesma forma que no caso planar. No caso homeotrópico, os defeitos se concentram na região central da amostra, formando anéis entrelaçados que se aniquilam até formar um defeito tipo anel, conhecido como *hedgehog* no centro da esfera. Perceba que todos os casos possuem defeitos ao final do processo. Essa relação é expressa pelo Teorema de Poincaré-Hopf [104], que afirma que a soma das cargas topológicas **na superfície** deve ser igual à característica de Euler da superfície, deve ser +2 quando os defeitos estão na superfície (caso planar), enquanto o teorema de Gauss estabelece que defeitos no volume devem ter carga +1 [104], que é o caso homeotrópico. No caso híbrido, percebe-se haver um *boojum* (carga +1) e um anel ao redor do hemisfério, correspondendo à região onde ambas as formas de ancoramento se encontram. Este anel faz papel de um *hedgehog* expandido, tendo carga +1 na superfície e garantindo que a carga total seja +2.

Com relação aos estados finais, a Figura 5.17 mostra os diretores para um corte ao longo da direção x para os três ancoramentos e com 4 níveis de quiralidade diferentes. Para o caso homeotrópico, assim como na geometria *slab*, a hélice colestérica fica frustrada

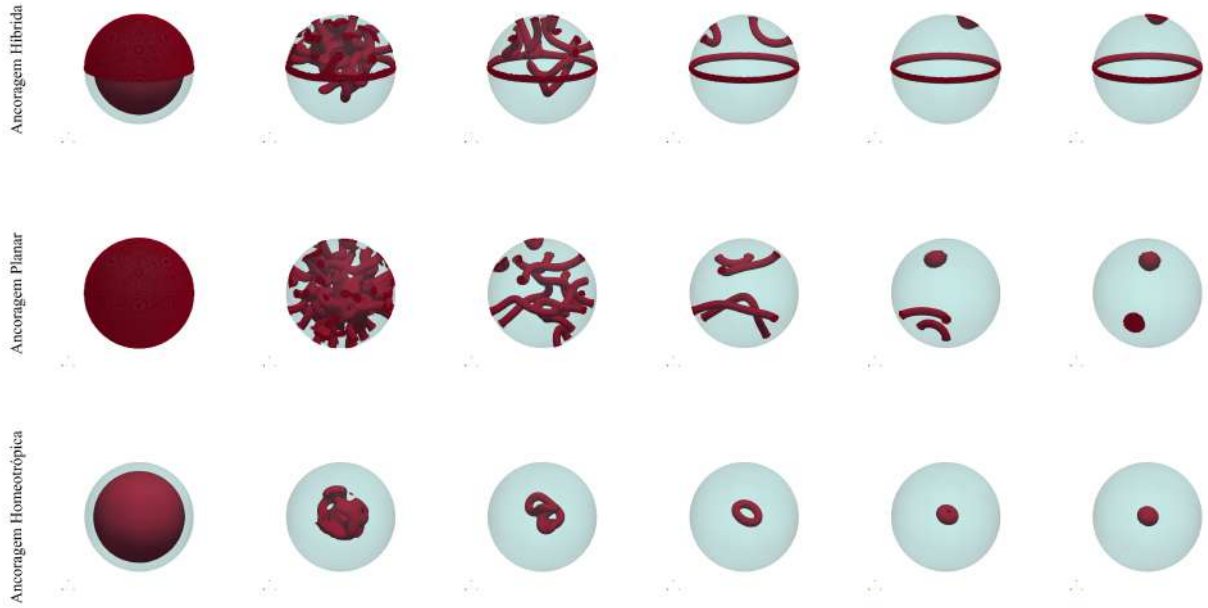


Figura 5.16: Evolução da dinâmica dos defeitos para o caso aquiral ($N^* = 0$) em geometria esférica. As linhas mostram o processo para ancoragem híbrida, planar e homeotrópica. Diferentemente da geometria de *slab*, a dinâmica é caracterizada por um colapso que resulta em defeitos topológicos estáveis no estado final, devido às restrições impostas pela curvatura. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

devido às condições de contorno, de forma que para $N = 0$ até $N = 1$, as estruturas são muito parecidas, apenas a posição do defeito central muda com relação ao centro da gota. No caso $N = 2$ o passo é pequeno o suficiente para haver torções mesmo no caso homeotrópico, resultando na estrutura com um anel equatorial que acomoda a torção natural da hélice. No caso planar, para $N = 0$, forma-se a estrutura bipolar, com dois *boojums* nos polos. Ao aumentar-se o nível de quiralidade, a estrutura polar continua, porém, os diretores efetuam uma torção entre um polo e outro. Essa estrutura é conhecida como bipolar torcida. Uma discussão sobre essas organizações pode ser encontrada na referência [105]. No caso híbrido, percebe-se que a torção colestérica encontra-se apenas no lado planar, com o lado homeotrópico sempre igual e os diretores realizando uma torção de um lado ao outro no hemisfério norte da gota.

5.4.1 Velocidade da Dinâmica

A observação mais marcante na geometria esférica é a velocidade da dinâmica. Em contraste com as *slabs*, o sistema em esferas sofre um rápido *colapso* para um estado de mínima energia. Isso é demonstrado pela evolução do Parâmetro de Ordem (Figura 5.18),

Estados Finais do Campo Diretor em Geometria Esférica

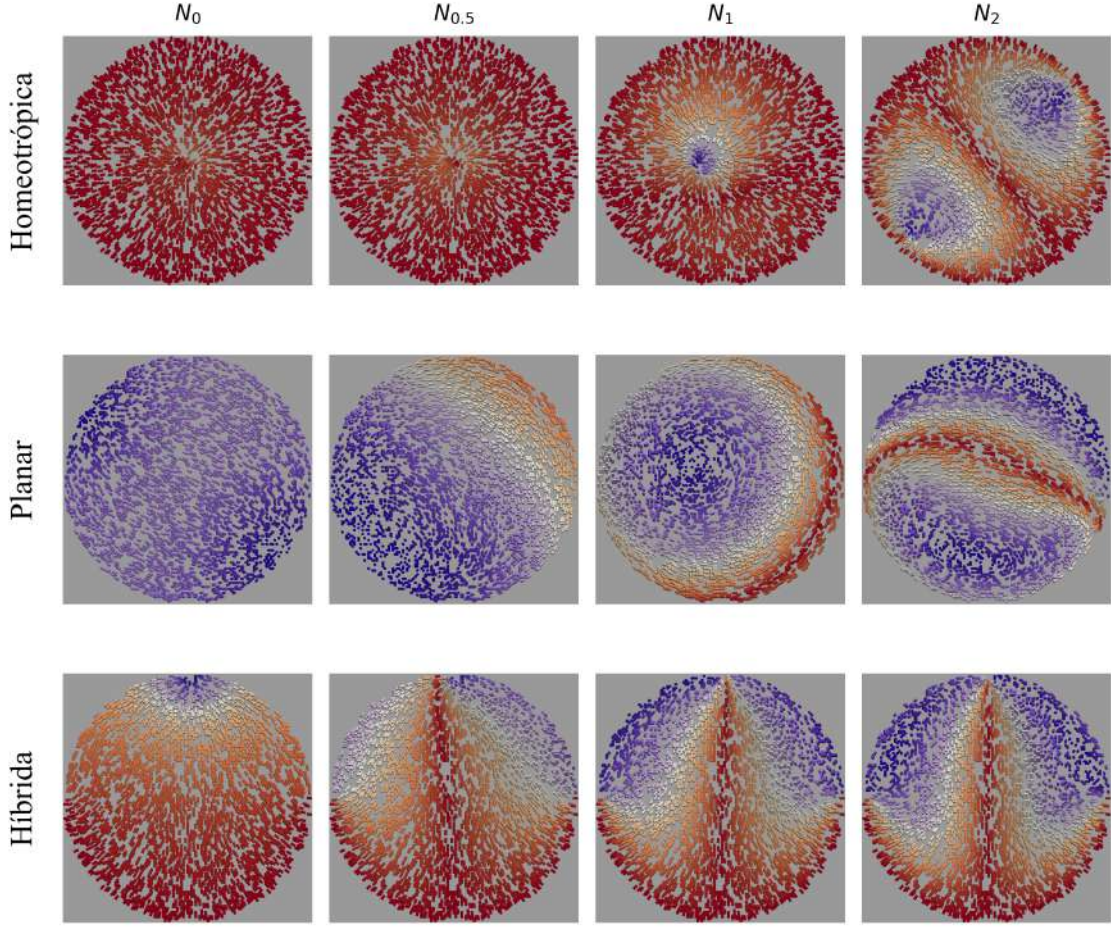


Figura 5.17: Configurações do campo diretor nos estados finais para a geometria esférica. As diferentes combinações de ancoramento (linhas) e quiralidade (colunas) resultam em estruturas complexas. As imagens ilustram a formação de estruturas ordenadas, mas inevitavelmente defeituosas, como o defeito ouriço (homeotrópico, N_0) e outras configurações quirais. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

que atinge um valor próximo à saturação quase que instantaneamente (em menos de 5% do tempo de simulação), restando poucos defeitos que se aniquilam lentamente após esse tempo inicial. Essa escala de tempo representa uma aceleração de uma ordem de magnitude em comparação com a dinâmica em *slabs*, onde o parâmetro de ordem leva entre 40% e 60% do tempo total para atingir um valor similar, Figura 5.13 (lado esquerdo). Da mesma forma, a densidade de defeitos, Figura 5.13 (lado direito), colapsa para seu valor residual em uma fração do tempo necessário em *slabs* (Figura 5.14). Essa diferença mostra que a dinâmica não é governada por um processo gradual de aniquilação, mas sim por um processo rápido, relacionado à geometria e ao total encapsulamento da amostra. É importante notar que no caso das esferas existem defeitos estáveis, ou seja, todas as configurações possuem defeitos

necessários para acomodar estados ordenados em geometria curva.

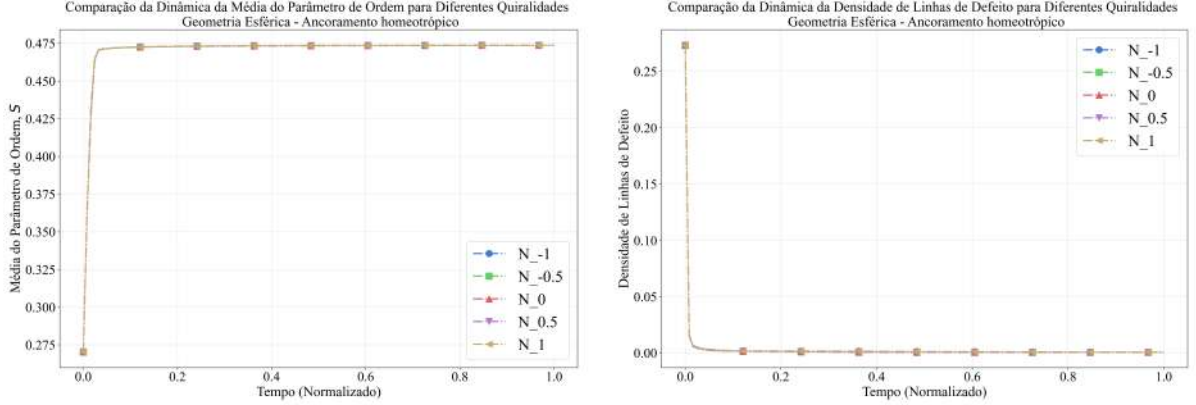


Figura 5.18: Lado esquerdo: Dinâmica da Média do Parâmetro de Ordem para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico, ilustrando o rápido aumento para um estado ordenado. Lado direito: Dinâmica da Densidade de Linhas de Defeito para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico, mostrando o *colapso* quase instantâneo da densidade de defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A dinâmica de relaxamento em geometria esférica apresenta um comportamento distinto daquele observado em sistemas planos. As métricas de informação confirmam esta particularidade. A C , Figura 5.19, exibe um pico agudo e muito precoce. Para a maioria das configurações, o pico ocorre quase que instantaneamente, em menos de 5% do tempo total da simulação, seguido por uma estabilização em um valor intermediário, significativamente maior que o valor final nas *slabs*.

De forma análoga, a Entropia de Permutação (Figura 5.20) também decai rapidamente, mas se estabiliza em um patamar muito mais elevado. Este valor final de H quantifica a desordem residual no sistema — uma aleatoriedade que permanece mesmo após a estabilização, devido aos defeitos estáveis mencionados anteriormente.

Para confirmar esta interpretação e visualizar o impacto da frustração topológica, a dinâmica do sistema esférico foi contrastada com a trajetória de relaxamento de um sistema irrestrito (*bulk*). A Figura 5.21 mostra que, diferentemente do arco suave e gradual observado no sistema em *bulk* (curva preta), a Complexidade Estatística nas esferas (curvas coloridas) exibe o pico agudo e precoce, como já mencionado, ocorrendo nos primeiros instantes da simulação. Imediatamente após, a C não decai a um estado de ordem simples, mas estabiliza-se em um platô com um valor final elevado. Este valor de complexidade residual é a quantificação direta da frustração topológica: o sistema fica permanentemente "congelado" em uma configuração que, embora localmente ordenada, é globalmente complexa devido à presença inescapável de defeitos topológicos.

O estado final em esferas é, portanto, inerentemente mais complexo do que em *slabs*. O valor final da H (Figura 5.22a) e de C (Figura 5.22b) varia com a quiralidade e o ancora-

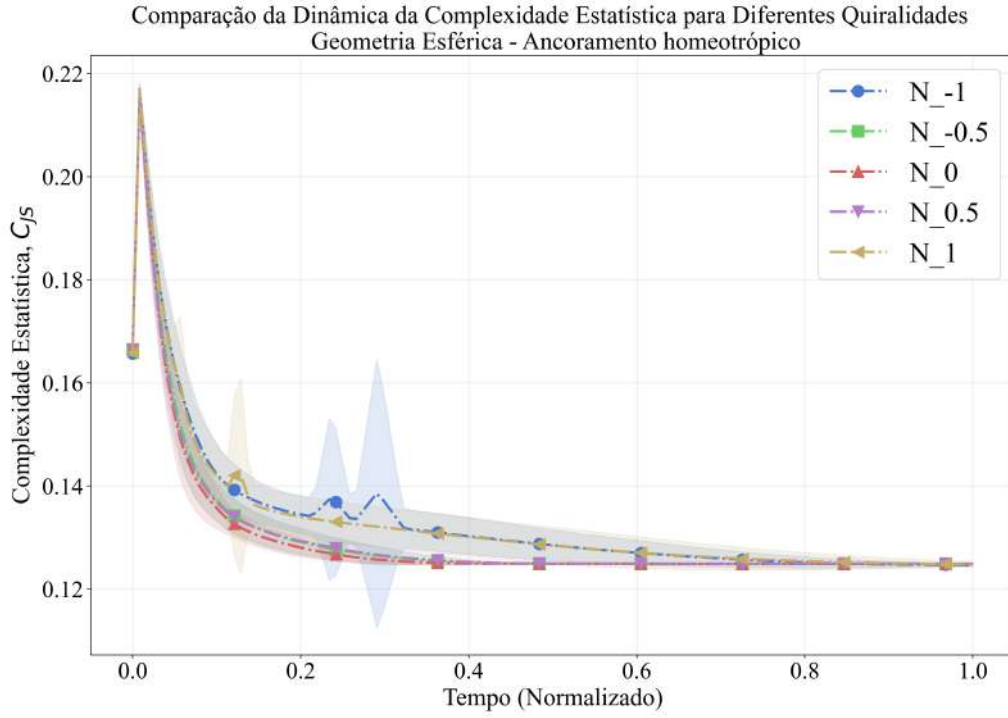


Figura 5.19: Dinâmica da Complexidade Estatística para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

mento, refletindo os diferentes tipos de estruturas de defeitos remanescentes. A trajetória no Plano C-H para as esferas é a imagem dessa dinâmica (Figura 5.23). O sistema transiciona rapidamente de um estado desordenado para um ponto fixo no meio do plano (H e C intermediárias). Esta visualização captura o aprisionamento topológico, mostrando um sistema que nunca alcança o estado de baixa complexidade e baixa entropia característico de um sistema completamente ordenado.

5.5 Análise e Discussão Comparativa

5.5.1 Geometria como Fator Dominante da Dinâmica de Relaxamento

A análise comparativa da dinâmica de relaxamento revela que a geometria de confinamento não é apenas um fator de influência, mas sim o parâmetro de controle dominante que dita o caminho que o sistema pode seguir até o relaxamento. A comparação direta entre as duas geometrias confinadas, como observada na Figura 5.24, já evidencia essa predominância: a trajetória temporal de C para a geometria de *slab* é qualitativamente distinta daquela para a geometria esférica, independentemente de outras condições como quiralidade ou an-

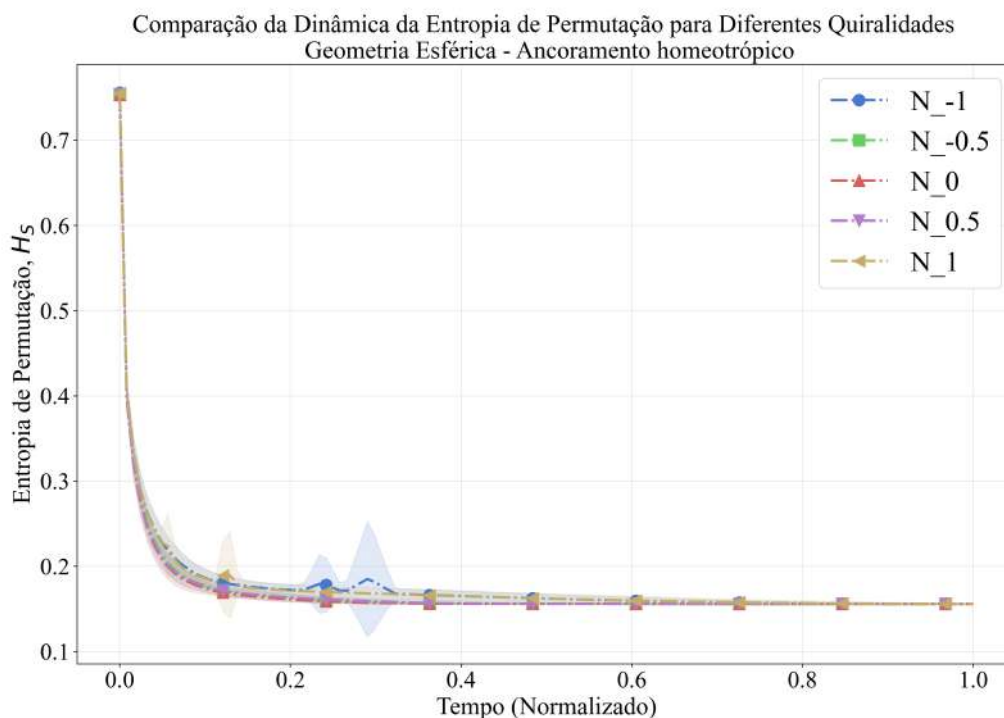


Figura 5.20: Dinâmica da Entropia de Permutação para diferentes quiralidades na geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

coramento. O plano C-H de todos os casos mostra que a dinâmica dos sistemas confinados com a de um sistema irrestrito (*bulk*) é fundamentalmente distinta. Essa análise revela uma hierarquia de três níveis de influência do confinamento. Na geometria em *bulk*, temos o caso ideal, onde a dinâmica é governada pela minimização da energia livre. O sistema evolui para um estado de ordem perfeita — com baixa entropia e baixa complexidade —, gerando no plano C-H um arco parabólico completo e extenso. No caso da geometria planar (*slab*), o confinamento gerado pelas superfícies faz com que o sistema se aproxime da ordem, sem a atingir completamente, mantendo uma complexidade residual baixa. Sua trajetória no plano C-H continua parabólica, mas de forma mais comprimida em relação ao caso *bulk*. Já na geometria esférica, o confinamento curvo impõe maiores restrições topológicas, bloqueando o relaxamento do sistema. Este atinge rapidamente um estado com complexidade residual alta, sem alcançar a ordem perfeita. Sua trajetória no plano C-H, embora ainda retenha uma forma parabólica, é encurtada, representando uma evolução limitada antes de atingir um ponto fixo. Essas diferenças nas trajetórias mostram que o grau de confinamento geométrico afeta diretamente o comportamento dinâmico do sistema — desde um relaxamento completo (*bulk*), passando por um estado perturbado (*slabs*), até um estado com alta frustração (esferas).

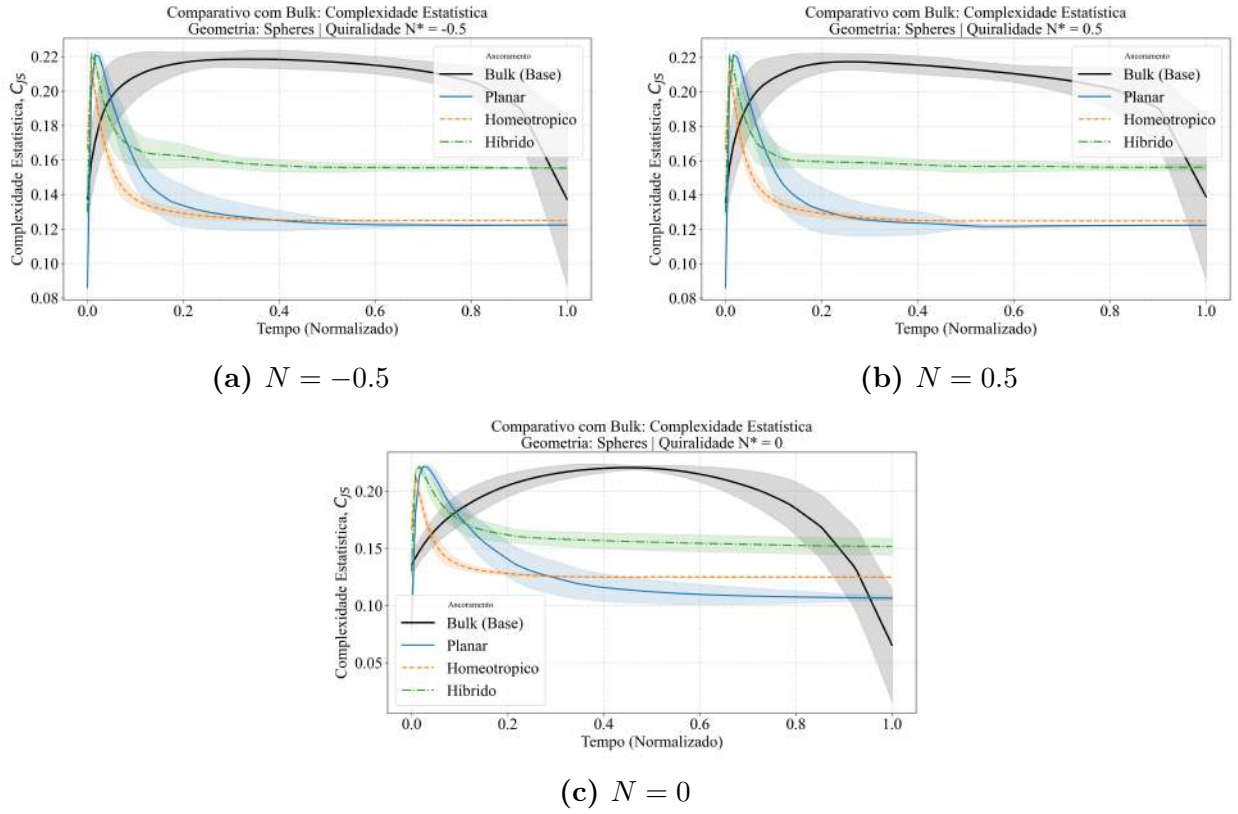


Figura 5.21: Comparação da dinâmica da Complexidade Estatística (C) em geometria esférica para as quiralidades -0,5 (a), 0 (b) e 0,5 (c). A curva preta pontilhada (linha de base do *bulk*) exibe um arco suave, enquanto as curvas de esferas (coloridas) mostram um pico agudo e instantâneo seguido por uma estabilização em um valor de complexidade final significativamente maior que zero. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

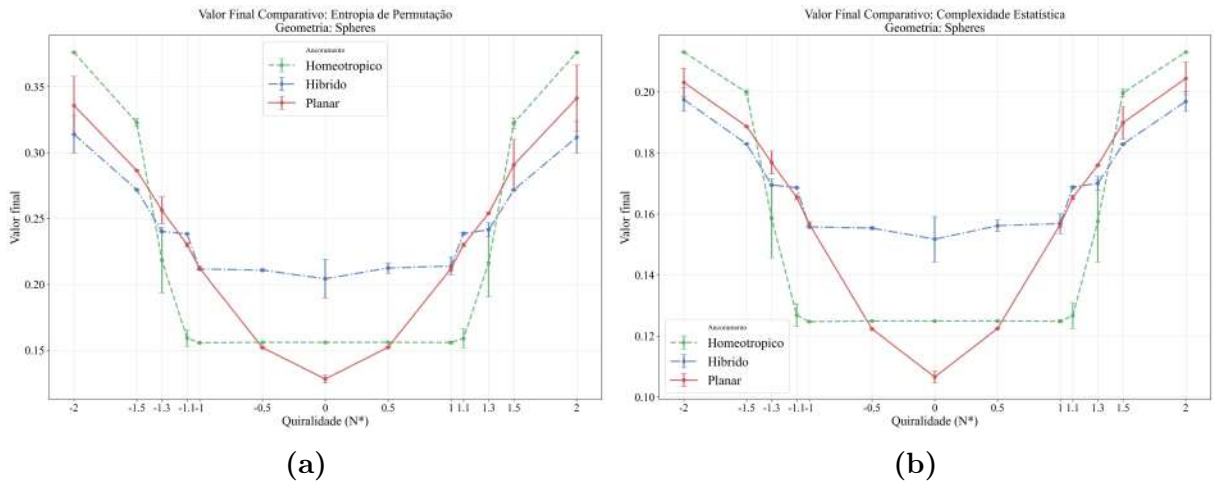


Figura 5.22: Valores finais da Entropia de Permutação (a) e da Complexidade Estatística (b) em função da quiralidade para os ancoramentos homotrópico (verde), híbrido (azul) e planar (vermelho) para a geometria esférica. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

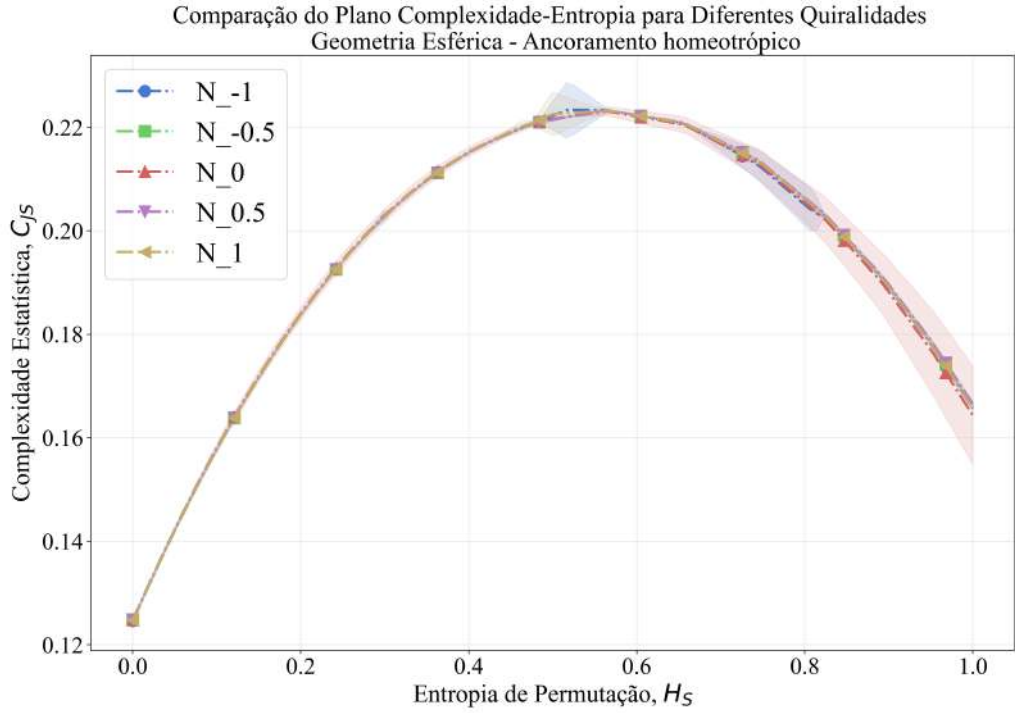


Figura 5.23: Trajetórias no plano Complexidade-Entropia para a geometria esférica com ancoramento homeotrópico. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

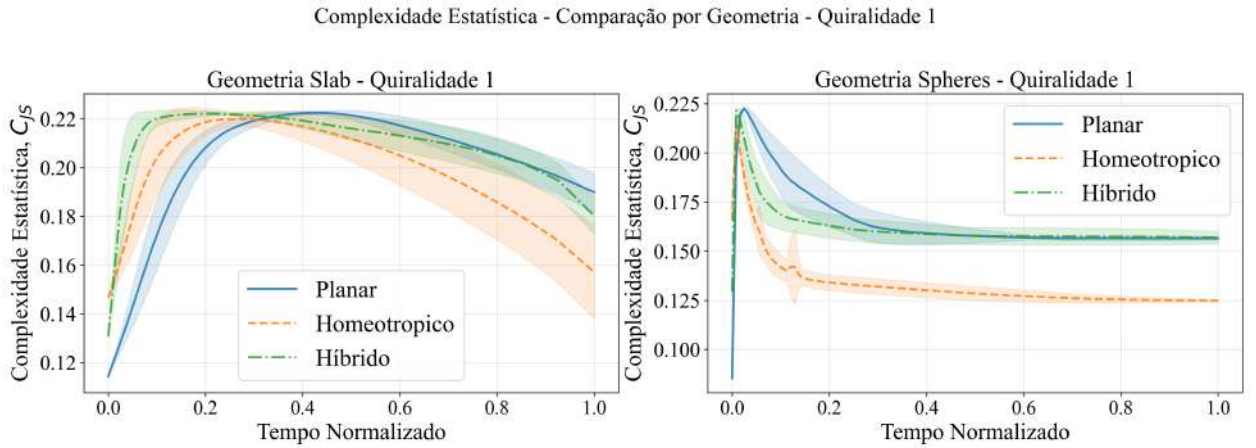


Figura 5.24: Comparação direta da dinâmica da Complexidade Estatística para uma quiralidade fixa ($N^* = 1$) entre a geometria de *slab* (esquerda) e esférica (direita), destacando os diferentes caminhos de relaxamento. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

5.5.2 O Papel da Quiralidade

Se a geometria dita a maneira como o sistema relaxa, a quiralidade (N^*) atua como um parâmetro de controle fino que modula a estrutura e a escala de tempo dessa dinâmica. Aumentar a magnitude da quiralidade introduz uma torção preferencial que interage com

as restrições de ancoramento e geometria. A quiralidade exerce uma influência marcante no tempo em que a C atinge seu valor máximo e também na sua magnitude, como visualizado nos gráficos de tempo para o pico de Complexidade Estatística em função da quiralidade (Figura 5.9) e nos gráficos de Valor Máximo da Complexidade Estatística em Função da Quiralidade para as geometrias *slab* e esférica (Figuras 5.9 e 5.25), quanto maior for a torção, maior o pico de Complexidade Estatística e Entropia de Permutação. Os valores finais de C e H indicam que a quiralidade também influencia o estado de equilíbrio atingido pelo sistema, com algumas quiralidades resultando em valores de H e C finais mais elevados ou mais baixos. Essas variações indicam que a quiralidade não apenas altera a magnitude máxima da complexidade, mas também a sua evolução temporal e o estado final do sistema.

Essa influência se manifesta de maneiras distintas dependendo da geometria. Em *slabs*, a quiralidade controla o tamanho e a forma dos domínios transitórios, influenciando diretamente o pico de complexidade e a taxa de aniquilação de defeitos. Como visto na Figura 5.9, o valor máximo da C em *slabs* mostra uma dependência não-monotônica e complexa com a quiralidade. Muitos gráficos, como o do valor final de H (Figura 5.22a), exibem uma simetria em forma de "V" ou "U" (parábola convexa) em torno de $N^* = 0$, indicando que o estado aquiral ($N^* = 0$) frequentemente representa um mínimo de desordem ou complexidade final, e que a introdução de quiralidade (positiva ou negativa) tende a aumentar a complexidade do estado final.

Em esferas, por sua vez, a quiralidade seleciona qual dos muitos estados de mínima energia será favorecido. Diferentes valores de N^* levam a diferentes configurações de defeitos remanescentes, devido à topologia, o que se reflete nos valores de equilíbrio distintos para a C e H (Figuras 5.22a e 5.22b).

Uma característica que se destaca nos resultados, observada consistentemente, é a clara simetria das métricas de análise (e.g., valores finais de CE/EP , picos de complexidade) em relação ao caso aquiral ($N^* = 0$). Como visualizado em diversas figuras (e.g., Figuras 5.15 e 5.22), os valores para quiralidades opostas (e.g., $N^* = +x$ e $N^* = -x$) são praticamente iguais. Esta simetria é uma consequência direta da física do sistema. O formalismo energético de Landau-de Gennes é enantiomórfico; alterar o sinal do parâmetro de quiralidade de $+N^*$ para $-N^*$ apenas inverte o sentido da torção helicoidal (de destra para canhota), resultando em um sistema que é a imagem especular do outro.

As métricas utilizada nesta dissertação, a Complexidade Estatística (CE) e a Entropia de Permutação (EP), são quantidades escalares. Elas são projetadas para quantificar o *grau* de complexidade estrutural e de desordem, respectivamente, mas são, por definição, insensíveis ao sentido da torção. Visto que os sistemas em $+N^*$ e $-N^*$ são imagens especulares um do outro, eles possuem, por consequência, o mesmo nível de complexidade estrutural e desordem. Portanto, é fisicamente esperado que qualquer métrica escalar que caracterize esses estados seja idêntica: $Metrica(+N^*) \approx Metrica(-N^*)$. Os resultados das simulações confirmam

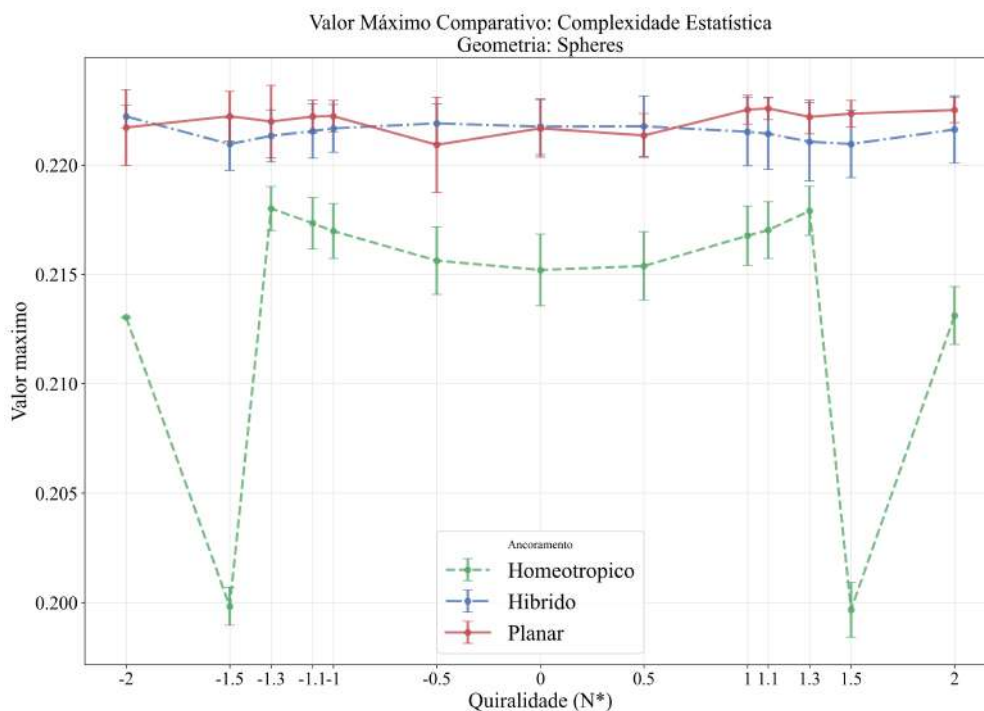


Figura 5.25: Valor máximo da Complexidade Estatística em função da quiralidade para diferentes ancoramentos correspondentes à geometria esférica. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

esta premissa, não sendo observadas diferenças significativas entre quiralidades de mesma magnitude e sentidos opostos.

5.5.3 Ancoramento

O ancoramento de superfície impõe as condições de contorno que guiam a orientação molecular nas interfaces, desempenhando um papel importante. A análise revela dinâmicas distintas, dependendo do tipo de ancoramento empregado.

O Ancoramento Híbrido consistentemente se destaca. Esta configuração, que quebra a simetria por ter ancoramentos antagônicos (planar e homeotrópico), consistentemente se destaca. Ele tende a acelerar a dinâmica inicial, como visto pelo tempo reduzido para atingir o pico de C (Figura 5.9). Isso sugere que a deformação contínua de *splay-bend*, imposta permanentemente pela condição de ancoramento híbrido, atua como um campo externo efetivo, isto é, a maneira como as moléculas interagem com a superfície gera uma espécie de *campo* externo. Este campo quebra a equivalência energética dos estados iniciais, ou seja, as configurações moleculares possíveis no início do processo, modificando o crescimento de domínios ordenados. Em outras palavras, esse campo age para diferenciar esses estados, de forma que alguns se tornem energeticamente mais favoráveis do que outros.

Por outro lado, o Ancoramento Planar e Homeotrópico demonstram uma forte dependência da geometria e da quiralidade. Para valores de quiralidade de $N = 0$ até $N = 1$,

o ancoramento homeotrópico geralmente leva a um estado final ordenado (menor H e C final) devido à frustração da hélice colestérica. O ancoramento planar, por sua vez, tem uma evolução menos abrupta tanto nos *slabs* quanto nas esferas com relação a H e a C , o que pode ser entendido em termos da aniquilação dos defeitos acontecer principalmente nas superfícies.

5.6 Síntese e Discussão Geral dos Resultados da Análise Física

A análise detalhada da dinâmica de relaxamento dos sistemas nemáticos e colestéricos, apresentada neste capítulo, mostra como as condições de controle — geometria, ancoramento e quiralidade — influenciam a evolução temporal do sistema. O uso do plano Complexidade-Entropia (C - H), com métricas físicas como o parâmetro de ordem e a densidade de defeitos, possibilitou uma descrição mais clara dos processos físicos envolvidos.

As trajetórias no plano C - H mostraram ser uma ferramenta eficaz para analisar a dinâmica, distinguindo os regimes de aniquilação de defeitos (caracterizados por alta entropia e baixa complexidade) dos regimes de organização estrutural (alta complexidade). Observou-se que a geometria de confinamento é o fator mais dominante, com sistemas planos (*slabs*) apresentando trajetórias de relaxamento mais diretas e previsíveis, enquanto sistemas esféricos exibem uma dinâmica mais complexa e variada, com trajetórias mais longas e dispersas no plano C - H .

O ancoramento de superfície impõe restrições, direcionando o sistema para estados finais específicos e afetando a velocidade e a natureza do processo de ordenamento. A interação entre ancoramento e quiralidade foi importante, com algumas combinações (como o ancoramento híbrido em sistemas quirais) gerando picos de complexidade mais cedo na simulação, indicando uma organização estrutural mais rápida.

Este capítulo estabeleceu uma base sobre as características físicas, descrevendo como as condições de contorno e propriedades intrínsecas afetam a dinâmica temporal do sistema. Foi mostrado que as séries temporais dos parâmetros analisados contêm informações sobre os processos de relaxamento. Isso fundamenta outra hipótese desse trabalho: se a trajetória dinâmica reflete as condições físicas e o destino do sistema, ela deve conter informação preditiva. O próximo capítulo testará essa hipótese, utilizando técnicas de aprendizado de máquina para verificar se é possível prever as propriedades intrínsecas e o estado de equilíbrio final a partir de um segmento inicial da evolução da Complexidade e da Entropia.

Análise Preditiva da Dinâmica de CLs com Aprendizado de Máquina

6.1 Introdução

O capítulo anterior caracterizou detalhadamente a dinâmica de relaxamento de sistemas nemáticos, mostrando que as séries temporais de parâmetros como Entropia de Permutação (H) e Complexidade Estatística (C) refletem os processos físicos envolvidos. Com a comprovação de que as propriedades do sistema estão presentes em sua evolução temporal, este capítulo aborda uma nova questão preditiva: é possível usar a dinâmica inicial de um sistema para prever suas características intrínsecas e seu estado de equilíbrio final?

Para responder a essa pergunta, este capítulo emprega uma abordagem baseada em aprendizado de máquina e *deep learning*. Utilizando as séries temporais de H e C como principais *features* de entrada, uma variedade de modelos preditivos é treinada e avaliada em múltiplas tarefas de classificação e regressão. Os alvos incluem desde propriedades de controle, como a geometria de confinamento e o ancoramento de superfície, até parâmetros do estado final, como o parâmetro de ordem e a densidade de defeitos.

A análise foi estruturada para construir um entendimento progressivo do poder preditivo da dinâmica. Inicia-se com o estabelecimento de uma linha de base utilizando modelos de aprendizado de máquina clássicos (Seção 6.2), seguida por uma investigação aprofundada com arquiteturas de redes neurais profundas (Seção 6.3). Em seguida, o foco se volta para a própria natureza da informação temporal, investigando-se a quantidade mínima de dados necessária para uma previsão precisa (Seção 6.4) e em que ponto da evolução do sistema a informação mais relevante se manifesta (Seção 6.5). Por fim, uma análise segmentada é conduzida para desvendar como a presença de variáveis dominantes, como a geometria, influencia a capacidade de prever outras propriedades do sistema (Seção 6.6). O objetivo é

não apenas avaliar a viabilidade da previsão, mas também extrair percepções sobre a própria física do sistema a partir do desempenho dos modelos.

É importante notar que os dados da geometria em *bulk* não foram incluídos nas tarefas de classificação, pois representam uma classe distinta à qual os alvos preditivos (geometria confinada e ancoramento de superfície) não se aplicam. No entanto, a dinâmica do sistema em *bulk* serve como uma linha de base conceitual. Uma direção para trabalhos futuros seria usar a trajetória como referência de normalidade para treinar modelos de detecção de anomalias. Esses modelos poderiam, teoricamente, analisar uma série temporal desconhecida, quantificar o grau de desvio em relação ao comportamento ideal, bem como identificar a presença de confinamento. Outro ponto a se destacar é que, como cada classe de simulação (*seed*) atinge o estado de relaxamento em instantes distintos, a normalização dos tempos foi necessária, e para encontrar os parâmetros da série (como ponto de máximo, por exemplo), um processo de interpolação é utilizado. Empregamos uma interpolação com 125 pontos. Esse processo alinha todas as curvas de dados, tornando estatisticamente válido calcular a média, o que não seria possível se os pontos de dados não correspondessem no tempo.

A etapa de análise preditiva descrita neste capítulo foi conduzida por meio de uma abordagem computacional, utilizando a linguagem de programação *Python*. Para a construção dos modelos de linha de base, como *Random Forest* e *K-Nearest Neighbors*, e para o fluxo de pré-processamento, foi utilizada a biblioteca *Scikit-learn*. Na implementação das arquiteturas de aprendizado profundo (*deep learning*), como Redes Neurais Convolucionais (CNNs) e Redes Neurais Recorrentes (LSTMs), empregou-se o *framework* *TensorFlow* com sua interface *Keras*. Ademais, modelos de referência, como o *DummyClassifier* e o *DummyRegressor*, foram avaliados para estabelecer um limiar mínimo de desempenho, garantindo que os modelos propostos apresentassem um poder preditivo superior a uma estimativa aleatória ou baseada na distribuição dos dados. A configuração detalhada dos hiperparâmetros utilizados em cada modelo encontra-se documentada no Apêndice A.

A fim de garantir a capacidade de generalização dos modelos de aprendizado de máquina, tanto para as tarefas de classificação quanto de regressão, foi empregada uma metodologia de validação cruzada *K-Fold* (*K-Fold Cross-Validation*) com $k = 4$. Este procedimento consiste em dividir o conjunto de dados em k subconjuntos mutuamente exclusivos, ou *folds*. Em cada uma das k iterações, um dos *folds* é reservado como conjunto de teste, enquanto os $k - 1$ são utilizados para o treinamento do modelo. Este processo é repetido até que cada *fold* tenha sido utilizado uma vez como conjunto de teste. Para as tarefas de classificação, utilizou-se a abordagem de validação cruzada estratificada (*Stratified K-Fold*). Essa variação assegura que a proporção das classes-alvo seja mantida em cada *fold*, o que é fundamental para evitar vieses em conjuntos de dados potencialmente desbalanceados. Para as tarefas de regressão, foi aplicada a validação cruzada *K-Fold* padrão. Outro passo no pré-processamento dos dados foi a padronização das variáveis de entrada utilizando a técnica *StandardScaler*.

Para prevenir o vazamento de dados (*data leakage*), onde informações do conjunto de teste influenciam o treinamento, o ajuste do *Scaler* (cálculo da média e do desvio padrão) foi realizado exclusivamente sobre os dados de treino de cada iteração da validação cruzada. O *scaler* ajustado foi então utilizado para transformar tanto o conjunto de treino quanto o de teste da respectiva iteração.

Adicionalmente, para garantir a validade científica e a reprodutibilidade dos resultados, um controle sobre a estocasticidade do processo foi implementado. Uma semente de aleatoriedade fixa (*random seed*) foi utilizada globalmente para governar todos os processos não determinísticos, incluindo a divisão dos dados na validação cruzada, a inicialização de pesos nos modelos de aprendizado profundo e os algoritmos de modelos de linha de base como o *Random Forest*.

6.2 Análise de Linha de Base com Modelos de Aprendizado de Máquina Clássico

A etapa inicial da análise consistiu em estabelecer um desempenho de referência (*baseline*) para as tarefas de classificação e regressão. Para isso, foram empregados modelos de aprendizado de máquina simples, especificamente *Random Forest* (RF) e *K-Nearest Neighbors* (*K-NN*), utilizando como preditores as séries temporais de Entropia de Permutação e Complexidade Estatística. A avaliação foi conduzida sob três estratégias de amostragem dos dados temporais: utilizando cada ponto da série individualmente (ponto a ponto), e utilizando janelas deslizantes correspondentes a 5% e 10% da série temporal, com um deslocamento (passo) de 1% e 2% do comprimento da série, respectivamente. O objetivo desta abordagem é avaliar o poder preditivo de informações locais, ou seja, em cada instante da dinâmica da simulação, em comparação com informações que contêm um contexto temporal mínimo (janelas deslizantes).

6.2.1 Resultados de Classificação

Os resultados para as tarefas de classificação revelam uma dependência do desempenho em relação ao alvo preditivo. A Tabela 6.1 sumariza o melhor desempenho medido pela Acurácia Média, alcançado para cada alvo, modelo e estratégia. Observa-se que a geometria de confinamento é uma característica facilmente distinguível, com os modelos RF e *K-NN* atingindo uma acurácia superior a 0,99 em todas as abordagens. Este alto desempenho, tanto na abordagem ponto a ponto quanto nas janelas, sugere que a geometria é uma propriedade intrínseca cujos sinais estão presentes na dinâmica inicial do sistema. Esse resultado está alinhado com o que os resultados da análise de caracterização das séries temporais utilizando H e C apontaram.

Tabela 6.1: Resumo do melhor desempenho dos modelos de linha de base (*Random Forest* e *K-NN*) para cada alvo e estratégia. O valor apresentado para classificação é a acurácia máxima e para regressão é o R^2 máximo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

Tipo	Alvo de Previsão	Modelo	Estratégia		
			Ponto a Ponto	Janela 5%	Janela 10%
Classificação	Geometria	<i>Random Forest</i>	0,991	0,995	0,996
		<i>K-Neighbors</i>	0,998	1,000	1,000
	Ancoragem	<i>Random Forest</i>	0,912	0,963	0,961
		<i>K-Neighbors</i>	0,926	0,956	0,961
	Magnitude da Quiralidade	<i>Random Forest</i>	0,577	0,684	0,679
		<i>K-Neighbors</i>	0,589	0,637	0,639
Regressão	Parâmetro de Ordem Final	<i>Random Forest</i>	0,859	0,887	0,883
		<i>K-Neighbors</i>	0,865	0,891	0,892
	Densidade de Defeitos Final	<i>Random Forest</i>	0,863	0,838	0,865
		<i>K-Neighbors</i>	0,891	0,899	0,917
	Taxa de Decaimento de Defeitos	<i>Random Forest</i>	0,912	0,929	0,936
		<i>K-Neighbors</i>	0,907	0,978	0,974

Em contrapartida, nesta análise, a previsão de ancoragem de superfície e da magnitude da quiralidade mostra uma clara evolução temporal. O desempenho para a magnitude da quiralidade inicia-se em um patamar mais modesto (Acurácia $\sim 0,58$) e melhora com o uso de janelas temporais, atingindo um valor máximo de 0,684 (*Random Forest*, Janela 5%). De forma similar, a tarefa de ancoragem, embora partindo de uma acurácia elevada (superior a 0,91), também apresenta ganhos de desempenho, alcançando um pico de $\sim 0,96$ (por exemplo, *Random Forest*, Janela 5%). Este comportamento indica que a informação preditiva para essas características emerge e se consolida conforme o sistema evolui e os defeitos interagem com as fronteiras. Essa emergência de informação pode ser interpretada fisicamente: nos estágios iniciais, a dinâmica é dominada pela aniquilação de defeitos em massa, um processo caótico semelhante em todas as condições de ancoragem. O efeito do ancoramento torna-se claro na série temporal quando os defeitos remanescentes começam a interagir diretamente com as superfícies de contorno, e a orientação molecular imposta por elas passa a controlar a dinâmica de relaxamento em larga escala. A melhoria na acurácia, exemplificada para a tarefa de ancoragem na Figura 6.1, reflete essa transição de um regime dominado pelo volume para um regime dominado pela superfície.

As tarefas mais desafiadoras foram as classificações das propriedades relacionadas à quiralidade. Para estes alvos, os modelos clássicos demonstraram capacidade preditiva limitada, com valores de acurácia que raramente ultrapassam 0,65 para sua magnitude. Este resultado mostra a insuficiência dos modelos RF e *K*-NN para capturar as nuances complexas associadas à torção do sistema a partir dos parâmetros de entrada H e C.

Ao comparar as estratégias, nota-se que o uso de janelas de 5% e 10% tende a produzir resultados ligeiramente mais estáveis e, em alguns casos, superiores aos da abordagem ponto a ponto, indicando que mesmo um contexto temporal pequeno agrega valor preditivo. De maneira geral, os modelos *K*-NN e *Random Forest* apresentaram desempenhos muito similares na maioria das tarefas.

6.2.2 Resultados de Regressão

Na análise de regressão, os modelos foram avaliados quanto à sua capacidade de prever parâmetros contínuos do estado final do sistema. A Tabela 6.1 apresenta o melhor coeficiente de determinação (R^2) para cada alvo. Os resultados demonstram sucesso na previsão do parâmetro de ordem final e da densidade de defeitos final, com valores de R^2 que atingem picos de 0,86 e 0,89, respectivamente.

A informação mais preditiva para estes alvos não se encontra no início da simulação, mas sim em uma fase intermediária da dinâmica, sugerindo que é durante o processo de aniquilação e organização dos defeitos que o destino do sistema é determinado, conforme ilustra a Figura 6.2 para o parâmetro de ordem final. Da mesma forma, a fase final da simulação, próxima ao equilíbrio, também se mostra menos preditiva. Isso ocorre porque,

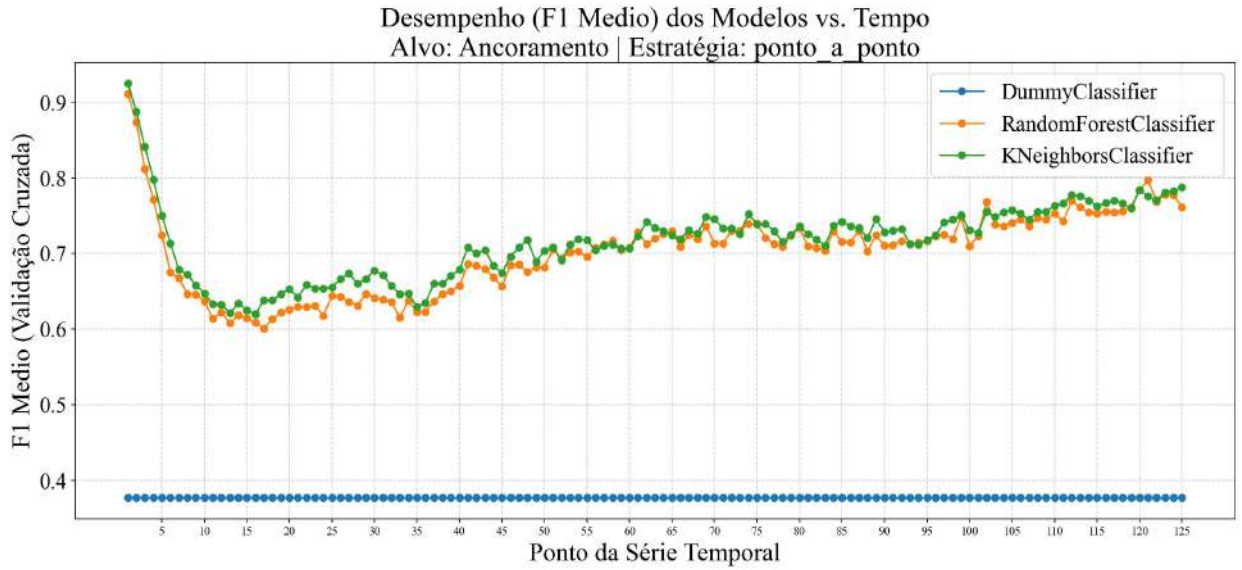


Figura 6.1: Evolução do F1-Score médio para a classificação de ancoragem de superfície em função do tempo, utilizando a estratégia ponto a ponto. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

nesse estágio, o sistema já atingiu um mínimo de energia local e as flutuações na C e H tornam-se pequenas e menos informativas, refletindo o ruído em torno de um estado estável, em vez da dinâmica que leva a esse estado. A fase intermediária representa um "ponto ótimo" preditivo, onde a dinâmica ainda é complexa o suficiente para refletir o processo, mas já organizada o bastante para indicar um resultado específico. A previsão da taxa de decaimento de defeitos também foi bem-sucedida ($R^2 > 0,90$).

6.2.3 Análise da Importância das *Features*

Para aprofundar a compreensão sobre quais aspectos da dinâmica são mais informativos, foi analisada a importância relativa das *features* de H e C ao longo do tempo, utilizando a métrica de *Mean Decrease in Impurity* do modelo *Random Forest*. Uma tendência consistente emergiu para a maioria das tarefas com bom desempenho preditivo (p.ex., parâmetro de ordem, densidade de defeitos e taxa de decaimento). Nos estágios iniciais da simulação, H demonstra ser a *feature* dominante. Este resultado é fisicamente coerente, uma vez que H é sensível a mudanças na dinâmica e à aleatoriedade do sistema, características proeminentes durante a fase inicial de rápida aniquilação de defeitos.

À medida que o sistema evolui em direção ao equilíbrio, observa-se uma inversão na relevância das *features*: a importância da H diminui, enquanto a C se torna progressivamente maior, fenômeno visualizado na Figura 6.3. Isso sugere que, uma vez que a dinâmica inicial mais caótica cessa, a capacidade de prever o estado final passa a depender mais da identificação de estruturas e correlações espaciais emergentes, que são melhor quantificadas pela

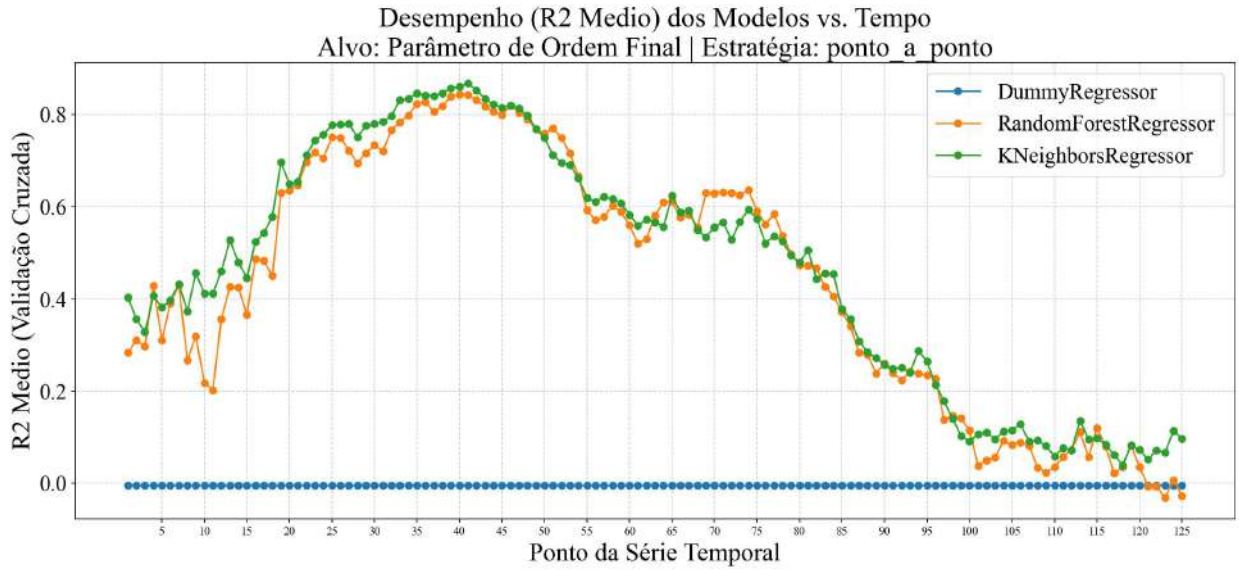


Figura 6.2: Desempenho (R^2 médio) na regressão do parâmetro de ordem final em função do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

C.

Desta forma, a análise de linha de base demonstra que modelos como *Random Forest* e *K-NN*, alimentados por *features* da teoria da informação, são capazes de prever com alta acurácia diversas propriedades do sistema, como geometria, ancoragem e parâmetros de ordem e defeitos. Contudo, eles falham em capturar a complexidade da quiralidade. A análise da importância das *features* aprofunda esses resultados, revelando uma transição clara da relevância da H (dinâmica) para a C (estrutura) à medida que o sistema evolui. Estes resultados estabelecem uma referência e justificam a necessidade de explorar arquiteturas mais complexas. A dependência do desempenho em relação ao tempo sugere que modelos capazes de aprender dependências temporais de longo alcance, como as redes neurais recorrentes e convolucionais, podem oferecer um caminho para superar esses desafios.

6.3 Análise Preditiva com Redes Neurais Profundas e a Série Temporal Completa

Após estabelecer a linha de base com modelos de aprendizado de máquina simples, a pesquisa avançou para o uso de arquiteturas de aprendizado profundo (*deep learning*), visando verificar se modelos com maior capacidade de aprender padrões temporais complexos poderiam aprimorar o desempenho preditivo. Nesta etapa, a totalidade (100%) da série temporal foi utilizada como entrada, permitindo que os modelos tivessem uma visão completa da dinâmica do sistema. Foram avaliadas redes neurais recorrentes (LSTM, GRU, BiLSTM), convolucionais (1D-CNN, TCN) e um modelo híbrido (CNN-LSTM).

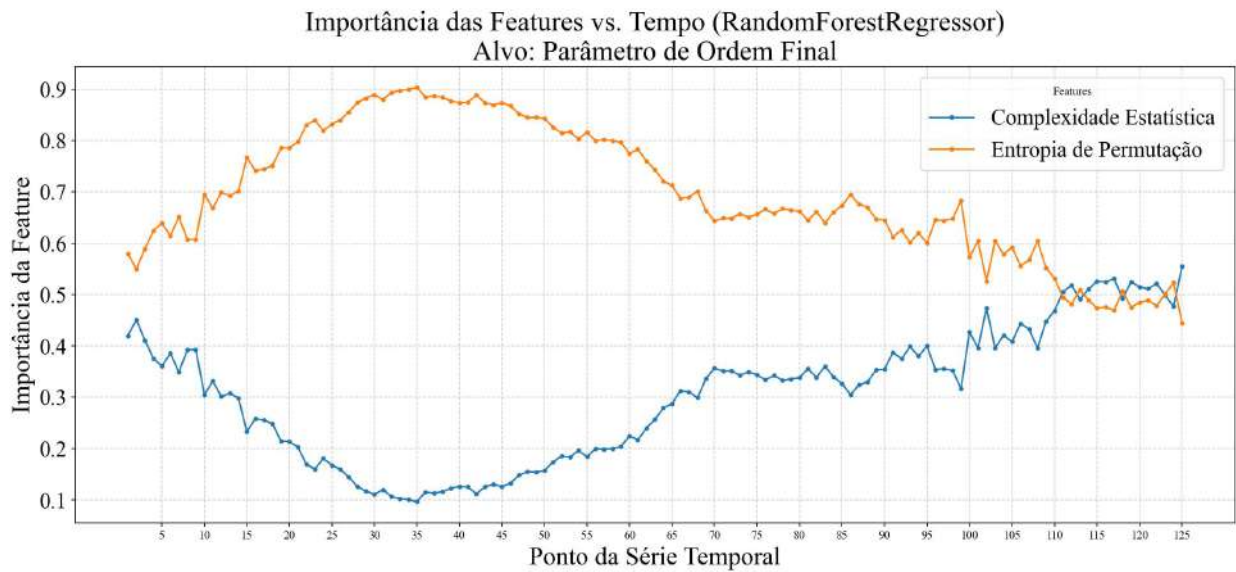


Figura 6.3: Importância relativa da Entropia de Permutação e da Complexidade Estatística para a regressão do parâmetro de ordem final em função do tempo. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

6.3.1 Comparativo de Desempenho entre Arquiteturas de *Deep Learning*

A transição para modelos de *deep learning* resultou em um ligeiro salto de desempenho em comparação com a linha de base, particularmente nas tarefas que se mostraram mais desafiadoras para os modelos clássicos, como a magnitude da quiralidade. A Tabela 6.2 resume os melhores resultados obtidos para cada arquitetura, utilizando as séries de H e C como entrada.

Tabela 6.2: Resumo do desempenho das arquiteturas de *Deep Learning* utilizando 100% da série temporal de H e C. Os valores representam a Acurácia Média para classificação e o R^2 médio para regressão. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

Tipo	Alvo de Previsão	1D-CNN	LSTM	BILSTM	GRU	TCN	CNN-LSTM
Classificação	Geometria	0,998	0,994	0,998	0,984	0,993	0,998
	Ancoragem	0,971	0,671	0,957	0,879	0,744	0,838
	Magnitude da Quiralidade	0,744	0,458	0,822	0,728	0,581	0,539
Regressão	Parâmetro de Ordem Final	0,948	0,918	0,947	0,889	0,709	0,896
	Densidade de Defeitos Final	0,872	0,812	0,880	0,888	0,734	0,870
	Decaimento dos Defeitos	0,985	0,937	0,993	0,969	0,852	0,983

Para as tarefas de classificação, observa-se uma melhoria. Na classificação de ancora-

gem, modelos como 1D-CNN e BiLSTM alcançaram acurácias próximas a 97%, um discreto aumento de desempenho em relação ao K -NN e *Random Forest*. Mais notavelmente, na classificação da magnitude da quiralidade, o desempenho médio saltou de $\sim 0,68$ para mais de 0,82 (BiLSTM).

Este avanço na distinção da magnitude quiral, um dos desafios mais complexos desta investigação, é melhor visualizado mediante a matriz de confusão para o modelo de melhor desempenho, o BiLSTM, apresentada na Figura 6.4. A matriz revela que o modelo acerta a maioria das classificações (conforme indicado pela forte diagonal principal) e também demonstra um padrão de erro fisicamente coerente. As principais confusões ocorrem entre classes de quiralidade próximas (p.ex., entre 0,4 e 0,5), enquanto a distinção entre quiralidades distantes (p.ex., 0,2 e 1,0) é quase perfeita. Isso indica que o modelo aprendeu uma representação da proximidade quiral a partir da dinâmica temporal, um feito inalcançado pelos modelos clássicos.

Nos cenários de regressão, há uma melhoria, ainda que modesta em alguns casos, para a maioria dos alvos. As previsões para o parâmetro de ordem final e a densidade de defeitos alcançaram excelentes coeficientes de determinação (R^2), consistentemente superiores a 0,94 com as melhores arquiteturas. De forma ainda mais notável, a tarefa de prever a taxa de decaimento dos defeitos obteve um desempenho excepcional, com R^2 acima de 0,98 em vários modelos.

Entre as arquiteturas, modelos convolucionais como o 1D-CNN e recorrentes como BiLSTM e GRU frequentemente figuraram entre os de melhor desempenho, sugerindo que tanto a extração de características locais (convoluções) quanto a análise da sequência temporal são estratégias eficazes.

6.3.2 Poder Preditivo das *Features* da Teoria de Informação vs. Parâmetros Físicos

Uma análise subsequente foi realizada para comparar o poder preditivo das *features* da teoria da informação (H e C) com os parâmetros físicos: parâmetro de ordem e a densidade de linhas de defeito. Para isso, os modelos de *deep learning* foram treinados com diferentes conjuntos de dados de entrada.

Os resultados indicam que o conjunto de *features* composto por H+C supera os parâmetros físicos quando utilizados isoladamente. Na tarefa de classificação de ancoragem, por exemplo, o uso de H+C com o modelo 1D-CNN resultou em uma acurácia de 97,1%, enquanto o uso exclusivo do parâmetro de ordem ou da densidade de defeitos alcançou 92,1% e 65,2%, respectivamente, como detalhado na Figura 6.5. Este resultado valida uma hipótese de que as métricas da teoria da informação podem capturar a dinâmica essencial do sistema de forma mais preditiva do que os próprios parâmetros macroscópicos que descrevem o es-

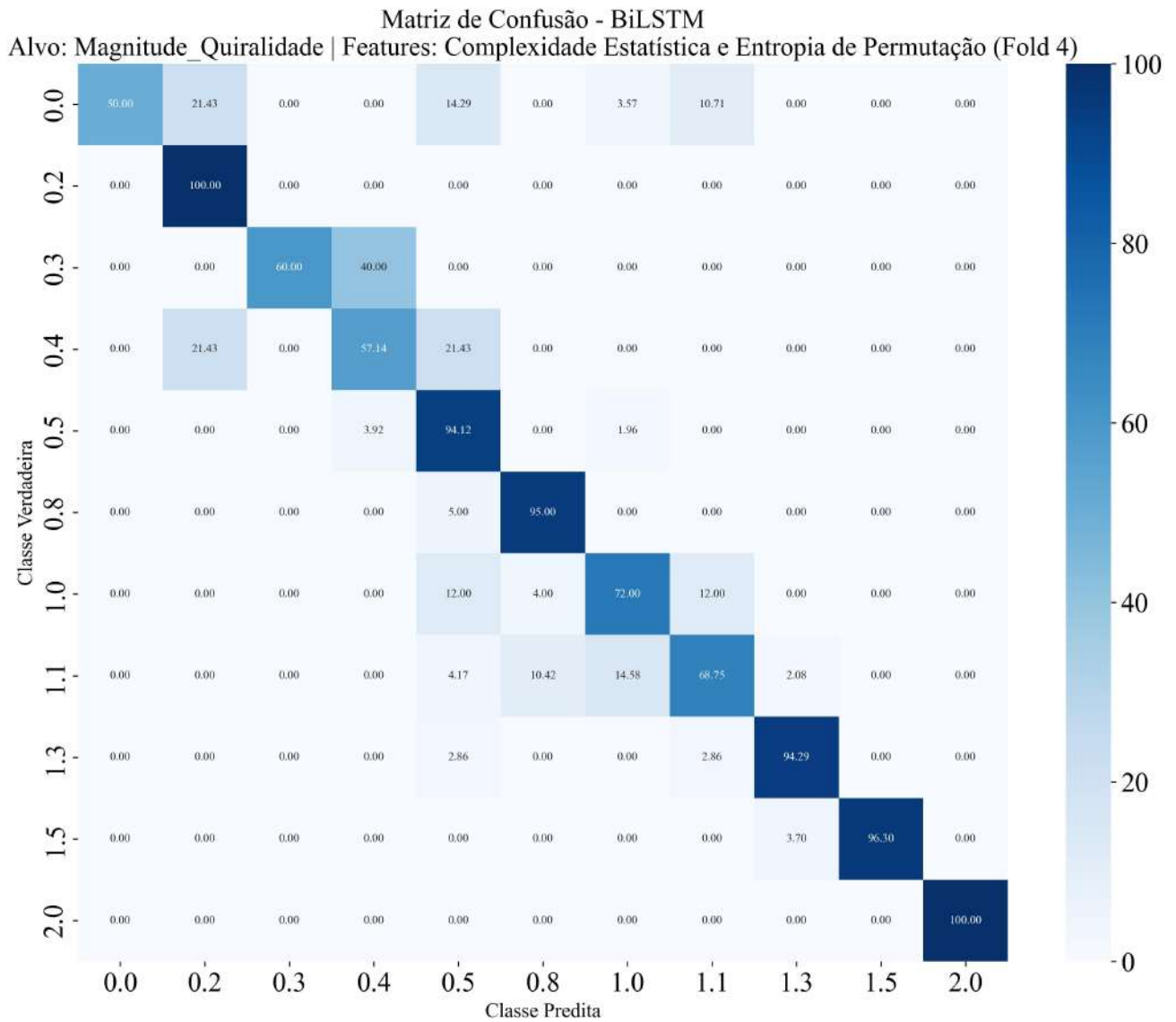


Figura 6.4: Matriz de confusão normalizada para a tarefa de classificação da magnitude da quiralidade, utilizando o modelo BiLSTM no conjunto de dados completo. A forte concentração de valores na diagonal principal (acima de 80% para a maioria das classes) demonstra a alta capacidade do modelo em distinguir entre diferentes intensidades de torção. As miscigenações ocorrem predominantemente entre classes vizinhas, indicando um aprendizado coerente da escala quiral.

tado do sistema. Ele sugere que uma descrição do processo (a evolução da complexidade e da entropia) contém mais informação sobre o destino do sistema do que uma descrição do seu estado macroscópico instantâneo (o parâmetro de ordem ou a densidade de defeitos). Isso reforça a ideia de que, em sistemas complexos fora do equilíbrio, a trajetória dinâmica em si é um descritor de estado mais relevante do que as médias de campo tradicionais.

A combinação das *features* ($H + C + \text{Parâmetro de Ordem}$) levou a um leve aumento no desempenho em algumas tarefas, como na classificação de geometria, atingindo uma acurácia próxima de 100%. No entanto, para as tarefas mais complexas, a adição de parâmetros físicos

não resultou em ganhos significativos sobre o uso exclusivo de H e C, reforçando o poder informativo intrínseco destas duas métricas.

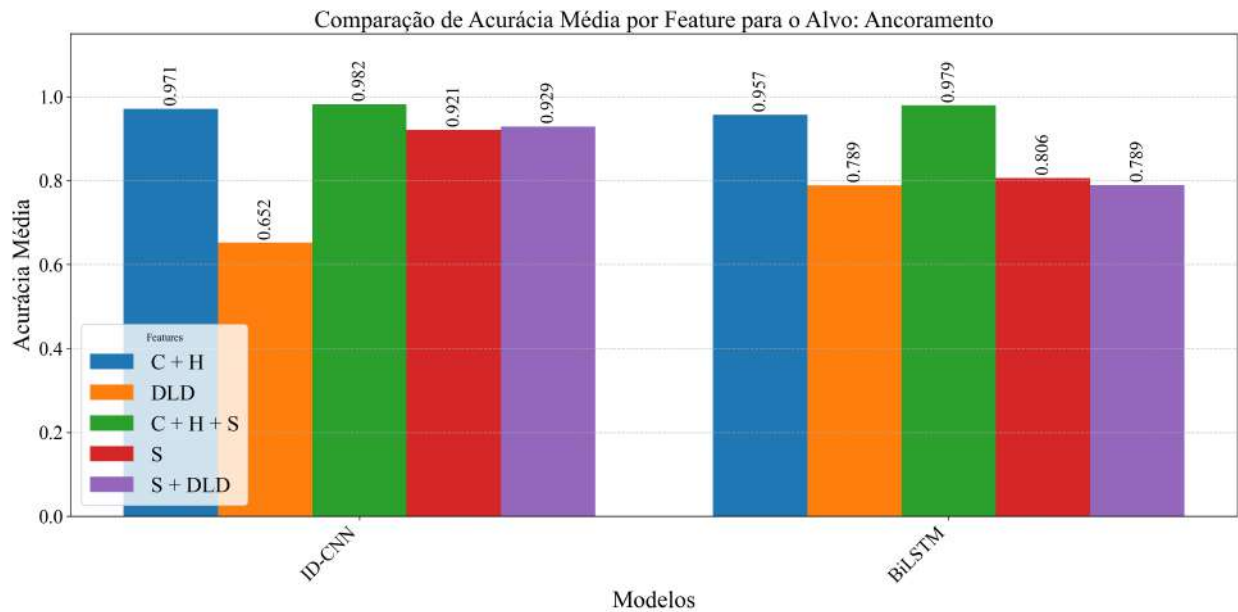


Figura 6.5: Comparação da acurácia média na classificação do ancoramento de superfície utilizando diferentes conjuntos de *features* de entrada com as arquiteturas 1D-CNN e BiLSTM. As barras azuis, laranjas, verdes, vermelhas e roxas representam, respectivamente, os conjuntos de *features* (C e H), (Densidade de Defeitos), (C, H e Parâmetro de Ordem), (Parâmetro de Ordem) e (Parâmetro de Ordem e Densidade de Defeitos). Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

6.4 Investigando a Dinâmica Temporal para Previsão

As análises anteriores estabeleceram a superioridade das arquiteturas de *deep learning* ao utilizar a totalidade da série temporal. A próxima etapa da investigação foca em entender a própria dinâmica temporal para responder a duas perguntas: 1) Qual a quantidade mínima de dados iniciais da simulação necessária para se obter uma previsão confiável? 2) Em qual segmento da evolução temporal (início, meio ou fim) reside a informação mais preditiva? Esta seção aborda a primeira questão.

6.4.1 Análise Progressiva: Quantidade Mínima de Dados para Previsão

Para determinar quão cedo o estado final e as características intrínsecas do sistema podem ser previstos, os modelos de *deep learning* foram treinados e avaliados utilizando porções crescentes dos dados iniciais da série temporal, partindo de 10% e progredindo em incrementos de 10% até atingir 100%.

Resultados de Classificação

Os resultados para as tarefas de classificação, ilustrados na Figura 6.6, revelam comportamentos distintos para cada alvo. A geometria é uma propriedade identificada quase que instantaneamente. Os modelos alcançam um desempenho excelente (acurácia e *F1-Score* acima de 0,98) utilizando apenas os 10% iniciais da série temporal. O desempenho se mantém alto, independentemente da quantidade de dados subsequentes adicionais, confirmando que a geometria é uma característica presente desde os primeiros estágios da evolução do sistema.

A previsão do Ancoramento de superfície, por sua vez, demonstra uma curva de aprendizado (conforme mostra a Figura 6.6a). O desempenho começa baixo e apresenta um salto significativo de desempenho quando a quantidade de dados utilizados passa de 30% para 40%. Depois disso, a acurácia se estabiliza, indicando que a informação principal sobre as interações de superfície se consolida durante o primeiro terço da dinâmica, coincidindo possivelmente com o período de maior aniquilação de defeitos perto das fronteiras.

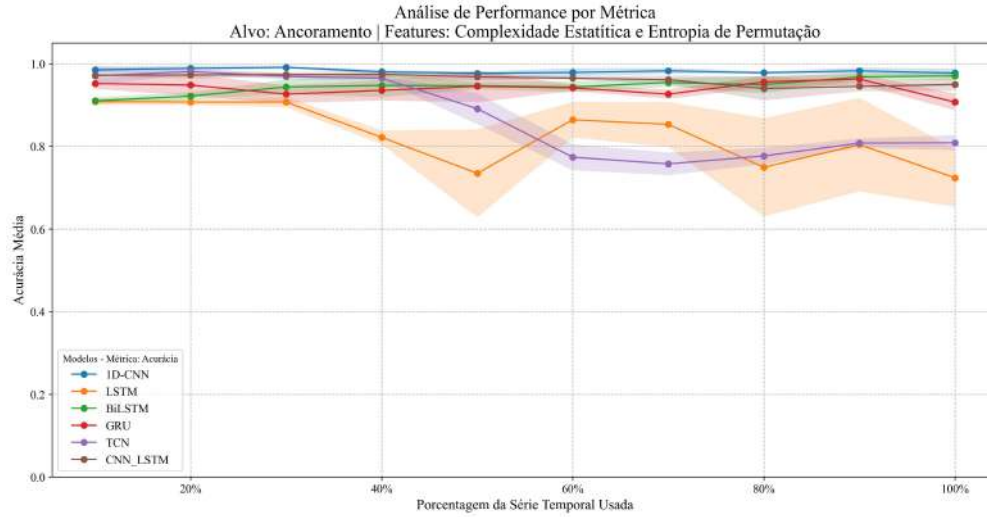
Finalmente, a classificação da Magnitude da Quiralidade exhibe uma curva de aprendizado para os modelos como BiLSTM e 1D-CNN (Figura 6.6c), revelando-se uma tarefa complexa. Conforme mais porções da série temporal são incluídas, a acurácia melhora consistentemente. Isso sugere que, embora a informação sobre a magnitude não seja facilmente detectada no início, ela se torna relativamente mais clara conforme a dinâmica do sistema evolui em direção ao equilíbrio.

Resultados de Regressão

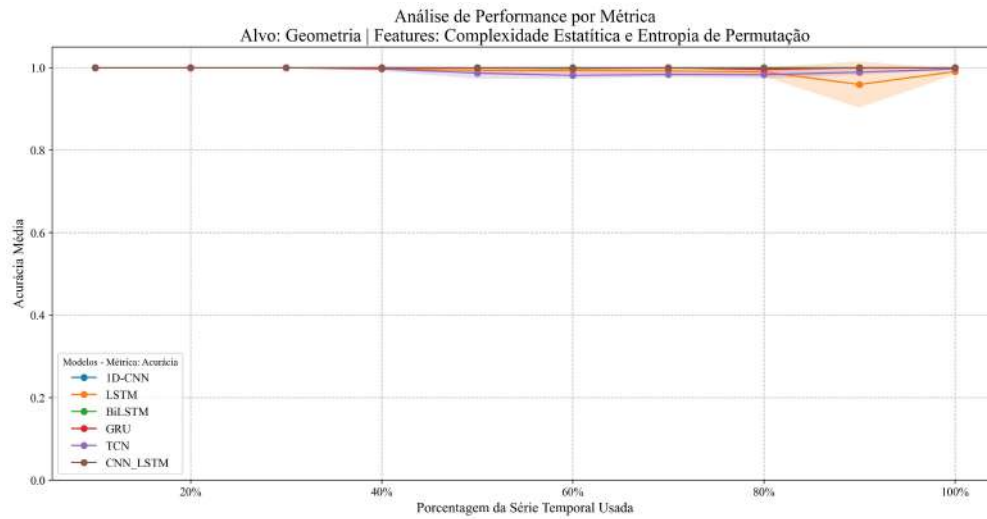
A análise progressiva para as tarefas de regressão, apresentada na Figura 6.7 mostra tendências sobre a localização temporal da informação preditiva para cada alvo.

Para a Taxa de Decaimento de Defeitos, conforme esperado, nesta análise, a previsão da taxa de decaimento é mais precisa quando se utiliza a menor quantidade de dados. Os modelos atingem o pico de desempenho (R^2 próximo de 1,0) com apenas 10-20% dos dados iniciais. À medida que mais porções da série temporal são incluídas, o desempenho gradualmente decai. Como mencionado anteriormente, este comportamento é fisicamente plausível, e pode ser visto na Figura 6.7a uma vez que a taxa de decaimento é, por definição, uma característica proeminente do início da simulação, tornando-se menos relevante nos estágios posteriores de relaxamento.

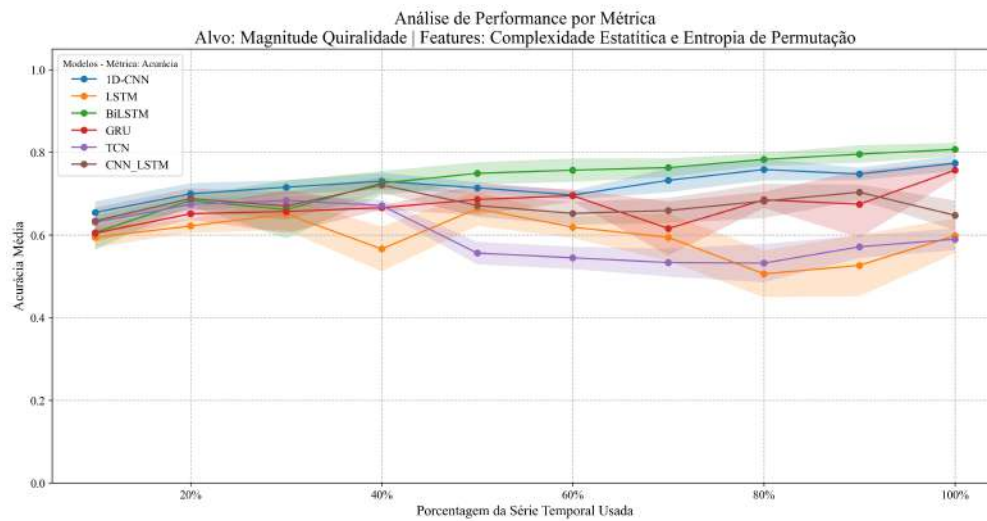
Em relação ao Parâmetro de Ordem e Densidade de Defeitos, a análise demonstra um comportamento similar para ambos os alvos. O desempenho preditivo da maioria dos modelos, medido pelo coeficiente de determinação R^2 , aumenta nos estágios iniciais, atingindo um platô de desempenho máximo quando se utiliza entre 40% e 60% da série temporal. Após esse ponto ótimo, adicionar mais dados (de 70% a 100%) não altera o desempenho da



(a) Ancoramento



(b) Geometria



(c) Maginitude da Quiralidade

Figura 6.6: Evolução da acurácia média para a classificação de (a) geometria (b) Ancoramento e (c) Magnitude da quiralidade em função da porcentagem de dados iniciais da série temporal utilizados no treinamento. As curvas representam diferentes arquiteturas de *deep learning*. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

maioria dos modelos e em alguns casos, como para o modelo TCN, o desempenho tende a diminuir. Isso sugere ser possível prever o estado final do sistema com alta precisão sem simular sua totalidade. Além disso, a fase final da evolução, próxima ao equilíbrio, parece conter menos informação relevante (ou mais ruído) para a previsão do que a fase intermediária de organização estrutural. A evolução do R^2 médio é detalhada para o Parâmetro de Ordem na Figura 6.7b e para a Densidade de Defeitos na Figura 6.7c.

Esta análise demonstra que a quantidade de informação preditiva não é uniformemente distribuída ao longo da evolução temporal do sistema. Propriedades como a geometria são definidas quase instantaneamente, enquanto características da dinâmica inicial, como a taxa de decaimento de defeitos, são melhor previstas com porções pequenas de dados.

Outras propriedades, como o estado de ordem e a estrutura de defeitos, têm seu destino determinado durante a fase intermediária da dinâmica. Para estas últimas, os dados da fase final de relaxamento para o equilíbrio são redundantes e podem ser ligeiramente prejudiciais ao desempenho do modelo. Com exceção de alguns modelos, os quais apresentam uma queda no R^2 a partir da inclusão de dados posteriores a 50% dos dados totais. Entre eles, o modelo TCN se destaca negativamente, obtendo a maior queda de desempenho a partir de informações de cerca de metade dos dados das séries temporais; esse comportamento ocorre para todos os alvos de regressão e para a classificação do ancoramento e da magnitude da quiralidade. Estes resultados sugerem a possibilidade de otimizar simulações e experimentos, interrompendo a coleta de dados muito antes do sistema atingir o equilíbrio completo, sem perda de capacidade preditiva sobre o estado final.

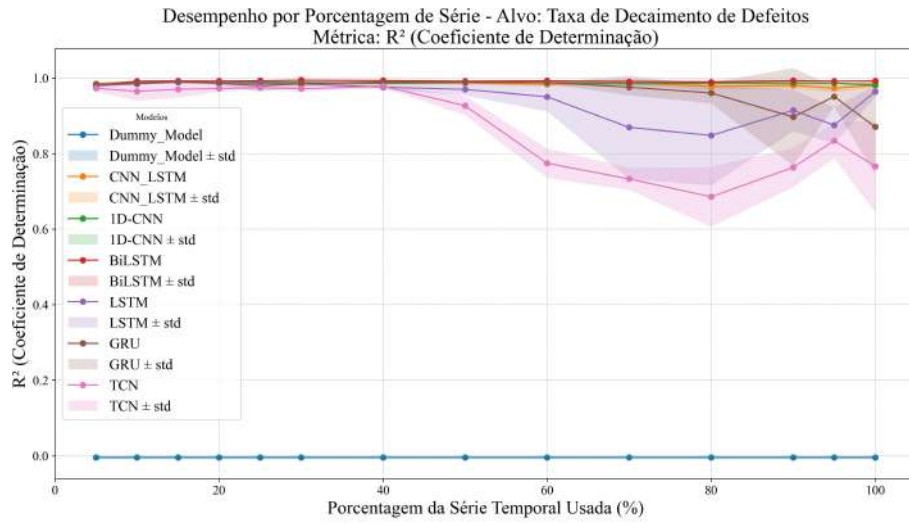
6.5 Análise com Janela Deslizante

Para complementar a análise progressiva e responder à segunda questão estabelecida, sobre em qual segmento da evolução temporal reside a informação mais preditiva, foi realizada uma análise com janela deslizante. Nesta abordagem, os modelos foram treinados e avaliados em segmentos distintos e localizados da série temporal. Foram utilizadas janelas de tamanho fixo, correspondentes a 10%, 20% e 30% da série, que foram deslocadas ao longo de toda a dinâmica com um passo de 5%, permitindo analisar o desempenho do modelo em função do estágio da evolução temporal na simulação.

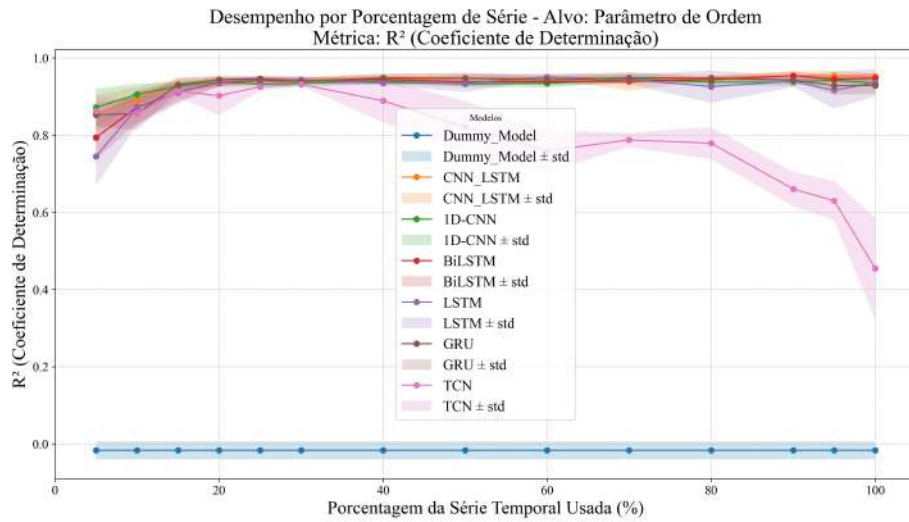
Resultados de Classificação

A análise com os dados de classificação revela padrões distintos para cada alvo, indicando que a relevância da informação temporal varia significativamente ao longo da evolução do sistema.

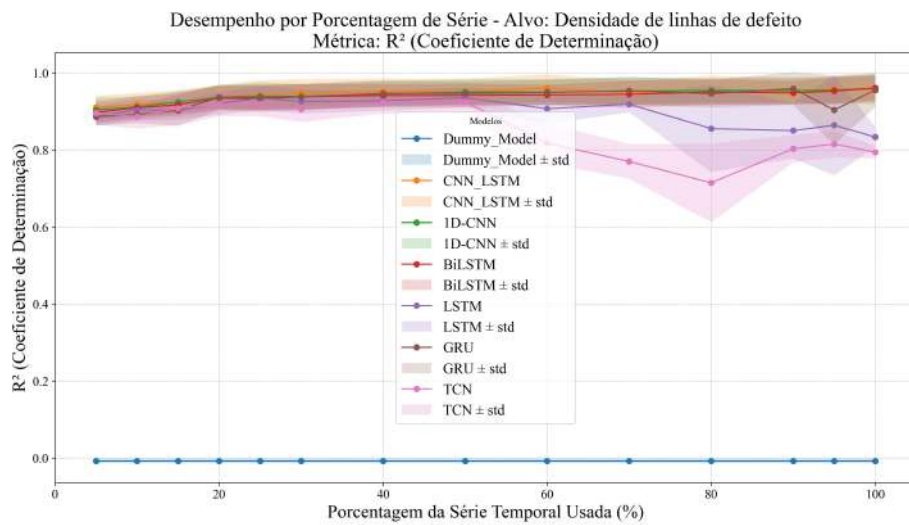
A classificação da Geometria mantém um desempenho quase perfeito ($F1-Score > 0,98$) independentemente da posição da janela e do seu tamanho. Seja no início, no meio ou no fim



(a) Taxa de Decaimento de Defeitos



(b) Parâmetro de Ordem Final



(c) Densidade de Defeitos Final

Figura 6.7: Desempenho da regressão (R^2 Score) em função da porcentagem de dados iniciais utilizados. (a) Decaimento (aniquilação) dos Defeitos, (b) Parâmetro de Ordem e (c) Densidade de Defeitos. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

da simulação, um pequeno segmento da dinâmica é suficiente para caracterizar a geometria com altíssima precisão. Isso reforça a conclusão de que esta é uma característica constante na dinâmica do sistema, como se observa na Figura 6.8a.

O desempenho na classificação do Ancoramento apresenta uma clara curva em formato de parábola côncava, ilustrada na Figura 6.8b. O *F1-Score* é máximo nas janelas iniciais (começando em 0% da série), decai para um valor mínimo em janelas localizadas no meio da simulação (entre 30% e 60%) e volta a crescer nas janelas finais. Este comportamento sugere a existência de dois regimes informativos distintos e importantes: a dinâmica inicial de alta energia e aniquilação de defeitos e a fase final de relaxamento e estabilização da estrutura próxima ao equilíbrio. A fase intermediária, de menor atividade dinâmica, parece ser menos informativa para esta tarefa. O uso de janelas maiores (20% e 30%) tende a suavizar a queda de desempenho na região central, mas mantém o mesmo padrão geral.

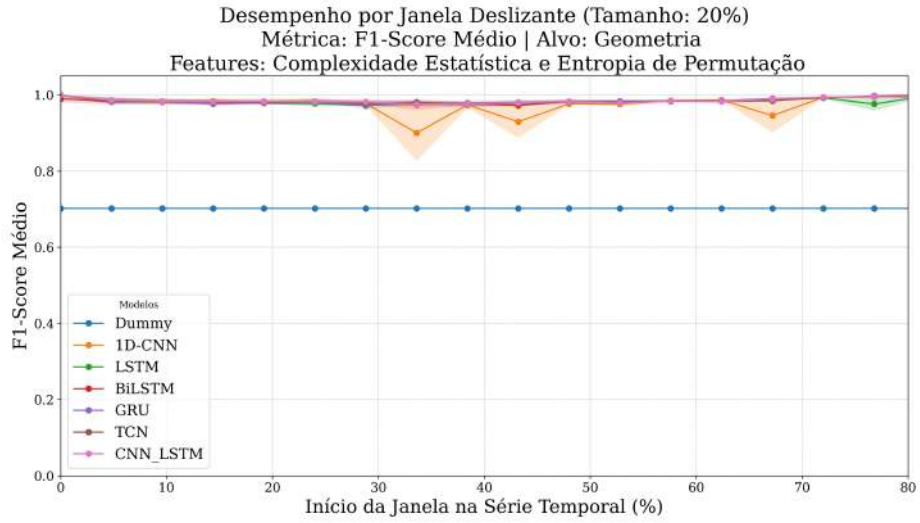
Por fim, a classificação da Magnitude da Quiralidade apresenta um desempenho relativamente baixo em todas as posições da janela. O comportamento é, em certa medida, similar à classificação do ancoramento, contudo, com menor desempenho. o *F1-Score* é máximo nos primeiros 10% da dinâmica ($\sim 0,6$), nas janelas intermediárias o desempenho apresenta a maior queda para $\sim 0,35$ e o mesmo melhora ligeiramente nas janelas mais tardias, mas permanece em um patamar modesto ($\sim 0,5 - 0,55$). Isso sugere que a informação quiral é sutil e distribuída complexamente ao longo de toda a dinâmica, não sendo facilmente capturada por um único segmento temporal isolado, conforme ilustra o baixo desempenho para a magnitude da quiralidade na Figura 6.8c.

Resultados de Regressão

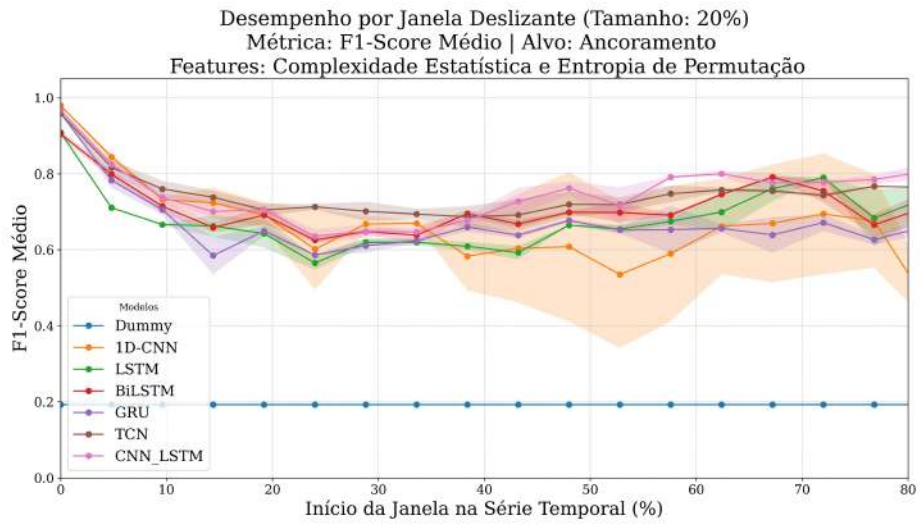
A análise de regressão com janela deslizante corrobora e aprofunda os resultados da classificação, mostrando onde a informação preditiva está localizada temporalmente.

No caso da Taxa de Decaimento de Defeitos, a informação para prever a taxa de decaimento está concentrada no início da simulação. O desempenho (R^2) é máximo para todos os modelos quando a janela está posicionada no início da série temporal (começando em 0%), atingindo valores superiores a 0,95. Conforme a janela desliza para estágios posteriores da dinâmica, o desempenho decai, como ilustrado na Figura 6.9b, embora apresente uma leve recuperação a partir dos 70% da série.

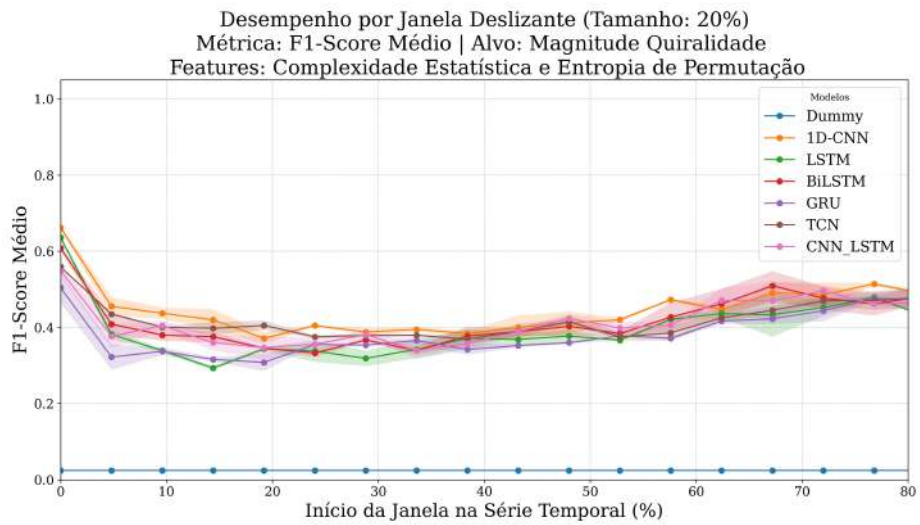
Para a previsão do Parâmetro de Ordem e Densidade de Defeitos, o melhor desempenho (maior R^2) é consistentemente obtido nas janelas iniciais, que cobrem os primeiros 10% a 30% da série temporal. Após essa fase inicial, a capacidade preditiva dos modelos diminui progressivamente, um comportamento exemplificado para a densidade de defeitos na Figura 6.9a. Isso sugere que o estado final do sistema (em termos de ordem e defeitos) é determinado pelos eventos que ocorrem na fase de alta energia e aniquilação, e não pela configuração final de equilíbrio.



(a) Geometria



(b) Ancoramento



(c) Magnitude da Quiralidade

Figura 6.8: Desempenho (F1-Score) na classificação de diferentes alvos em função da posição inicial da janela deslizante (tamanho 20%). (a) Geometria, (b) Ancoramento e (c) A Magnitude da Quiralidade. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

A convergência desses resultados (da análise progressiva e da janela deslizante) aponta para uma conclusão: o estado de equilíbrio de um sistema de matéria mole é, em grande medida, um vestígio da sua dinâmica inicial. A informação que define a estrutura final não emerge no final do processo, mas é determinada durante a fase caótica de auto-organização e aniquilação de defeitos. O resto da evolução no tempo, do ponto de vista da previsão, apenas segue um caminho que já está definido. Isso indica que, para modelar e fazer experimentos de forma eficaz, a coleta de dados deve-se concentrar nas fases iniciais e instáveis do sistema, e não nos estados finais mais estáveis.

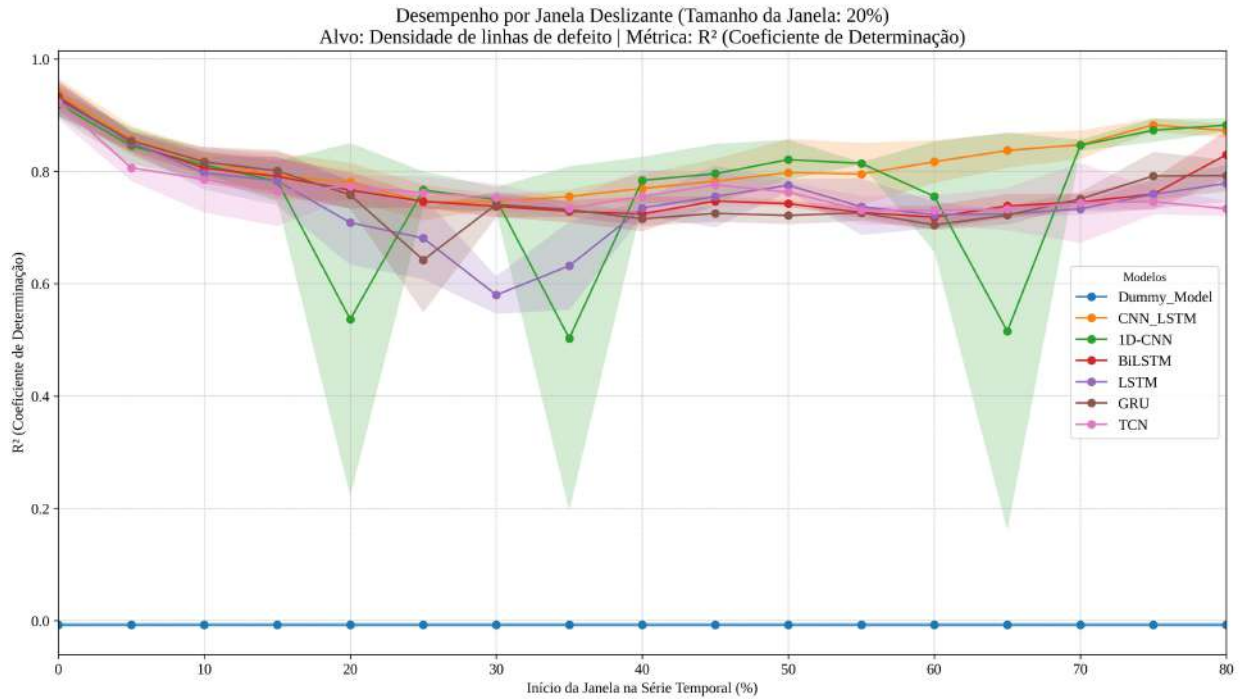
Portanto, a análise com janelas deslizantes mostra claramente onde, ao longo da dinâmica, está a informação mais útil para a previsão. Fica claro que diferentes propriedades físicas manifestam suas características em momentos diferentes. A fase inicial da evolução (primeiros 30%) é a que mais contribui para prever o estado final de ordem, a densidade de defeitos e a taxa de decaimento. Já a previsão do ancoramento se beneficia tanto do início quanto do fim da dinâmica. Por outro lado, as propriedades quírais se mostram difíceis de prever a partir de qualquer parte isolada, ainda que nos estágios iniciais a previsibilidade da magnitude seja maior que o restante da dinâmica. Isso reforça a conclusão anterior: é possível prever o futuro com apenas parte dos dados, como também o trecho mais informativo varia conforme o que se quer prever.

6.6 Análise Preditiva em Subconjuntos Segmentados

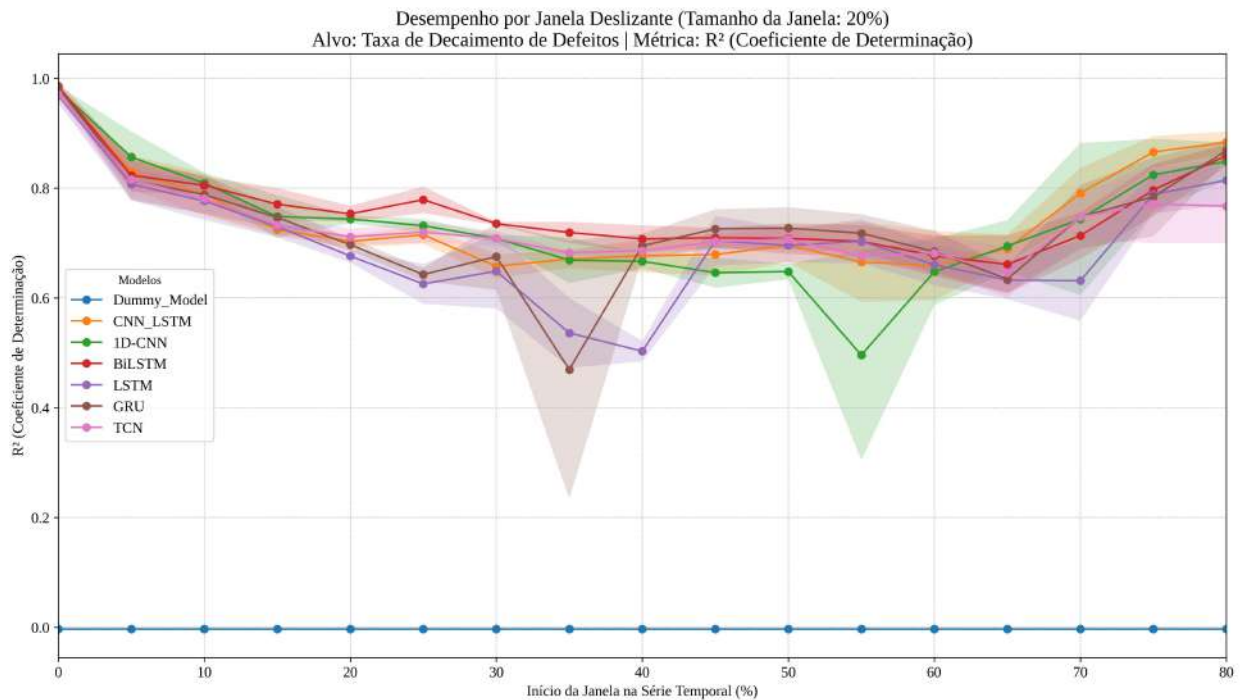
As análises anteriores, utilizando o conjunto de dados completo, mostraram que algumas propriedades, como a geometria e o ancoramento, são altamente previsíveis. Isso sugere que elas podem ser variáveis dominantes, com padrões tão fortes que acabam escondendo informações mais sutis de outras propriedades. Para testar essa ideia e entender melhor como essas características se relacionam, foram feitas análises segmentadas. Nelas, os modelos foram treinados e avaliados em partes específicas dos dados, isolando uma propriedade para ver como isso afeta a previsão das outras. Os resultados detalhados desta análise estão compilados nas Tabelas 6.3 e 6.4.

6.6.1 Segmentação por Geometria de Confinamento

Primeiramente, o conjunto de dados foi dividido conforme a geometria de confinamento (*slabs* e esferas) para avaliar a previsão das demais propriedades em cada ambiente. A previsibilidade do ancoramento se mostrou depender da forma de confinamento. Nos dados de geometria esférica, o modelo atinge 100% de acurácia para prever o ancoramento. Em contrapartida, nos dados de geometria plana, a acurácia cai para 91%. Esse comportamento pode ser atribuído ao fato de que a curvatura e a forma do confinamento fechado fazem



(a) Densidade de Defeitos Final



(b) Taxa de Decaimento de Defeitos

Figura 6.9: Coeficiente de determinação (R^2) na regressão em função da posição da janela deslizante. (a) A predição da Densidade de Defeitos é mais forte na fase inicial da dinâmica. (b) A predição da Taxa de Decaimento (aniquilação) é quase perfeita, mas apenas com informações do início da simulação. Fonte: Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

o sistema ter características bem distintas dependendo do ancoramento. Por exemplo, um ancoramento homeotrópico em uma esfera cria um defeito *hedgehog* estável no centro. Já em uma lâmina plana, os efeitos de ancoragem podem ser mais sutis e gerar dinâmicas menos distintas entre si, tornando a classificação mais difícil. Na previsão da magnitude da quiralidade, o segmento com geometria esférica (83%) apresenta o melhor desempenho, superando ligeiramente o modelo geral (82%).

No segmento de amostras em *slabs*, o desempenho na previsão da magnitude da quiralidade (acurácia de $\sim 0,78$) não demonstrou diferenças significativas com relação aos dados gerais, ainda que tenha obtido uma ligeira queda de desempenho com relação ao segmento exclusivo das amostras esféricas. Nas tarefas de regressão para a taxa de decaimento dos defeitos ($R^2 = 0,97$) e o parâmetro de ordem final ($R^2 = 0,93$), os modelos alcançaram alta precisão. Contudo, a previsão da densidade de defeitos final tornou-se inviável, com o R^2 caindo para próximo de zero (0,002), um forte contraste com o modelo geral ($R^2 = 0,88$). Isso pode ser entendido pelo fato de que não existem defeitos estáveis nos *slabs*, embora a quiralidade faça com que haja pequenas variações locais no parâmetro de ordem.

Em contraste, nos resultados em esferas, a dinâmica em confinamento esférico se mostrou intrinsecamente mais complexa e menos previsível para certas propriedades. A tarefa de regredir o parâmetro de ordem final apresentou uma queda notável de desempenho, com o R^2 caindo de 0,93 em *slabs* para 0,29 em esferas. Isto sugere que o caminho para o estado de equilíbrio ordenado em esferas é muito mais complexo ou que seus sinais nas séries temporais de H e C são mais fracos. De fato, o valor do parâmetro de ordem final nas esferas é muito sensível ao ancoramento e à quiralidade. Em *slabs*, o relaxamento lento e gradual cria uma forte correlação causal entre a dinâmica inicial (taxa de aniquilação, formação de domínios) e o grau de ordem final. Em esferas, o colapso é tão rápido e o sistema fica preso em um de múltiplos mínimos de energia locais (estados frustrados). Em outras palavras, a dinâmica média capturada por C e H não é suficiente para distinguir qual dos muitos estados finais possíveis será escolhido. A previsibilidade é perdida porque a relação entre a dinâmica inicial e o estado final se torna fracamente determinada devido à frustração topológica. Por outro lado, no segmento de geometria esférica, o desempenho na classificação da magnitude da quiralidade ($\sim 0,83$) obteve uma discreta melhora com relação ao segmento das *slabs* ($\sim 0,78$), indicando que essa característica se manifesta ligeiramente mais clara na dinâmica de sistemas esféricos.

Um resultado interessante dessa análise é a inversão de desempenho entre *slabs* e esferas na previsão do parâmetro de ordem e da densidade final de defeitos. Em *slabs*, o parâmetro de ordem é facilmente previsível ($R^2 = 0,93$), enquanto a densidade de defeitos é imprevisível ($R^2 = 0,002$). Já em esferas, ocorre o oposto: a previsão do parâmetro de ordem é difícil ($R^2 = 0,29$), mas a da densidade de defeitos é precisa ($R^2 = 0,94$).

No caso dos *slabs*, a geometria plana permite que o sistema relaxe para um estado al-

tamente ordenado, com um caminho suave e bem definido. A dinâmica inicial, portanto, guarda forte correlação com o grau de ordem final. A densidade de defeitos, por outro lado, é quase sempre próxima de zero, resultando em uma variável com variância muito baixa. Isso dificulta a aprendizagem dos modelos, que não conseguem distinguir entre pequenas flutuações, como 0,001 e 0,002 defeitos por unidade de área, o que se traduz em baixa capacidade preditiva.

Em esferas, o confinamento impõe frustração topológica, forçando a presença de defeitos e favorecendo estados metaestáveis com diferentes graus de ordem. Assim, a dinâmica inicial não é suficiente para determinar com precisão o parâmetro de ordem final. No entanto, a densidade de defeitos permanece previsível porque a carga topológica total é conservada. A dinâmica inicial parece correlacionar-se com a eficiência do sistema em eliminar defeitos redundantes, permitindo prever com precisão o número final de defeitos.

6.6.2 Segmentação por Ancoramento de Superfície

Em uma segunda etapa, a análise foi invertida: o conjunto de dados foi segmentado por tipo de ancoramento (homeotrópico, híbrido e planar) para reavaliar a previsibilidade das propriedades. A previsão da geometria permaneceu com desempenho perfeito (acurácia $\approx 100\%$) em todos os subconjuntos de ancoramento, confirmando que seus sinais na dinâmica são independentes das condições de superfície. A capacidade do modelo de atingir 100% de acurácia na distinção entre *slabs* e esferas, independentemente do ancoramento, indica que a marca da dinâmica inicial imposta pela geometria de confinamento é tão forte que se sobrepõe a qualquer outra variável. Fisicamente, a relaxação em uma esfera (que evolui para um estado com defeitos topológicos) e em uma lâmina (que evolui para um estado uniforme) gera curvas de Entropia e Complexidade (C e H) muito distintas. Dessa forma, o sinal é tão claro que a tarefa se torna trivial para os modelos.

Na classificação da magnitude da quiralidade, as amostras com ancoramento híbrido mostrou uma melhora significativa na distinção da magnitude quiral, com acurácias de 83% com relação aos demais segmentos, e assim como o segmento de esferas, superando ligeiramente o modelo geral (82%). Este é um dos resultados mais importantes da análise segmentada, pois atingir uma alta acurácia (83%) na classificação da magnitude da quiralidade, uma tarefa que se mostrou relativamente desafiadora no conjunto de dados geral, indica que as condições de contorno podem intensificar o efeito da quiralidade, tornando-o mais discernível.

Finalmente, na previsão de Parâmetros de Ordem e Defeitos por regressão, a segmentação por ancoramento resultou em um desempenho consistentemente alto, com valores de R^2 frequentemente superiores a 0,95, especialmente para a taxa de decaimento de defeitos. Isso indica que, uma vez fixada a condição de superfície, o estado final do sistema torna-se altamente previsível.

Tabela 6.3: Desempenho dos melhores modelos de classificação (Acurácia média) para o conjunto de dados geral e subconjuntos segmentados. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Alvo da Previsão	Modelo Geral	Seg. Slabs	Seg. Esferas	Seg. Homeotrópico	Seg. Híbrido	Seg. Planar
Ancoramento	0,97 (1D-CNN)	0,91 (BiLSTM)	1,00 (BiLSTM)	N/A	N/A	N/A
Magnitude de Quiralidade	0,82 (BiLSTM)	0,78 (BiLSTM)	0,83 (BiLSTM)	0,77 (BiLSTM)	0,83 (BiLSTM)	0,76 (BiLSTM)
Geometria	0,99 (1D-CNN)	N/A	N/A	1,00 (1D-CNN)	1,00 (1D-CNN)	1,00 (BiLSTM)

6.6.3 Segmentação por Geometria e Ancoramento

Para aprofundar a compreensão sobre a interdependência das variáveis, foi conduzida uma terceira rodada de análises segmentadas, desta vez fixando simultaneamente a geometria de confinamento e a condição de ancoramento na superfície. Esta análise foi realizada apenas para a tarefa de classificação, especificamente para investigar detalhadamente os desafios encontrados nas análises anteriores para o reconhecimento da magnitude da quiralidade. Em virtude da considerável redução no volume de dados ocasionada pela segmentação simultânea por geometria e ancoramento, a etapa de validação cruzada foi conduzida com apenas 2 *folds*. De maneira geral, as arquiteturas BiLSTM e 1D-CNN figuraram consistentemente entre os modelos com melhores desempenhos. A Tabela 6.5 resume os melhores resultados obtidos nesta análise.

A análise dos resultados para a classificação da magnitude da quiralidade revela que o desempenho dos modelos é altamente dependente tanto da geometria quanto da condição de ancoramento. No ambiente de placas paralelas, a capacidade de distinguir a magnitude da quiralidade mostrou uma forte dependência da condição de ancoramento. Os resultados variam consideravelmente, com acurácias de 71% para o ancoramento homeotrópico, 67% para o planar e um desempenho superior de 90% para o ancoramento híbrido.

Um comportamento similar foi observado na geometria esférica, ou seja, a condição de ancoramento também se mostra um fator determinante. O desempenho da acurácia nas amostras homeotrópicas, planares e híbridas foi aproximadamente 75%, 94%, e 78% respectivamente. Ao comparar as duas geometrias, o desempenho apresentado na previsão da magnitude da quiralidade, não mostra uma clara superioridade de uma sobre a outra. geometria esférica apresenta melhores resultados para os ancoramentos homeotrópico (75% vs. 71%) e, de forma mais expressiva, para o planar (94% vs. 67%). Em contrapartida, na con-

Tabela 6.4: Desempenho dos melhores modelos de regressão (R^2 médio) para o conjunto de dados geral e subconjuntos segmentados. Fonte: Elaborado pelo autor (2025).

Alvo da Previsão	Modelo Geral	Seg. Slabs	Seg. Esferas	Seg. Homeotrópico	Seg. Híbrido	Seg. Planar
Taxa de Decaimento	0,99 (BiLSTM)	0,97 (BiLSTM)	0,91 (BiLSTM)	0,95 (BiLSTM)	0,98 (1D-CNN)	0,98 (BiLSTM)
Parâmetro de Ordem	0,94 (BiLSTM)	0,93 (BiLSTM)	0,29 (BiLSTM)	0,87 (BiLSTM)	0,89 (1D-CNN)	0,91 (1D-CNN)
Densidade de Defeitos	0,88 (BiLSTM)	0,002 (1D-CNN)	0,93 (BiLSTM)	0,95 (LSTM)	0,96 (LSTM)	0,97 (LSTM)

Tabela 6.5: Resultados de melhor desempenho para o alvo Magnitude da quiralidade nas tarefas de classificação, por geometria e ancoramento. Elaborado pelo autor (2025).

Geometria	Ancoramento	Melhor Modelo	Acurácia
<i>Slabs</i>	Homeotrópico	BiLSTM	0,71
	Planar	1D-CNN	0,67
	Híbrido	BiLSTM	0,90
Esfera	Homeotrópico	BiLSTM	0,75
	Planar	TCN	0,94
	Híbrido	BiLSTM	0,78

dição de ancoramento híbrido, a geometria de *slabs* demonstrou uma vantagem significativa, alcançando 90% de acurácia contra 78% da esférica.

As matrizes de confusão revelam que, mesmo nos modelos de melhor desempenho, a confusão ocorre primariamente entre classes de magnitude de quiralidade adjacentes. Em outras palavras, quanto menor for a diferença entre as magnitudes das torções quirais adjacentes, maior é a dificuldade em classificá-las corretamente. Modelos com desempenho inferior tendem a concentrar suas predições em poucas classes ou a apresentar uma dispersão muito maior dos erros.

No segmento que combina a geometria esférica com a ancoragem planar, o modelo BiLSTM alcançou um dos desempenhos mais notáveis. A matriz de confusão para este modelo (Figura 6.10)b revela uma alta taxa de acertos na diagonal principal, na tarefa referente à magnitude da quiralidade. Para a classe de quiralidade $N = 0,0$, o modelo acertou em 90,00% das vezes, confundindo-a unicamente com a classe adjacente $N = 0,5$ em 10,00%

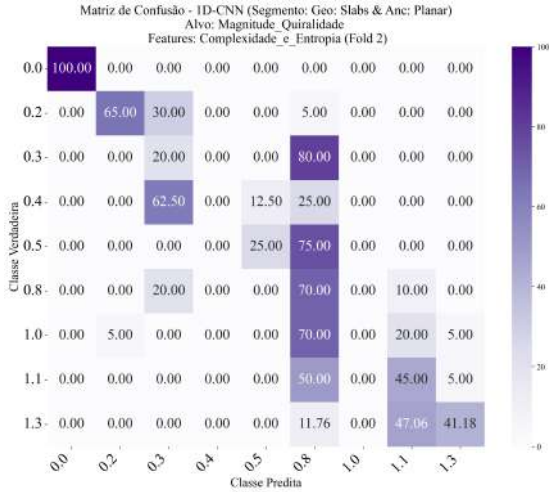
dos casos. As classes $N = 0,5$ e $N = 2,0$ (as extremidades do espectro de quiralidade testado, além da não quiral) demonstraram um desempenho perfeito, com 100% de acerto em suas classificações. De forma similar, a classe $N = 1,0$ foi corretamente identificada em 95,00% das instâncias, com a principal classe de confusão sendo a $N = 1,1$ (5,00%). A classe $N = 1,3$ apresentou 95,00% de acurácia, confundindo-se com a classe $N = 1,5$ nos outros 5,00% dos casos. Por fim, a classe $N = 1,5$ também alcançou 95,00% de classificações corretas, com os 5,00% de erros ocorrendo na predição da classe de maior magnitude, $N = 2,0$. Este padrão de erro concentrado em classes vizinhas sugere que o modelo aprendeu a distinguir bem as magnitudes, com a dificuldade residindo nos limites de decisão entre valores próximos. Para a geometria de *slab*, a combinação com ancoragem híbrida resultou nos melhores desempenhos, com o BiLSTM alcançando uma acurácia média de aproximadamente 0,9 para o alvo magnitude da quiralidade.

Desta forma, a estratégia de segmentação revelou as interdependências entre as propriedades físicas do sistema. A análise demonstra que a geometria de confinamento é a variável mais dominante, influenciando diretamente a capacidade de prever outras características. Podemos inferir que a otimização da capacidade preditiva depende de um entendimento do subconjunto de dados analisado, sugerindo que modelos especializados para cada condição física podem superar o desempenho de um modelo generalista.

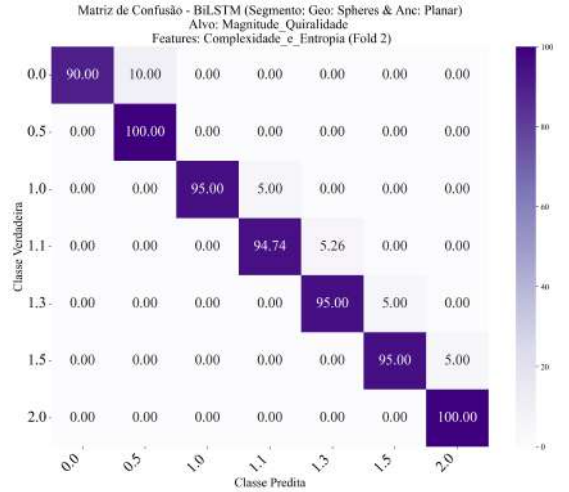
6.7 Síntese e Discussão Geral dos Resultados da Análise de Aprendizado de Máquina

As análises apresentadas nesse capítulo investigaram a capacidade de modelos de aprendizado de máquina e *deep learning* de prever propriedades intrínsecas e estados de equilíbrio de um sistema de CL nemático a partir da dinâmica temporal de parâmetros derivados da teoria da informação: a Entropia de Permutação (H) e a Complexidade Estatística (C). As análises, conduzidas de forma sistemática, permitiram extrair um conjunto de conclusões sobre a natureza preditiva da dinâmica do sistema.

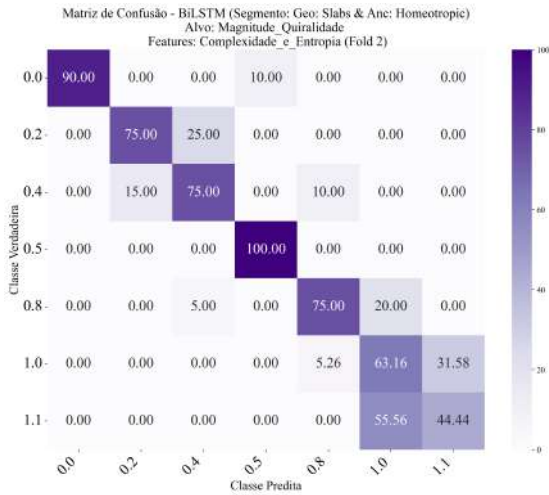
Primeiramente, destaca-se a superioridade das arquiteturas de *deep learning* em relação aos modelos de aprendizado de máquina clássicos (*Random Forest* e *K-NN*). Tanto os modelos recorrentes quanto os convolucionais apresentaram bom desempenho em diversas tarefas, com destaque consistente para o 1D-CNN e o BiLSTM. Enquanto os modelos clássicos estabeleceram uma linha de base razoável para tarefas mais simples, como a classificação de geometria, bem como a classificação do ancoramento, eles se mostraram insuficientes para capturar as nuances de propriedades mais complexas, como a magnitude da quiralidade. A transição para redes profundas, capazes de aprender dependências temporais de longo alcance, resultou em ganhos de desempenho, em algumas tarefas como a classificação do



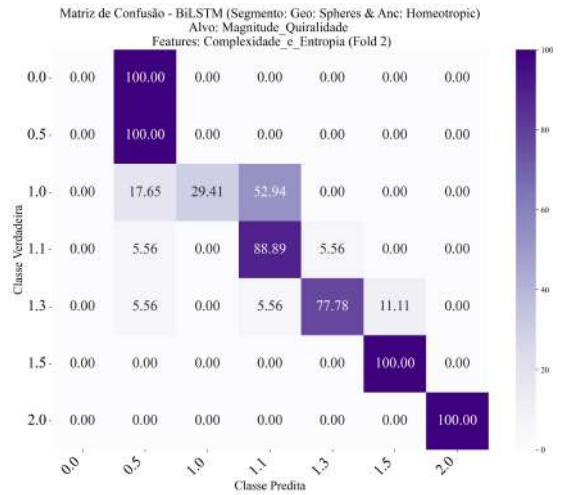
(a) Slabs & Planar (1D-CNN)



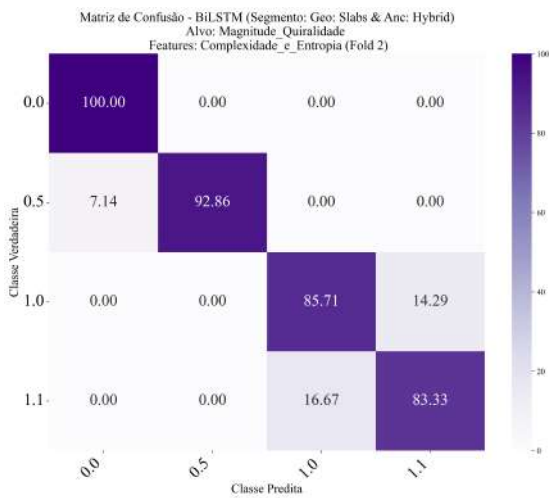
(b) Esfera & Planar (BiLSTM)



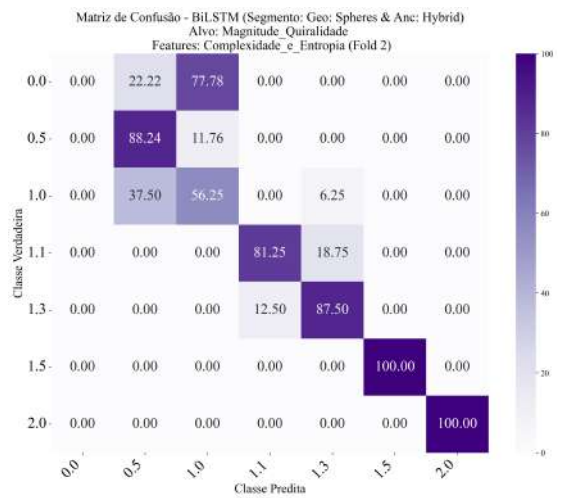
(c) Slab & Homeotrópico (BiLSTM)



(d) Esfera & Homeotrópico (BiLSTM)



(e) Slab & Híbrido (BiLSTM)



(f) Esfera & Híbrido (BiLSTM)

Figura 6.10: Matrizes de Confusão dos modelos BiLSTM e 1D-CNN aplicados a diferentes geometrias (*Slab*/Esfera) e ancoragens (Planar, Homeotrópica e Híbrida), considerando a previsão da Magnitude da Quiralidade, com H e C como *features* de entrada. Elaborado pelo autor (2025), com base nos dados da pesquisa.

ancoramento. E de maneira mais significativa, na classificação da magnitude quiral, com acurácias saltando de $\sim 68\%$ para cerca de 82% , por exemplo.

Em segundo lugar, o trabalho valida com sucesso a hipótese de que as métricas de H e C são preditores eficazes. A análise comparativa demonstrou que o uso combinado de H e C como *features* de entrada superou consistentemente o uso de parâmetros físicos tradicionais, como a média do parâmetro de ordem ou a densidade de defeitos, quando utilizados isoladamente. Isso sugere que a dinâmica, capturada por essas métricas, contém uma representação mais informativa do estado do sistema do que os próprios descritores macroscópicos.

As análises progressivas e de janela deslizante revelaram que a informação preditiva não está uniformemente distribuída ao longo da evolução temporal. Descobriu-se que o começo da simulação (primeiros 30-40%) é o período mais importante para estabelecer o estado final de ordem, a densidade de defeitos e a sua taxa de decaimento. Os dados da fase final de relaxamento para o equilíbrio se mostraram redundantes, e em alguns casos, ligeiramente prejudiciais ao desempenho, possivelmente por introduzir ruído. Além disso, a previsão do ancoramento se beneficia de dois regimes distintos: a dinâmica inicial de alta energia e a fase final de estabilização estrutural, apresentando um desempenho em formato de parábola convexa na análise de janela deslizante. Esses resultados têm implicações práticas diretas, sugerindo que simulações e experimentos podem ser significativamente otimizados, uma vez que o estado final do sistema é determinado muito antes de ele atingir o equilíbrio completo.

Sobre a previsibilidade contextual da quiralidade, a análise revelou que, embora a previsão das propriedades quirais seja desafiadora, a classificação da sua magnitude é um alvo alcançável, com acurácias de cerca de 90% em cenários segmentados. A previsibilidade da magnitude melhora, por exemplo, em condições de ancoramento (híbrido) e confinamento (esférico) que promovem maior complexidade estrutural. Isso sugere que a magnitude da torção deixa uma marca muito clara nas métricas de C e H, e que o contexto físico atua como um filtro seletivo da informação.

Por fim, análise segmentada confirmou o efeito de variáveis dominantes, mostrando que a geometria de confinamento atua como uma delas. Ao isolá-la, a tarefa de classificar o ancoramento em sistemas planos (*slabs*) tornou-se quase trivial, alcançando acurácia próxima de 100% . Inversamente, a mesma tarefa se tornou mais difícil em sistemas esféricos. Isso demonstra a forte interdependência entre as propriedades físicas e a necessidade de considerar modelos especializados para diferentes condições de contorno.

Sendo assim, esta pesquisa demonstra que a aplicação de técnicas de aprendizado profundo às séries temporais de C e H oferece um método eficiente para caracterizar e prever o comportamento de sistemas complexos. Os resultados validam a abordagem metodológica e fornecem percepções físicas sobre como e quando a informação que define o estado final de um sistema emerge de sua dinâmica temporal.

Conclusão

Nesta dissertação, foi apresentada uma abordagem para a análise e previsão da dinâmica de relaxamento em CLs nemáticos e colestéricos, combinando simulações numéricas com ferramentas da teoria da informação e aprendizado de máquina. O ponto central deste trabalho foi a utilização da evolução temporal da Complexidade Estatística (C) e da Entropia de Permutação (H) como um indicador capaz de capturar a dinâmica dos processos de auto-organização e aniquilação de defeitos. Por meio desta estrutura, demonstrou-se ser possível não apenas caracterizar os estados do sistema, mas também classificar suas condições de contorno e prever quantitativamente suas propriedades físicas finais.

As principais contribuições e respostas às questões de pesquisa levantadas por este trabalho podem ser sintetizadas nos seguintes pontos.

A primeira contribuição foi a validação das métricas da teoria da informação como descritores físicos. A análise da dinâmica no plano Complexidade-Entropia (Capítulo 5) e a subsequente análise de importância de *features* (Capítulo 6) validaram quantitativamente que C e H são descritores dinâmicos eficazes. Mais do que isso, elas capturam a essência da trajetória física do sistema de uma forma que métricas clássicas, como o parâmetro de ordem, não conseguem. O padrão em forma de arco parabólico em geometrias planas e a trajetória encurtada no plano C-H representam uma evolução limitada antes de atingir um ponto fixo; em geometrias esféricas, são exemplos de como essas métricas descrevem o caminho de relaxamento completo.

O trabalho também permitiu a caracterização de regimes dinâmicos distintos. A análise física (Capítulo 5) revelou que a geometria de confinamento é o fator dominante que dita o processo de relaxamento. Em geometrias de placas paralelas (*slabs*), o sistema exibe um relaxamento gradual, marcado por uma aniquilação progressiva de defeitos e uma evolução em forma de *corcova* na C, que representa a transição da desordem para a ordem por meio de um pico de máxima complexidade estrutural. Em contraste, o confinamento esférico impõe

restrições topológicas que forçam um *colapso* dinâmico quase instantâneo para um estado final frustrado, energeticamente estável, mas com desordem e defeitos residuais inevitáveis. Este regime é caracterizado por um pico agudo e precoce na C , que se estabiliza em um patamar elevado, quantificando a complexidade inerente ao estado final.

Demonstramos a vantagem do aprendizado profundo para sistemas complexos. A utilização de modelos de *deep learning* mostrou-se relevante para interpretar as interações não-lineares presentes na dinâmica. Enquanto modelos clássicos estabeleceram uma linha de base, as arquiteturas de redes neurais profundas ofereceram um salto de desempenho, especialmente em tarefas desafiadoras como a classificação da magnitude da quiralidade. A vantagem reside na sua capacidade de aprender automaticamente hierarquias de padrões temporais, algo que modelos clássicos não conseguem fazer. Entre as arquiteturas, modelos convolucionais (1D-CNN) e recorrentes (BiLSTM e GRU) destacaram-se consistentemente, indicando que tanto a extração de características locais quanto a modelagem de dependências sequenciais de longo alcance são importantes para compreender a dinâmica.

Uma das contribuições mais significativas deste estudo foi a localização de quando e onde a informação preditiva surge, bem como sua utilidade prática. As análises progressivas e de janela deslizante revelaram que a dinâmica inicial (primeiros 30-40%) é a mais informativa para prever o estado de equilíbrio final da maioria das propriedades. Fisicamente, isso ocorre porque é nesse intervalo inicial que a informação característica do regime de relaxamento se manifesta claramente. Isso sugere a possibilidade de desenvolver modelos substitutos que podem acelerar drasticamente a exploração de novos materiais, uma vez que não é necessário aguardar a completa relaxação de uma simulação ou experimento para prever seu resultado com alta precisão.

Ademais, foi alcançada a previsibilidade da magnitude da quiralidade. Demonstrou-se que a previsibilidade é dependente do contexto físico, sendo possível classificar a magnitude da quiralidade com alta acurácia (cerca de 90%), especialmente sob condições de ancoramento que promovem uma maior complexidade estrutural. Isso indica que as condições de contorno podem atuar como intensificadores da informação contida na dinâmica do sistema.

Finalmente, a análise demonstrou a hierarquia de influências nos sistemas. A geometria de confinamento é a variável mais dominante, enquanto o ancoramento e a quiralidade atuam como moduladores da dinâmica. A tarefa de classificar o ancoramento, por exemplo, torna-se quase trivial em geometrias planas, mas relativamente mais difícil em geometrias esféricas. Inversamente, a previsibilidade da magnitude da quiralidade aumenta em sistemas esféricos. A utilidade desta análise é fornecer um panorama da dificuldade preditiva, indicando quais problemas são mais ou menos desafiadores dependendo do contexto físico, o que pode guiar o desenvolvimento de modelos preditivos especializados e mais eficientes para cada cenário.

Apesar destes sucessos, o trabalho também evidenciou os limites da metodologia atual, especialmente na questão da dificuldade na previsão das propriedades quirais. Embora a

magnitude da torção tenha sido classificada com boa acurácia em contextos físicos específicos, a previsão geral dessas propriedades ainda representa um desafio. Isso indica que as métricas de Entropia de Permutação e Complexidade Estatística, embora capazes de quantificar a intensidade da desordem estrutural induzida pela torção, podem não capturar toda a complexidade da informação quiral.

Essa limitação não reduz a relevância dos resultados obtidos, mas os contextualiza, apontando caminhos claros para pesquisas futuras que integrem descritores topológicos ou representações de dados mais sofisticadas para decodificar completamente a complexa informação da quiralidade. Como próximos passos, a exploração de novas *features* ou representações de dados, como a análise topológica da rede de disclinações, pode ser o caminho para superar o desafio da previsão das métricas relacionadas à quiralidade. Em última análise, esta dissertação contribui com uma metodologia que integra simulação, teoria da informação e aprendizado de máquina, abrindo novos caminhos para a caracterização e o desenvolvimento acelerado de materiais de matéria mole.

Referências Bibliográficas

- [1] DiLisi, G. A. *An Introduction to Liquid Crystals*. IOP Concise Physics (Morgan Claypool Publishers, 2019).
- [2] Collings, P. J. & Goodby, J. W. *Introduction to Liquid Crystals: Chemistry and Physics* (CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL, 2020), second edn.
- [3] Mitov, M. Liquid-crystal science from 1888 to 1922: building a revolution. *Chemphyschem* **15**, 1245–1250 (2014).
- [4] Sparavigna, A. C. The earliest researches on liquid crystals. *HAL Open Science* (2019).
- [5] de Gennes, P. G. *The Physics of Liquid Crystals* (Oxford University Press, London, 1974).
- [6] Andrienko, D. Introduction to liquid crystals. *Journal of Molecular Liquids* **267**, 520–541 (2018). Special Issue Dedicated to the Memory of Professor Y. Reznikov.
- [7] Bandt, C. & Pompe, B. Permutation entropy: A natural complexity measure for time series. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 174102 (2002).
- [8] Huang, X., Shang, H. L. & Pitt, D. Permutation entropy and its variants for measuring temporal dependence. *Australian & New Zealand Journal of Statistics* **64**, 442–477 (2022).
- [9] Zanin, M., Zunino, L., Rosso, O. A. & Papo, D. Permutation entropy and its main biomedical and econophysics applications: A review. *Entropy* **14**, 1553–1577 (2012).
- [10] Henry, M. & Judge, G. Permutation entropy and information recovery in nonlinear dynamic economic time series. *Econometrics* **7** (2019).

- [11] Sigaki, H. Y. D., de Souza, R. F., de Souza, R. T., Zola, R. S. & Ribeiro, H. V. Estimating physical properties from liquid crystal textures via machine learning and complexity-entropy methods. *Phys. Rev. E* **99**, 013311 (2019).
- [12] Pessa, A. A., Zola, R. S., Perc, M. & Ribeiro, H. V. Determining liquid crystal properties with ordinal networks and machine learning. *Chaos, Solitons Fractals* **154**, 111607 (2022).
- [13] Voltarelli, L. G. J. M., Pessa, A. A. B., Zunino, L., Zola, R. S., Lenzi, E. K., Perc, M. & Ribeiro, H. V. Characterizing unstructured data with the nearest neighbor permutation entropy. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **34**, 053130 (2024).
- [14] Oxford English Dictionary. Liquid Crystal - Definition (2025).
- [15] Douglas Harper. Online Etymology Dictionary (2025).
- [16] Reinitzer, F. Beiträge zur kenntniss des cholesterins. *Monatshefte für Chemie* **9**, 421–441 (1888).
- [17] for Biotechnology Information (NCBI), N. C. *Birefringence* (National Library of Medicine (US), 2021).
- [18] DiLisi, G. A. *Oligomeric Liquid Crystals: Viscoelastic Properties and Surface Interactions*. Phd dissertation, Case Western Reserve University (1992).
- [19] S. Lakshminarayana, D. M. P. N. V. S. R., C. R. Prabhu & Pisipati, V. G. K. M. Pretransitional effects at the isotropic-mesomorphic phase transitions in the tbaa series. *Liquid Crystals* **20**, 177–182 (1996).
- [20] Brown, C. V. *Physical Properties of Nematic Liquid Crystals*, 1343–1361 (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012).
- [21] Pieraccini, S., Masiero, S., Ferrarini, A. & Spada, G. P. Chirality transfer across length-scales in nematic liquid crystals: fundamentals and applications. *Chemical Society Reviews* **40**, 258–270 (2010).
- [22] Nacke, P., Manabe, A., Klasen-Memmer, M. *et al.* New examples of ferroelectric nematic materials showing evidence for the antiferroelectric smectic-z phase. *Scientific Reports* **14**, 4473 (2024).
- [23] Karahaliou, P. K., Vanakaras, A. G. & Photinos, D. J. Symmetries and alignment of biaxial nematic liquid crystals. *The Journal of Chemical Physics* **131**, 124516 (2009).

- [24] Facility, E. S. R. Biaxial liquid crystals found in colloidal dispersions. *Spotlight on Science* (2010).
- [25] Dierking, I. Chiral liquid crystals: Structures, phases, effects. *Symmetry* **6**, 444–472 (2014).
- [26] St. John, W. D., Fritz, W. J., Lu, Z. J. & Yang, D.-K. Bragg reflection from cholesteric liquid crystals. *Phys. Rev. E* **51**, 1191–1198 (1995).
- [27] Ma, L. L., Li, C. Y., Pan, J. T. *et al.* Self-assembled liquid crystal architectures for soft matter photonics. *Light: Science & Applications* **11**, 270 (2022).
- [28] Dreher, R., Meier, G. & Saupe, A. Selective reflection by cholesteric liquid crystals. *Molecular Crystals and Liquid Crystals* **13**, 17–26 (1971).
- [29] Zhou, H., Wang, H., He, W., Yang, Z., Cao, H., Wang, D. & Li, Y. Research progress of cholesteric liquid crystals with broadband reflection. *Molecules* **27**, 4427 (2022).
- [30] Chi, H., Potomkin, M., Zhang, L. *et al.* Surface anchoring controls orientation of a microswimmer in nematic liquid crystal. *Communications Physics* **3**, 162 (2020).
- [31] DiLisi, G. A., Rosenblatt, C. S., Akins, R. B., Griffin, A. C. & Hari, U. Anchoring strength coefficient of a monomer and its dimer at a polymer-coated interface. *Liq. Cryst.* **11**, 63–71 (1992).
- [32] Martínez-Ratón, Y., Velasco, E. & Mederos, L. Effect of particle geometry on phase transitions in two-dimensional liquid crystals. *The Journal of Chemical Physics* **122**, 064903 (2005).
- [33] Zhang, R. & Wen, X. Structures and phase transition of liquid crystals in a dynamic slit confinement. *AIP Advances* **10**, 065307 (2020).
- [34] Ilnytskyi, J. M., Trokhymchuk, A. & Schoen, M. Topological defects around a spherical nanoparticle in nematic liquid crystal: Coarse-grained molecular dynamics simulations. *The Journal of Chemical Physics* **141**, 114903 (2014).
- [35] Palacio-Betancur, V., Armas-Pérez, J. C., Hernández-Ortiz, J. P. & de Pablo, J. J. Curvature and confinement effects on chiral liquid crystal morphologies. *Soft Matter* **19**, 6066–6073 (2023).
- [36] Biscari, P., Calderer, M. C. & Terentjev, E. M. Landau–de gennes theory of isotropic-nematic-smectic liquid crystal transitions. *Phys. Rev. E* **75**, 051707 (2007).
- [37] Feng, X. & Li, S. A molecular-based q-tensor hydrodynamic theory of smectic liquid crystals. *Axioms* **11** (2022).

- [38] Brazovskii, S. A. & Dmitriev, S. G. Phase transitions in cholesteric liquid crystals. *Sov. Phys. JETP* **42**, 497–504 (1975). Original in Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 979–989 (1975).
- [39] Wright, D. C. & Mermin, N. D. Crystalline liquids: the blue phases. *Rev. Mod. Phys.* **61**, 385–432 (1989).
- [40] Chaikin, P. M. & Lubensky, T. C. *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2000).
- [41] Fumeron, Sébastien & Berche, Bertrand. Introduction to topological defects: from liquid crystals to particle physics. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **232**, 1813–1833 (2023).
- [42] Wang, X., Jiang, J., Chen, J., Asilehan, Z., Tang, W., Peng, C. & Zhang, R. Moiré effect enables versatile design of topological defects in nematic liquid crystals. *Nature Communications* **15**, 1655 (2024).
- [43] Wang, X., Miller, D. S., Bukusoglu, E., de Pablo, J. J. & Abbott, N. L. Topological defects in liquid crystals as templates for molecular self-assembly. *Nature Materials* **15**, 106–112 (2016).
- [44] Aranson, I. S. Topological defects in active liquid crystals. *Physics-Uspekhi* **62**, 892 (2019).
- [45] Liu, Q., Senyuk, B., Tasinkevych, M. & Smalyukh, I. I. Nematic liquid crystal boojums with handles on colloidal handlebodies. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **110**, 9231–9236 (2013).
- [46] Chen, B. G., Alexander, G. P. & Kamien, R. D. Symmetry breaking in smectics and surface models of their singularities. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **106**, 15577–15582 (2009).
- [47] Machon, T. & Alexander, G. P. Global defect topology in nematic liquid crystals. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **472**, 20160265 (2016).
- [48] Foffano, G., Lintuvuori, J., Tiribocchi, A. & Marenduzzo, D. The dynamics of colloidal intrusions in liquid crystals: A simulation perspective. *Liquid Crystals Reviews* **2** (2014).
- [49] Pollard, J., Posnjak, G., Čopar, S., Mušević, I. & Alexander, G. P. Point defects, topological chirality, and singularity theory in cholesteric liquid-crystal droplets. *Physical Review X* **9**, 021004 (2019).

- [50] Modin, A., Ash, B., Ishimoto, K., Leheny, R. L., Serra, F. & Aharoni, H. Tunable three-dimensional architecture of nematic disclination lines. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **120**, e2300833120 (2023).
- [51] Chien, L.-C., Coles, H. J., Kikuchi, H., Smalyukh, I. I., Čančula, M., Ravnik, M. & Žumer, S. Nematic topological line defects as optical waveguides. In *Emerging Liquid Crystal Technologies X*, vol. 9384 of *SPIE Proceedings*, 938402 (SPIE, San Francisco, California, United States, 2015).
- [52] Liang, D., Ma, X. & Huang, H. Phase-field model of topological charge interaction force in nematic liquid crystals. *Soft Materials* **19**, 382–387 (2021).
- [53] Biscari, P. & Sluckin, T. J. Expulsion of disclinations in nematic liquid crystals. *European Journal of Applied Mathematics* **14** (2003).
- [54] Alama, S., Bronsard, L. & Golovaty, D. Thin film liquid crystals with oblique anchoring and boojums. *Annales de l’Institut Henri Poincaré C, Analyse non linéaire* **37**, 817–853 (2020).
- [55] Ilg, P. Enhanced landau–de gennes potential for nematic liquid crystals from a systematic coarse-graining procedure. *Phys. Rev. E* **85**, 061709 (2012).
- [56] Majumdar, A. Equilibrium order parameters of nematic liquid crystals in the landau–de gennes theory. *European Journal of Applied Mathematics* **21**, 181–203 (2010).
- [57] Sussman, D. M. & Beller, D. A. Fast, scalable, and interactive software for landau–de gennes numerical modeling of nematic topological defects. *Frontiers in Physics* **7**, 204 (2019).
- [58] Longa, L., Monselesan, D. & Trebin, H.-R. An extension of the landau–ginzburg–de gennes theory for liquid crystals. *Liquid Crystals* **2**, 769–796 (1987).
- [59] Willman, E., Fernandez, F. A., James, R. & Day, S. E. Modeling of weak anisotropic anchoring of nematic liquid crystals in the landau–de gennes theory. *IEEE Transactions on Electron Devices* **54**, 2630–2637 (2007).
- [60] Alexe-Ionescu, A. L., Barbero, G. & Komitov, L. Surface energy of a nematic liquid crystal in contact with structured surfaces. *Phys. Rev. E* **80**, 021701 (2009).
- [61] Walton, J., Mottram, N. J. & McKay, G. Nematic liquid crystal director structures in rectangular regions. *Phys. Rev. E* **97**, 022702 (2018).
- [62] Bartels, S. & Raisch, A. *Simulation of Q-Tensor Fields with Constant Orientational Order Parameter in the Theory of Uniaxial Nematic Liquid Crystals*, 383–412 (Springer International Publishing, Cham, 2014).

- [63] Nestler, M., Nitschke, I., Löwen, H. & Voigt, A. Properties of surface landau–de gennes Q -tensor models. *Soft Matter* **16**, 4032–4042 (2020).
- [64] Surowiec, T. M. & Walker, S. W. Optimal control of the landau–de gennes model of nematic liquid crystals. *SIAM Journal on Control and Optimization* **61**, 2546–2570 (2023).
- [65] Kitavtsev, G., Robbins, J. M., Slastikov, V. & Zarnescu, A. Liquid crystal defects in the landau–de gennes theory in two dimensions — beyond the one-constant approximation. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* **26**, 2769–2808 (2016).
- [66] Han, Y., Harris, J., Majumdar, A. & Zhang, L. Elastic anisotropy in the reduced landau-de gennes model. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **478**, 20210966 (2022).
- [67] de Souza, R., Omori, E. & Zola, R. Marlics: A finite difference liquid crystal simulation package. *Computer Physics Communications* **277**, 108379 (2022).
- [68] Weck, P. J., Schaffner, D. A., Brown, M. R. & Wicks, R. T. Permutation entropy and statistical complexity analysis of turbulence in laboratory plasmas and the solar wind. *Phys. Rev. E* **91**, 023101 (2015).
- [69] Nardone, P. & Sonnino, G. Entropy of difference: A new tool for measuring complexity. *Axioms* **13** (2024).
- [70] Ribeiro, H. V., Zunino, L., Lenzi, E. K., Santoro, P. A. & Mendes, R. S. Complexity-entropy causality plane as a complexity measure for two-dimensional patterns. *PLOS ONE* **7**, 1–9 (2012).
- [71] Traversaro, F., Redelico, F. O., Risk, M. R., Frery, A. C. & Rosso, O. A. Bandt-pompe symbolization dynamics for time series with tied values: A data-driven approach. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **28**, 075502 (2018).
- [72] Pessa, A. A. B. & Ribeiro, H. V. ordpy: A python package for data analysis with permutation entropy and ordinal network methods. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science* **31**, 063110 (2021).
- [73] Tschierske, C. Development of structural complexity by liquid-crystal self-assembly. *Angewandte Chemie International Edition* **52**, 8828–8878 (2013).
- [74] Wang, W., Zhang, L. & Zhang, P. Modelling and computation of liquid crystals. *Acta Numerica* **30**, 765–851 (2021).

- [75] Mermin, N. D. The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.* **51**, 591–648 (1979).
- [76] Denniston, C. Theory and simulation of objects in liquid crystals. *Advances in Physics: X* **5**, 1806728 (2020).
- [77] Mitchell, M. *Complexity: A Guided Tour* (Oxford University Press, 2009).
- [78] Krekhov, A., Dressel, B., Pesch, W., Delev, V. & Batyrshin, E. Spatiotemporal complexity of electroconvection patterns in nematic liquid crystals. *Phys. Rev. E* **92**, 062510 (2015).
- [79] Byeon, H. *supervised learning algorithms - classification and regression algorithms* (Xoffencer International Book Publication House, 2023).
- [80] Jiang, T., Gradus, J. L. & Rosellini, A. J. Supervised machine learning: A brief primer. *Behavior therapy* **51**, 675–687 (2020).
- [81] Liaw, A. & Wiener, M. Classification and regression by randomforest. *R News* **2**, 18–22 (2002).
- [82] Kumar, S. & Bhatnagar, V. A review of regression models in machine learning. *Journal of Intelligent Systems and Computing* **3**, 40–47 (2022).
- [83] Norwawi, N. M. Sliding window time series forecasting with multilayer perceptron and multiregression of covid-19 outbreak in malaysia. In *Data Science for COVID-19*, 547–564 (Academic Press, 2021).
- [84] Wang, J., Jiang, W., Li, Z. & Lu, Y. A new multi-scale sliding window lstm framework (mssw-lstm): A case study for gnss time-series prediction. *Remote Sensing* **13** (2021).
- [85] Hota, H. S., Handa, R. & Shrivastava, A. K. Time series data prediction using sliding window based rbf neural network. *International Journal of Computational Intelligence Research* **13**, 1145–1156 (2017).
- [86] Kulanuwat, L., Chantrapornchai, C., Maleewong, M., Wongchaisuwat, P., Wimala, S., Sarinnapakorn, K. & Boonya-aroonnet, S. Anomaly detection using a sliding window technique and data imputation with machine learning for hydrological time series. *Water* **13** (2021).
- [87] Awais, M., Bin Iqbal, M. T. & Bae, S.-H. Revisiting internal covariate shift for batch normalization. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* **32**, 5082–5092 (2021).

- [88] Xu, J., Sun, X., Zhang, Z., Zhao, G. & Lin, J. Understanding and improving layer normalization. In Wallach, H., Larochelle, H., Beygelzimer, A., d'Alché-Buc, F., Fox, E. & Garnett, R. (eds.) *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 32 (Curran Associates, Inc., 2019).
- [89] Desjardins, G., Simonyan, K., Pascanu, R. & kavukcuoglu, k. Natural neural networks. In Cortes, C., Lawrence, N., Lee, D., Sugiyama, M. & Garnett, R. (eds.) *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 28 (Curran Associates, Inc., 2015).
- [90] Tealab, A. Time series forecasting using artificial neural networks methodologies: A systematic review. *Future Computing and Informatics Journal* **3**, 334–340 (2018).
- [91] Abiodun, O. I., Jantan, A., Omolara, A. E., Dada, K. V., Mohamed, N. A. & Arshad, H. State-of-the-art in artificial neural network applications: A survey. *Heliyon* **4**, e00938 (2018).
- [92] Graves, A., Fernández, S. & Schmidhuber, J. Bidirectional lstm networks for improved phoneme classification and recognition. In Duch, W., Kacprzyk, J., Oja, E. & Zadrozny, S. (eds.) *Artificial Neural Networks: Formal Models and Their Applications – ICANN 2005*, 799–804 (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005).
- [93] Gao, Y. & Glowacka, D. Deep gate recurrent neural network. In Durrant, R. J. & Kim, K.-E. (eds.) *Proceedings of The 8th Asian Conference on Machine Learning*, vol. 63 of *Proceedings of Machine Learning Research*, 350–365 (PMLR, The University of Waikato, Hamilton, New Zealand, 2016).
- [94] van den Hoogen, J. *Time Series Analysis Using Convolutional Neural Networks*. Ph.D. thesis, Tilburg University (2025).
- [95] Rivera-Ruiz, M., Juárez-Osorio, S., Mendez-Vazquez, A., Lopez Romero, M. & Rodriguez-Tello, E. 1d quantum convolutional neural network for time series forecasting and classification. In Mishra, B. K., De, S. & Kumar, M. (eds.) *Quantum Machine Learning*, 17–35 (Springer, Cham, 2023).
- [96] Cacciari, I. & Ranfagni, A. Hands-on fundamentals of 1d convolutional neural networks—a tutorial for beginner users. *Applied Sciences* **14**, 8500 (2024).
- [97] Lu, P., Sun, A., Xu, M., Wang, Z., Zheng, Z., Xie, Y. & Wang, W. A time series image prediction method combining a cnn and lstm and its application in typhoon track prediction. *Mathematical Biosciences and Engineering* **19**, 12260–12278 (2022).
- [98] Xue, N., Triguero, I., Figueredo, G. P. & Landa-Silva, D. Evolving Deep CNN-LSTMs for Inventory Time Series Prediction. In *2019 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, 1517–1524 (2019).

- [99] Alnuaimi, A. & Albaldawi, T. An overview of machine learning classification techniques. *BIO Web of Conferences* **97**, 00133 (2024).
- [100] Hicks, S. A., Strümke, I., Thambawita, V., Hammou, M., Riegler, M. A., Halvorsen, P. & Parasa, S. On evaluation metrics for medical applications of artificial intelligence. *Scientific Reports* **12**, 5979 (2022).
- [101] Powers, D. M. W. Evaluation: From precision, recall and f-factor to roc, informedness, markedness & correlation. *Journal of Machine Learning Technologies* **2**, 37–63 (2008).
- [102] Rainio, O., Teuho, J. & Klén, R. Evaluation metrics and statistical tests for machine learning. *Scientific Reports* **14**, 6086 (2024).
- [103] Plevris, V., Solorzano, G., Bakas, N. & Ben Seghier, M. Investigation of performance metrics in regression analysis and machine learning-based prediction models. In Engsig-Karup, A. P., Hesthaven, J. S., Jørgensen, J. B. & Sigmund, O. (eds.) *ECCOMAS Congress 2022 - 8th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering* (2022).
- [104] Kamien, R. D. The geometry of soft materials: a primer. *Reviews of Modern physics* **74**, 953 (2002).
- [105] Biagio, R. L., Souza, R. T., Evangelista, L. R. & Zola, R. S. Frustrated structures and pattern formation after thermal quenches in cholesteric liquid crystal droplets. *J. Mater. Chem. C* **9**, 8623–8639 (2021).

Hiperparâmetros dos Modelos de Aprendizado de Máquina

Este apêndice detalha os hiperparâmetros utilizados para os modelos de aprendizado de máquina empregados nas tarefas de classificação e regressão, conforme descrito nos Capítulos 5 e 6.

Para os modelos de linha de base (*Random Forest* e *K-NN*), foi empregada uma busca em grade (*Grid Search*) com validação cruzada para otimização. Para as arquiteturas de aprendizado profundo, foram adotados conjuntos de hiperparâmetros fixos, definidos com base em testes preliminares. As Tabelas A.1 e A.2 resumem essas configurações.

Tabela A.1: Hiperparâmetros explorados para os Modelos de Linha de Base.

Modelo	Parâmetro	Faixa de Valores Utilizada
Dummy (Referência)	strategy	'stratified' (Classificação) 'mean' (Regressão)
<i>Random Forest</i>	n_estimators	[50, 100]
	max_depth	[10, 20]
<i>K-Nearest Neighbors</i>	n_neighbors	[3, 5, 7, 12]
	weights	['uniform', 'distance']

Tabela A.2: Arquitetura e Hiperparâmetros dos Modelos de Aprendizado Profundo.

Modelo	Parâmetro	Valor Utilizado
1D-CNN	Filtros Conv. 1	64
	Kernel Conv. 1	3
	Filtros Conv. 2	128
	Kernel Conv. 2	3
	Unidades Densas	200
	Dropout	0.5
	Regularização L2	1e-3
	Taxa de Aprendizado	1e-3
LSTM	Unidades LSTM 1	64
	Dropout 1	0.4
	Unidades LSTM 2	64
	Dropout 2	0.5
	Unidades Densas	64
	Taxa de Aprendizado	1e-3
BiLSTM	Unidades BiLSTM 1	64
	Dropout 1	0.4
	Unidades BiLSTM 2	64
	Dropout 2	0.5
	Unidades Densas	64
	Taxa de Aprendizado	1e-3
GRU	Unidades GRU 1	64
	Dropout 1	0.4
	Unidades GRU 2	64
	Dropout 2	0.5
	Unidades Densas	64
	Taxa de Aprendizado	1e-3
CNN-LSTM	Filtros Conv.	64
	Kernel Conv.	3
	Unidades LSTM	64
	Dropout	0.5
	Unidades Densas	64
	Taxa de Aprendizado	1e-3
TCN	Nº de Filtros	64
	Tamanho do Kernel	3
	Nº de Stacks	1
	Dropout	0.2
	Taxa de Aprendizado	1e-3