



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Centro de Ensino de Graduação em Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

MARCOS ANDRÉ ARAÚJO DE SOUSA

**ANÁLISE MULTIFRACTAL DA TRANSIÇÃO DE FASE DO MODELO XY
BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL**

RECIFE, PE

2025

MARCOS ANDRÉ ARAÚJO DE SOUSA

ANÁLISE MULTIFRACTAL DA TRANSIÇÃO DE FASE DO MODELO XY
BIDIMENSIONAL E TRIDIMENSIONAL

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Aduino José Ferreira de Souza

RECIFE, PE

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE
Bibliotecário(a): Auxiliadora Cunha – CRB-4 1134

S725a Sousa, Marcos André Araújo de.
Análise multifractal da transição de fase do modelo XY bidimensional e tridimensional / Marcos André Araújo de Sousa. – Recife, 2025.
68 f.; il.

Orientador(a): Aduino José Ferreira de Souza.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, BR-PE, 2025.

Inclui referências e apêndice(s).

1. Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA).
2. Modelo XY. 3. Transição de Fase. I. Souza, Aduino José Ferreira de, orient. II. Título

CDD 621

AGRADECIMENTOS

Como homem de fé, agradeço primeiramente a Deus e, como já é esperado, aqui neste espaço reservo agradecimento privilegiado a meus pais, Jean e Islândia, cujo é redundante dizer que sem eles não conseguiria nada que conquistei, foi através de seus esforços e subsídios que cheguei tão longe. Agradeço também a meus irmãos caçulas Carlos Daniel e Pedro Lucas, cuja companhia trouxe momentos de leveza e descontração durante esse período e me fizeram recarregar as energias para continuar. Além de agradecer a todos os meus familiares, também peço desculpas pelas vezes que, neste período, não pude estar presente em muitas das confraternizações, justamente pelo tempo que fiquei fora do meu estado natal, Piauí, para dedicar à minha formação.

Um agradecimento especial vai para todos aqueles que se tornaram minha família de Recife, em particular os integrantes e agregados do LaSCoU: João (Mago) com seus planos, Laíse com seu carinho e afeto, Matheus (Imosec) com seu companheirismo, Ruan (Osama) juntamente com sua amada Amanda, José Dias (Zedia) com sua serenidade, Thiago com seus conselhos, Pedro com suas ideias ruins, Diego, Luidje (Sherloco), Lucas (Maranhão), Laedson, Nallyson, Luis (o Ocultador), Mário, Yago, Matheus (Tanjiro) com seu laudo, Rodrigo (Belisca) que certamente está me devendo e Antônio (Toinho)... depois eu pago uma cerveja pra você. Todos, cada um com seu papel, tornaram esta caminhada mais leve e gratificante. Graças a vocês, já não há mais razão pra solidão, pois seja numa noite de luar ou na manhã de um domingo à beira-mar, sei que dirão sim pra mim quando eu precisar.

Não poderia deixar de expressar minha gratidão ao meu orientador, Adauto Souza. Suas orientações, sempre instrutivas, transformaram temas complexos em algo compreensível e fascinante, fortalecendo não só minha admiração pela beleza da Física, em especial à estatística, como também à sua destreza em ensinar. O homem é a enciclopédia do CEGEN!

Agradeço ainda aos demais colegas e professores da UFRPE, com quem tive o privilégio de conviver ao longo dessa trajetória. Foram inúmeras as experiências e os conhecimentos compartilhados, que enriqueceram não apenas minha vida acadêmica, mas também minha vida pessoal.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para esta conquista, obrigado!

“Por sermos pequenos e frágeis, somos únicos e preciosos, agregados raros de átomos inanimados capazes de refletir sobre a nossa própria existência.”

(Marcelo Gleiser)

RESUMO

Este trabalho investiga a multifractalidade e as correlações de longo alcance nos observáveis do módulo de magnetização e módulo helicidade dos modelos XY bidimensional (XY2D) e tridimensional (XY3D), utilizando a técnica *Multifractal Detrended Fluctuation Analysis* (MF-DFA). O modelo quadrático, conhecido por sua singular transição de fase topológica de Kosterlitz-Thouless, apresenta características únicas que o diferenciam de sistemas estatísticos clássicos, tornando-o especialmente relevante para análise fractal. A análise comparativa revelou diferenças significativas na dinâmica multifractal entre os dois modelos. No XY2D, uma multifractalidade acentuada foi identificada na região crítica, incluindo a magnetização, um parâmetro frequentemente negligenciado no contexto de transições de fase. Já no XY3D, observou-se uma multifractalidade menos pronunciada, associada a uma transição de fase convencional com comportamentos críticos mais localizados. Os resultados demonstram que os expoentes multifractais, $H(q)$, são sensíveis e eficazes na distinção entre transições de fase topológicas e convencionais, evidenciando a capacidade do MF-DFA de capturar dinâmicas críticas em sistemas complexos. Conclui-se que o MF-DFA é uma ferramenta robusta e promissora para a análise de propriedades fractais e correlações de longo alcance, com potencial para aplicações em diversos sistemas emergentes. Este método oferece um arcabouço poderoso para explorar fenômenos críticos em múltiplos campos de estudo, ampliando a compreensão das transições de fase e das dinâmicas associadas.

Palavras-chaves: Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA). Modelo XY. Transição de Fase.

ABSTRACT

This study investigates multifractality and long-range correlations in the observables magnetization module and helicity module of two-dimensional (XY2D) and three-dimensional (XY3D) XY models using the *Multifractal Detrended Fluctuation Analysis* (MF-DFA) technique. The XY2D model, known for its unique Kosterlitz-Thouless topological phase transition, exhibits distinct features that differentiate it from classical statistical systems, making it particularly relevant for fractal analysis. A comparative analysis revealed significant differences in multifractal dynamics between the two models. In the XY2D model, pronounced multifractality was identified in the critical region, including in the magnetization, a parameter often overlooked in the context of phase transitions. In contrast, the XY3D model exhibited less pronounced multifractality, associated with a conventional phase transition characterized by more localized critical behaviors. The results demonstrate that the multifractal exponents, $H(q)$, are sensitive and effective in distinguishing between topological and conventional phase transitions, highlighting the capability of MF-DFA to capture critical dynamics in complex systems. It is concluded that MF-DFA is a robust and promising tool for analyzing fractal properties and long-range correlations, with potential applications in various emergent systems. This method provides a powerful framework for exploring critical phenomena across multiple fields of study, enhancing the understanding of phase transitions and associated dynamics.

Key-words: *Multifractal Detrended Fluctuation Analysis* (MF-DFA). XY Model. Phase Transition.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Exemplos de fractais: (a) Floco de neve capturado por microscópio (KREBS; MYHRVOLD et al., 2021); (b) Conjunto de Mandelbrot, gerado computacionalmente a partir de equações no plano complexo; (c) Atrator de Lorenz, fractal obtido pela resolução de um sistema de equações diferenciais que descrevem sistemas dinâmicos caóticos; (d) Série temporal do preço do Bitcoin (2017-2022), que exhibe características fractais na análise de sua dinâmica.	12
Figura 2 – Comportamento característico da Magnetização M em uma transição de fase de Primeira e Segunda Ordem	18
Figura 3 – Estrutura do Modelo de Ising Bidimensional	20
Figura 4 – Estrutura do Modelo XY Bidimensional.	22
Figura 5 – Exemplo de vórtice (círculo azul) e antivórtice (círculo vermelho) presentes no modelo XY bidimensional.	22
Figura 6 – Estrutura do Modelo XY Tridimensional.	23
Figura 7 – Configuração antes (a) e depois (b) da inversão de spin. Em destaque o spin σ_i , escolhido aleatoriamente no passo 1 do algoritmo de Metropolis, e os spins adjacentes σ_j	25
Figura 8 – Séries Temporais da Magnetização no Modelo de Ising, com $T = 1.2$, em uma rede quadrada de diferentes larguras L	26
Figura 9 – Séries Temporais da Magnetização no Modelo de Ising, após tempo de relaxação, em uma rede quadrada com $L = 100$	27
Figura 10 – Simulação do Modelo de Ising Bidimensional com $L = 250$, a) $T = 1.75$ b) $T = 3.0$	27
Figura 11 – Magnetização calculada para duas redes de Ising $T = 2.269$, submetidos a mesma semente de números aleatórios, iniciando com configurações quase idênticas, diferenciadas por um único "dano".	28
Figura 12 – Séries Temporais da Magnetização do Modelo XY 2D, para várias temperaturas, com $L = 32$	31
Figura 13 – Séries Temporais da Magnetização do Modelo XY 2D, com $T = 0.2$, após tempo de relaxação	31
Figura 14 – Séries temporais do Módulo de Helicidade do Modelo XY 2D, com $L = 512$ após o tempo de relaxação, para diferentes temperaturas.	32
Figura 15 – Simulação do Modelo XY 2D, $L = 250, T = 0.04$	32
Figura 16 – Subtração da série temporal pela média	34
Figura 17 – Acomodação da série em $2N_s$ caixas, em destaque o excedente de tamanho s_x .	36
Figura 18 – Série original e a resultante após o Passo 5, com ajuste polinomial de grau 3, com divisão em caixas de tamanho a)400 b)2000	36

Figura 19 – Valores de $\log[F(s)]$ calculados de um movimento browniano fracionado com $H = 0.75$, a partir de uma disposição de caixas s em intervalo (a) linear uniforme e (b) logarítmico com seu respectivo ajuste linear no gráfico log-log.	37
Figura 20 – Distribuições de probabilidade dos deslocamentos finais, de 100000 caminhantes, em uma caminhada aleatória unidimensional para diferentes tamanhos de caminhada N . O colapso, através do reescalonamento pelo fator N^α , evidencia a invariância de escala característica de um <i>random walk</i>	38
Figura 21 – Exemplos de Séries Temporais e seus respectivos Expoentes de Hurst em destaque	39
Figura 22 – a) Caminhada aleatória em 2 Dimensões. b) Distância r do caminhante à origem, passo a passo. c) Valores dos incrementos da caminhada, passo a passo. d) Função de Flutuação $F(s)$ e valores dos expoentes de Hurst retirados das séries temporais “b” e “d”.	40
Figura 23 – Função de Flutuação $F_q(s)$ para alguns q 's, em escala log-log	41
Figura 24 – Comportamento de uma série Monofractal x Multifractal a partir do a) $H(q)$ b) $f(\alpha)$	42
Figura 25 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c , para diferentes ordens q	46
Figura 26 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q	47
Figura 27 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização do modelo XY em 3 dimensões, para diferentes temperaturas relativas T/T_c	47
Figura 28 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização do modelo XY em 2 dimensões, para diferentes temperaturas relativas T/T_c	48
Figura 29 – Largura do espectro de singularidade W , obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c	48
Figura 30 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade do modelo XY em 2 dimensões, para diferentes temperaturas relativas $T = T_c$	49
Figura 31 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade do modelo XY em 3 dimensões, para diferentes temperaturas relativas $T = T_c$	49
Figura 32 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q	50

Figura 33 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q	50
Figura 34 – Largura do espectro de singularidade W , obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c	51
Figura 35 – Função de Flutuação $F_q(s)$ para alguns q 's, em escala log-log. Obtido a partir de uma série temporal do Módulo de Helicidade do modelo XY2D a $T = 0.49$	51
Figura 36 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	58
Figura 37 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Energia para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões.	59
Figura 38 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Energia para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões.	59
Figura 39 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	60
Figura 40 – Largura do espectro de singularidade W da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c	60
Figura 41 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	61
Figura 42 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Magnetização para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões.	62
Figura 43 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Magnetização para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões.	62
Figura 44 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	63
Figura 45 – Largura do espectro de singularidade W da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c	63
Figura 46 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	64

Figura 47 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizados obtidos a partir da média de diferentes quantidades de séries temporais: (a) considerando uma única série temporal, (b) com a média de 5 séries temporais, (c) com a média de 10 séries temporais, e (d) com a média de 20 séries temporais.	65
Figura 48 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Helicidade para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões. . . .	65
Figura 49 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Helicidade para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões. . . .	66
Figura 50 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.	66
Figura 51 – Largura do espectro de singularidade W da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c	67

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	MODELOS DE SPIN E TRANSIÇÃO DE FASE	16
2.1	Transição de Fase	17
2.2	Modelo de Ising	20
2.3	Modelo XY	21
3	ALGORITMO DE METROPOLIS	24
3.1	O algoritmo	24
3.2	Aplicando algoritmo no Modelo de Ising	25
3.2.1	Resultados do Algoritmo no Modelo de Ising	26
3.3	Aplicando Algoritmo no Modelo XY	29
3.3.1	Resultados do Algoritmo no Modelo XY	30
4	MULTIFRACTAL DETRENDED FLUCTUATION ANALYSIS (MF-DFA) 33	33
4.1	Detrended Fluctuation Analysis (DFA)	33
4.1.1	Função de autocorrelação	34
4.1.2	Método DFA	35
4.1.3	Discussões sobre o expoente α	38
4.2	Método MF-DFA	40
4.3	Discussões Sobre o Expoente de Hurst Generalizado	41
5	METODOLOGIA	44
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	46
6.1	Magnetização	46
6.2	Módulo de Helicidade	49
7	CONCLUSÕES	52
	REFERÊNCIAS	54
	APÊNDICE A – ENERGIA	58
	APÊNDICE B – MAGNETIZAÇÃO	61
	APÊNDICE C – MÓDULO DE HELICIDADE	64

1 INTRODUÇÃO

Dentre os fenômenos contemplados pela física, poucos rivalizam em harmonia visual com o processo de formação dos flocos de neve. Sua estrutura complexa e autossimilar encapsula a essência da beleza geométrica que emerge de processos dinâmicos. Curiosamente, a mesma lógica que organiza os cristais de gelo rege inúmeros outros fenômenos complexos, como as séries temporais de mercados financeiros. Assim como na formação do floco de neve, em que pequenas variações nas condições de temperatura, pressão ou disposição molecular produzem padrões únicos, no mercado financeiro, um microagente econômico pode alterar a dinâmica do sistema, contribuindo para mudanças significativas no comportamento do mercado.

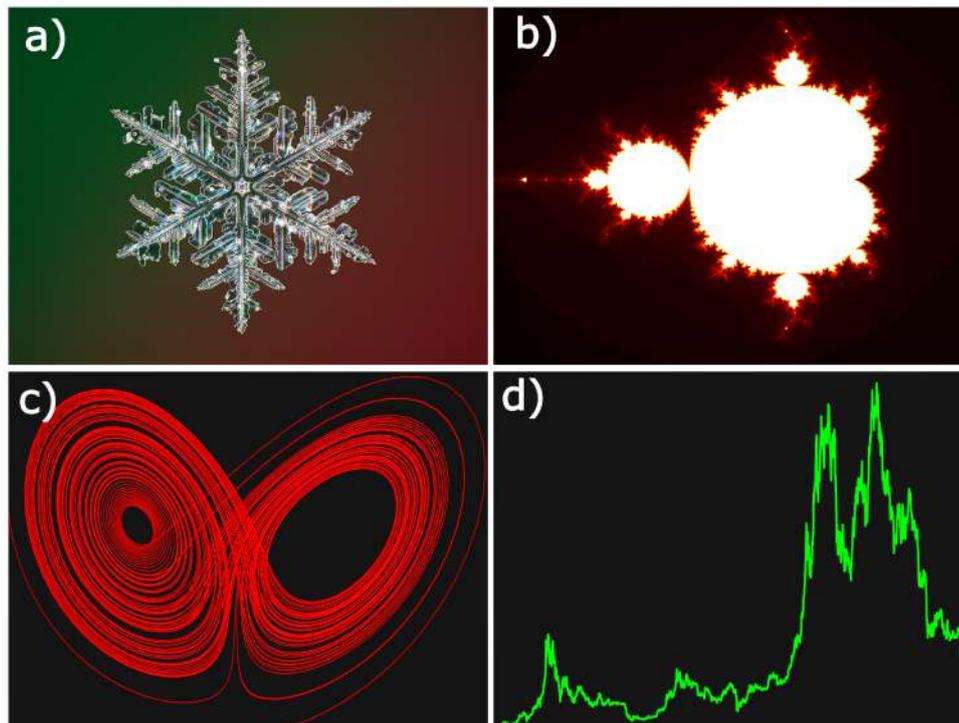
O corpo humano é uma amostra viva de como pequenas partes de um conjunto podem dar origem a estruturas complexas. O cérebro, por exemplo, é composto por bilhões de neurônios interconectados por sinapses, interações aparentemente simples, mas que sustentam funções cognitivas sofisticadas e dão origem a algo tão abstrato quanto a consciência (NUNEZ, 2012). Ao reconhecer que toda matéria é formada por átomos, surge então uma cadeia de complexidade: átomos constituem os neurônios, os quais estruturam o cérebro — a sede daquilo que se compreende como "ser". O aspecto mais fascinante disso é o pensamento paradoxal que reside no fato de que um "ser", composto por blocos fundamentais inconscientes, seja capaz de refletir e ponderar inclusive sobre a ausência de consciência das partes que formam sua própria existência. Como dito por Marcelo Gleiser, "por sermos pequenos e frágeis, somos únicos e preciosos, agregados de átomos inanimados capazes de reflexão" (GLEISER, 2014).

Assim é a natureza, constituída por sistemas complexos, como os mencionados, que apresentam padrões globais desafiadores para a compreensão convencional devido à sua irregularidade, auto-organização e comportamentos emergentes. Eles possuem a notável capacidade de se organizar espontaneamente, gerando estruturas globais exclusivamente a partir das interações locais entre seus elementos, sem a necessidade de um controlador externo. Para descrever e analisar a complexidade e a dinâmica desses fenômenos, destacam-se dois conceitos: *fractalidade* e *multifractalidade*.

A fractalidade, derivada do latim *fractus*, que significa "irregular" ou "quebrado", se refere à presença de padrões autossemelhantes que se repetem em diferentes escalas, comportamento esse que pode ser quantificado por um expoente de escala. Dessa forma, cada parte de uma estrutura fractal mantém similaridade com a figura completa, independentemente do nível de ampliação. Essa característica se manifesta tanto em sistemas naturais (como orlas costeiras, raios, galhos de árvores, ramos de flocos de neve ou brônquios dos pulmões), quanto em modelos matemáticos (como os conjuntos de Cantor, Mandelbrot e Julia), alguns retratados na Figura 1. Esse conceito revolucionou a análise geométrica ao introduzir a noção de dimensão fractal, uma medida que ultrapassa as dimensões inteiras tradicionais, capturando a complexidade de formas

irregulares que preenchem o espaço de forma fragmentada. Porém, o conceito de fractalidade vai além do estudo de estruturas geométricas: uma característica basilar de fractais reside na capacidade de evidenciar como pequenas alterações locais podem desencadear mudanças globais em sistemas não lineares, onde eventos futuros estão intrincados às flutuações passadas.

Figura 1 – Exemplos de fractais: (a) Floco de neve capturado por microscópio (KREBS; MYHRVOLD et al., 2021); (b) Conjunto de Mandelbrot, gerado computacionalmente a partir de equações no plano complexo; (c) Atrator de Lorenz, fractal obtido pela resolução de um sistema de equações diferenciais que descrevem sistemas dinâmicos caóticos; (d) Série temporal do preço do Bitcoin (2017-2022), que exibe características fractais na análise de sua dinâmica.



Essa propriedade, conhecida como correlação de longo alcance, é fundamental para revelar padrões subjacentes e, em muitos casos, anteceder comportamentos futuros. Tal abordagem encontra ampla aplicação em diversas áreas do conhecimento, especialmente no contexto de estudo de séries temporais. Na climatologia, por exemplo, é utilizada para compreender correlações entre eventos de chuvas intensas e mudanças climáticas globais (LOVEJOY; SCHERTZER, 2018). Na economia, auxilia na análise de flutuações e tendências dos mercados financeiros (MANDELBROT; HUDSON, 2010). Já na geofísica, é empregada para estudar padrões sísmicos, contribuindo para a compreensão de processos tectônicos e a previsão de terremotos (TURCOTTE, 1997). Independentemente do contexto, a análise das autocorrelações desempenha um papel essencial na caracterização da dinâmica de sistemas complexos. Uma das principais formas de quantificá-las é por meio do expoente de Hurst (H).

O expoente que leva o nome de Harold Edwin Hurst foi introduzido em seus estudos pioneiros sobre as propriedades hidrológicas do rio Nilo. Ele dedicou-se a determinar o tamanho

da "barragem ideal" para regular o fluxo do rio Nilo. Essa barragem deveria ser capaz de garantir um suprimento de água confiável durante períodos de seca prolongada, além de prevenir inundações em épocas de cheias. O desafio consistia nas flutuações significativas do fluxo do rio, que, conforme registros históricos, apresentavam ciclos de seca e cheia com durações que podiam se estender por décadas. O objetivo era fornecer estimativas confiáveis do comportamento de longo prazo do fluxo do rio, permitindo o planejamento de uma barragem que equilibrasse adequadamente as necessidades de armazenamento de água e a mitigação de riscos. Hurst identificou que as flutuações no fluxo do rio não eram completamente aleatórias, mas apresentavam padrões de longa memória, onde as tendências passadas influenciavam o comportamento futuro por períodos prolongados. O impacto de suas observações ultrapassou a hidrologia, estimulando investigações em diversas áreas científicas e contribuindo para o desenvolvimento do conceito de memória longa e persistência em séries temporais (GRAVES et al., 2017).

Entretanto, muitos casos do mundo real não podem ser descritos por um único expoente de escala, por exemplo, uma série temporal pode ser composta por duas metades que são formadas por dois expoentes de escala diferentes, ou ainda, pode dispor de inúmeros comportamentos de escala distintos e sobrepostos. Esses sistemas apresentam propriedades que variam de forma não homogênea e seguem relações de escala em diversas ordens de grandeza, exigindo uma abordagem mais abrangente: a multifractalidade. Esse conceito estende a ideia de fractalidade ao incorporar um espectro contínuo de expoentes de escala, como o apresentado pelo expoente de Hurst generalizado ($H(q)$), que mede a persistência de diferentes amplitudes de flutuação da série temporal, a partir do parâmetro q , o qual enfatiza diferentes momentos estatísticos. Isso permite a análise de singularidades presentes, por exemplo, em transições de fase, onde as interações entre elementos do sistema geram comportamentos mais complexos conforme se aproximam do ponto crítico.

Um dos estudos pioneiros sobre transição de fase, ocorreu em 1869 na primeira publicação de uma observação de ponto crítico. Thomas Andrews notou uma localidade peculiar no plano Pressão-Temperatura do dióxido de carbono, onde as propriedades do líquido e do vapor tornam-se indistinguíveis (PELISSETTO; VICARI, 2002). Essa evidência mostra como transições de fase frequentemente implicam numa reorganização estrutural que provoca mudanças significativas nos padrões globais (macroscópicos) do sistema. Essas alterações podem ser analisadas de forma eficaz por meio de uma análise multifractal aplicada às séries temporais das grandezas macroscópicas associadas, permitindo uma caracterização detalhada de suas respectivas flutuações. Por exemplo, em mercados financeiros, períodos de alta volatilidade podem ser interpretados como transições de fase, nas quais as interações entre agentes econômicos ou períodos de euforia provocam alterações drásticas no comportamento coletivo. De maneira semelhante, sistemas físicos com capacidade de reorganização, como fluidos ou materiais magnéticos em transição de estado, frequentemente exibem correlações que possuem características multifractais.

A compreensão das transições de fase, especialmente em sistemas complexos, pode ser aprofundada por meio de modelos teóricos baseados em redes de spins, os Modelos de Spin, que oferecem uma estrutura simples para entender como mudanças críticas em sistemas advêm de interações locais entre elementos. Originalmente desenvolvido para descrever transições de fase em materiais magnéticos, o Modelo de Ising, o mais conhecido entre os Modelos de Spin, transcendeu suas aplicações iniciais e se tornou uma ferramenta amplamente utilizada para investigar comportamentos coletivos emergentes em diversas áreas, nas quais os elementos locais têm apenas dois estados possíveis (como spin *up* ou *down*, opções binárias em sistemas econômicos ou escolha entre dois candidatos em um processo eleitoral). Exemplos notáveis de aplicações incluem interações sociais (GRABOWSKI; KOSIŃSKI, 2006), dinâmicas de mercados financeiros (STEED, 2016) e até mesmo como um teste de aprendizado e eficácia de redes neurais (D'ANGELO; BÖTTCHER, 2020; MORNINGSTAR; MELKO, 2017).

Enquanto o Modelo de Ising fornece uma descrição eficaz para transições de fase envolvendo estados binários, o Modelo XY estende essa abordagem para sistemas onde os estados podem assumir valores contínuos no plano xy , tornando-o relevante para o estudo de sistemas que exibem graus de liberdade angulares, além de ser particularmente útil para descrever fenômenos envolvendo superfluidos (OHTA; JASNOW, 1979) e supercondutores (BABAEV; KLEINERT, 1999). Esse modelo possibilita a investigação de transições de fase mais complexas, destacando-se por suas características singulares em duas dimensões, que apresenta transição de Kosterlitz-Thouless (KT), na qual a transição de fase não ocorre por meio de uma mudança na ordem do sistema, mas devido a uma alteração no comportamento de pares de vórtices — estruturas topológicas que emergem espontaneamente nesses sistemas planares. Essa peculiaridade torna o Modelo XY um tema central na exploração de sistemas estatísticos, distinguindo-o de outros modelos clássicos e fornecendo uma base teórica rica para a compreensão mais profunda de fenômenos críticos.

O modelo XY bidimensional é o modelo mais simples a exibir uma transição de fase topológica, caracterizada pela mudança de comportamento de defeitos topológicos: numa fase os vórtices e antivórtices estão associados em pares ligados e noutra fase onde esses pares se desacoplam. Essa transição altera drasticamente as propriedades do sistema, como a ordem e a dinâmica das flutuações. Em contraste, o modelo XY tridimensional apresenta uma transição de fase convencional, análoga à do modelo de Ising, onde ocorre uma quebra espontânea de simetria, com a formação de uma fase ordenada a baixas temperaturas. Embora ambos os modelos compartilhem a mesma simetria contínua, a diferença dimensional é suficiente para modificar o tipo de transição de fase observada.

Esta diferença oferece um cenário único para explorar a multifractalidade como uma ferramenta para entender as diferenças de comportamentos subjacentes entre as transições de fase topológicas e convencionais, apenas mudando a dimensionalidade da rede XY. Assim, o estudo comparativo das séries temporais dos observáveis nesses dois casos pode ampliar

significativamente a compreensão de comportamentos críticos. Nesse contexto, surge a proposta de investigar a multifractalidade e as autocorrelações de longo alcance presentes nos observáveis do Modelo XY, tanto em duas quanto em três dimensões. Para isso, empregar-se-á o cálculo do $H(q)$, extraídos por meio do método *Multifractal Detrended Fluctuation Analysis* (MF-DFA),

Com base no exposto, o objetivo deste trabalho é utilizar o MF-DFA com a finalidade de investigar as propriedades fractais e as autocorrelações presentes em séries temporais de diferentes grandezas macroscópicas nos modelos XY bidimensional e tridimensional. Portanto, serão analisadas longas séries temporais de energia, magnetização e módulo de helicidade, geradas por meio de simulações computacionais utilizando o Algoritmo de Metropolis. Através da MF-DFA, espera-se extrair características multifractais que evidenciem possíveis diferenças nas dinâmicas críticas relacionadas às transições de fase topológicas e convencionais, contribuindo para uma compreensão mais aprofundada das propriedades dinâmicas desses sistemas.

Nos capítulos subsequentes, serão apresentados os principais conceitos e fundamentos teóricos deste trabalho. O Capítulo 2 introduz uma conceituação formal das transições de fase, classificando os principais tipos existentes e discutindo os modelos de spin mais estudados, com ênfase em suas características fundamentais e suas respectivas transições de fase associadas. No Capítulo 3, é descrito o algoritmo empregado para a resolução das equações de estado dos modelos de spin, o Algoritmo de Metropolis, detalhando os resultados obtidos das grandezas físicas dos modelos de Ising e XY. O Capítulo 4 apresenta o método de Análise Multifractal baseado no método (MF-DFA), já mencionado, com discussões e interpretações sobre o comportamento da função $H(q)$. A metodologia utilizada para a obtenção dos dados analisados é descrita no Capítulo 5, enquanto a análise e discussão dos resultados são abordadas no Capítulo 6 e, por fim, o Capítulo 7 reúne as conclusões desse estudo multifractal.

2 MODELOS DE SPIN E TRANSIÇÃO DE FASE

Modelos de spin são fundamentais na física estatística para o estudo das transições de fase, particularmente em sistemas magnéticos. A ideia de modelar essa estrutura surgiu quando Wilhelm Lenz sugeriu que átomos dipolares em um cristal podem girar livremente em torno de uma posição fixa (BRUSH, 1967). Nesses modelos, os elementos do sistema são representados por spins¹ dispostos em uma rede, os quais interagem entre si e/ou com um agente externo de acordo com regras específicas determinadas pelo Hamiltoniano do sistema. O objetivo central é investigar como as grandezas macroscópicas do sistema, como a magnetização ou energia, se comportam à medida que a temperatura varia, com ênfase nas mudanças das propriedades do sistema conforme perpassam uma transição de fase.

Lenz, Diretor de pesquisa de Ernst Ising, o designou para investigar possíveis transições de fase com base em modelos de spins. Em seu trabalho, Ising demonstrou analiticamente que o modelo unidimensional de spins binários não apresenta magnetização espontânea nem transição de fase para qualquer temperatura finita (a demonstração pode ser encontrada de maneira instrutiva no livro "Introdução à física estatística" de Sílvia Salinas, (SALINAS, 1999)). Com base nesses resultados, Ising concluiu, de forma precipitada, que o modelo não possuía utilidade física significativa. No entanto, esta conjectura revelou propriedades únicas em dimensões superiores, onde transições de fase bem definidas, como a ferro-paramagnética, foram observadas, tornando-se um marco na compreensão dos fenômenos críticos.

Entre os diversos sistemas de spins com transições de fase amplamente estudadas e associados ao grupo $O(n)$, destacam-se o, já comentado e mais conhecido, modelo de Ising ($n = 1$), sua generalização, o modelo de Potts, o modelo XY ($n = 2$) e o modelo de Heisenberg ($n = 3$). Cada um apresenta uma simetria característica que influencia diretamente sua dinâmica, conferindo-lhe propriedades únicas que o diferenciam dos demais.

As simetrias desempenham um papel fundamental nesses modelos, pois fornecem informações cruciais sobre a maneira como eles se reorganizam e transitam entre diferentes estados. No contexto destes modelos, as simetrias envolvidas são concebidas pela interação enérgica spin-spin ($\sigma_i \sigma_j$), portanto é de intrínseca importância conhecer e representar cada modelo através de seu Hamiltoniano H , dado na forma geral:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \mu \sum_{i=1}^N h_i \vec{\sigma}_i. \quad (2.1)$$

¹ O "spin", em modelos de spin, e no contexto geral deste trabalho, não representa o conceito quântico de spin intrínseco das partículas, mas sim uma representação simplificada do estado dos elementos do sistema. Os quais podem, por exemplo, ser dipolos magnéticos, logo apresentam momento magnético e interagem entre si. A interação entre esses spins é definida por regras específicas que dependem do modelo.

Onde a notação $\langle i, j \rangle$ representa que a soma será efetuada apenas entre os spins adjacentes, dentre os N sítios². $J_{i,j}$ se refere à força de interação entre os spins i e j , μ é o momento magnético, h_i é a ação de um campo magnético no i -ésimo sítio e σ_i é o estado (direção) do spin.

O Hamiltoniano também é relevante na definição da Função de Partição, equacionada em 2.2, com $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann que, nas simulações, é frequentemente considerado $k_b = 1$ e, portanto, a temperatura (T), agente externo causador da transição de fase, estará em unidades arbitrárias.

$$Z(\beta) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} \quad (2.2)$$

2.1 TRANSIÇÃO DE FASE

Comumente, sistemas em condição de alta ou baixa temperatura (campo, pressão, etc.), exibem estados distintos entre si. Entre eles existe uma região de mudança, onde o estado mais ordenado dá lugar à desordem e vice-versa. Este ponto crítico de mudança é intrínseco de uma transição de fase, a qual ocorre quando um sistema físico manifesta mudança qualitativa na sua estrutura ou em suas propriedades macroscópicas (como a magnetização³) em resposta a uma variação contínua de algum parâmetro externo (como a temperatura). Essa mudança pode acontecer de duas formas: de maneira abrupta (Transição de Primeira Ordem⁴) ou gradual (de Segunda Ordem).

Uma transição de primeira ordem, no contexto de ferromagnetos, é marcada pela descontinuidade da magnetização espontânea, enquanto que numa de segunda ordem a magnetização vai a zero continuamente à medida que $T \rightarrow T_c$ (AZEVEDO, 2007), como ilustrado na Figura 2, onde T_c ⁵ é denominada Temperatura Crítica ou Temperatura de Curie, em homenagem a Pierre Curie por suas contribuições na área (CURIE, 1895). Essa criticalidade, presente em transições de segunda ordem, revela ainda uma série de propriedades que as distinguem notavelmente de outros tipos de transição.

Por exemplo, em ferromagnetos, a baixas temperaturas apresenta spins tão ordenados que qualquer flutuação local é rapidamente absorvida pela organização global; já em temperaturas

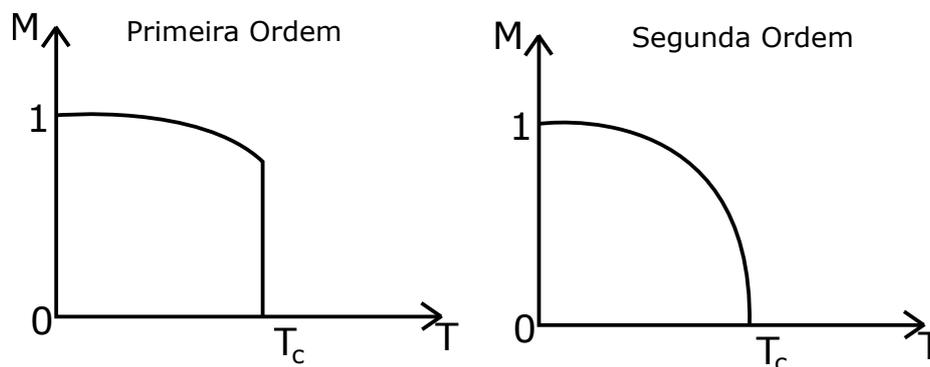
² É importante deixar claro que as interações entre spins vizinhos não devem ser contadas duas vezes, caso o faça a energia calculada será o dobro da convencional

³ A Magnetização é uma grandeza que expressa o alinhamento das partes de um sistema, e por isso pode ser interpretada também como um fator de polarização, portanto é também um relevante parâmetro de ordem.

⁴ O nome refere-se à continuidade das derivadas da energia livre. Na de primeira ordem, a primeira derivada (como entropia, volume ou magnetização) é descontínua. Na de segunda ordem, a primeira derivada é contínua, mas a segunda (como calor específico ou susceptibilidade magnética) é descontínua

⁵ É importante enfatizar que, embora o termo T_c seja empregado neste trabalho de forma instrutiva também para transições de primeira ordem, seu uso mais apropriado se limita às transições de segunda ordem. Isso ocorre porque, em transições de primeira ordem, não há a emergência de comportamento crítico, característica fundamental das transições de segunda ordem.

Figura 2 – Comportamento característico da Magnetização M em uma transição de fase de Primeira e Segunda Ordem



muito elevadas, o sistema se torna tão desordenado que essas flutuações não se propagam pela rede. Em ambos os casos, a influência de uma partícula sobre suas vizinhas decai rapidamente com a distância, impedindo a emergência de um comportamento coletivo expressivo. Porém, à medida que o sistema se aproxima de T_c , as flutuações começam a se transmitir por distâncias maiores, tornando-se possível delimitar uma região abstrata (ou “bloco”) nas quais, dentro dela, as partículas apresentam correlação entre si. O tamanho característico desse bloco é denominado comprimento de correlação (ξ). Quando o sistema se aproxima do ponto crítico, em transições de segunda ordem, ξ aumenta de forma indefinida, podendo atingir escalas macroscópicas. Nesse limite, não há mais um tamanho característico fixo, logo o sistema exibe invariância de escala. Isso significa que, independentemente do tamanho que se observe o sistema, as flutuações e padrões estatísticos permanecem autossemelhantes: é como observar um fractal.

Além da invariância de escala, também há possibilidade de haver invariância de comportamento em relação a sistemas com diferentes naturezas microscópicas. Em outras palavras, sistemas estruturalmente diversos, com interações específicas distintas, podem exibir o mesmo conjunto de parâmetros críticos. A essa propriedade confere-se a denominação “classe de universalidade”. Assim, mesmo sistemas radicalmente diferentes em nível microscópico podem apresentar os mesmos expoentes críticos e leis de escala. Essa noção possibilita agrupar sistemas aparentemente díspares em uma mesma classe, reconhecendo que todos compartilham o mesmo comportamento crítico essencial. Por exemplo, um ímã uniaxial próximo à sua temperatura crítica e um fluido próximo ao ponto crítico líquido-vapor pertencem à mesma classe de universalidade, à Classe de Universalidade Ising em três dimensões, apesar de suas diferenças fundamentais em termos de constituintes e interações (VICARI, 2007).

Em transições de primeira ordem, entretanto, tais propriedades não se manifestam, visto que ξ permanece finito, indicando que as flutuações das partículas não se correlacionam a longas distâncias. Como consequência, não há comportamento crítico nem a emergência de invariância de escala, inviabilizando o uso de ferramentas baseadas nessa abordagem, como as discutidas, contudo, permite a existência de fenômenos como a coexistência de fases na região

de mudança⁶. Em contraste com a transição de segunda ordem, onde $\xi \rightarrow \infty$, em que o sistema é obrigado a evoluir para uma fase única (SOUZA et al., 2017). Apesar das diferenças, ambas as transições geralmente estão associadas a uma quebra de simetria. Essas simetrias são comumente determinadas pelo Hamiltoniano⁷, entretanto, a magnetização também desempenha um papel fundamental nessa caracterização, uma vez que, por exemplo, em sistemas ferromagnéticos a magnetização média é uma variável de ordem crucial que indica quebra de simetria em transições de fase convencionais.

Em altas temperaturas, o sistema apresenta um comportamento desordenado, onde a magnetização média é nula devido às flutuações térmicas que causam um arranjo aleatório dos spins. Nesse regime, o sistema possui simetria de inversão, pois a inversão de todos os spins não altera o seu estado físico. No entanto, ao se reduzir a temperatura abaixo de T_c , ocorre uma quebra espontânea de simetria, onde os spins se alinham em uma direção preferencial, o que conduz a um estado onde a magnetização não é nula. Tal comportamento é caracterizado pela crescente predominância das interações spin-spin à medida que as flutuações térmicas se tornam menos relevantes. Esse processo leva à quebra da simetria, pois a inversão de todos os spins resulta em uma magnetização com sinal oposto, configurando, portanto, um estado macroscópico distinto. A transição de fase, nesse caso, é marcada por essa mudança no comportamento da magnetização, que passa de um valor nulo para um valor macroscópico significativo, representando a transformação do sistema de um estado desordenado (simétrico) para um ordenado (assimétrico).

Contudo, nem todos os sistemas físicos possuem capacidade de romper espontaneamente a simetria, logo não apresentam uma fase ordenada. De acordo com o Teorema de Mermin-Wagner, modelos bidimensionais com curto alcance de interação e de simetria contínua não podem ter, espontaneamente, quebra de simetria (MERMIN; WAGNER, 1966). Este é o caso, por exemplo, do Modelo XY bidimensional, o qual apresenta uma transição de fase não convencional, denominada Transição Kosterlitz-Thouless (KOSTERLITZ; THOULESS, 2018), onde o sistema muda de fase sem apresentar magnetização espontânea (JUNIOR, 1997). Visto que um parâmetro de ordem, como a magnetização, é inadequado para descrever essa transição distinta, torna-se necessário evocar uma grandeza alternativa. Nesse contexto, o módulo da helicidade emerge como uma grandeza fundamental para caracterizar essa transição de fase, que não se relaciona a uma mudança de ordem convencional do sistema. Detalhes adicionais sobre o módulo de helicidade e essa transição serão apresentados na Seção 2.3.

⁶ Característica encontrada por exemplo na transição de fase da água, onde, numa dada condição de temperatura e pressão, pode haver inclusive coexistência de 3 fases (o conhecido ponto triplo da água)

⁷ Se o Hamiltoniano é invariante sob transformações de translação, o sistema exibe simetria de translação no espaço; se é invariante sob rotações, o sistema possui simetria de giro. A simetria de inversão, por sua vez, ocorre quando a inversão de todos os spins ou partículas não altera o Hamiltoniano. Durante uma transição de fase, o sistema pode passar por uma quebra espontânea de simetria, onde uma simetria prevista pelo Hamiltoniano deixa de ser válida quando olhada macroscopicamente, já que mesmo com mudanças em torno da simetria, o sistema apresenta estados diferentes.

2.2 MODELO DE ISING

O Hamiltoniano no Modelo de Ising é dado por

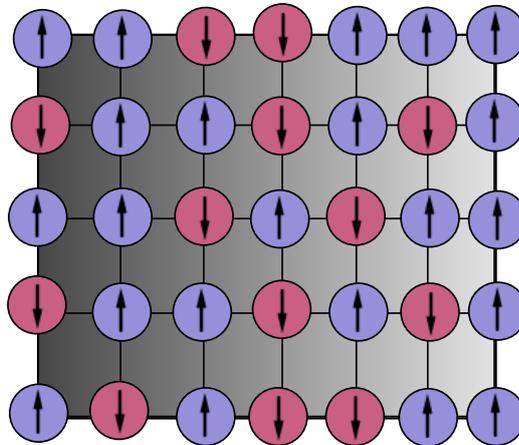
$$H_{Ising} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i. \quad (2.3)$$

Aqui o estado de spin assume apenas configurações $\sigma = \pm 1$, representado na Figura 3. Neste trabalho, iremos considerar $J_{i,j} = 1$ e a inexistência de um campo magnético externo, portanto, o Hamiltoniano é reduzido à

$$H_{Ising} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.4)$$

É perceptível que a configuração que conduz ao menor H_{Ising} é obtida quando todos os spins estão alinhados. Ademais, a energia calculada é a mesma se invertemos o sinal de todos os spins da rede, já que o produto $\sigma_i \sigma_j$ não mudará, este fato confere ao Modelo de Ising a simetria por inversão de spin.

Figura 3 – Estrutura do Modelo de Ising Bidimensional



Esta modelagem simula bem a transição de fase Ferro-Paramagnética: para $T < T_c$ há magnetização espontânea (no modelo de Ising, calculada a partir da equação 2.5), logo existe ordem de longo alcance⁸; já para $T > T_c$ a magnetização espontânea é zero, semelhante ao ímã, que perde sua capacidade de imantação quando o aquecemos.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.5)$$

⁸ Característica de sistemas físicos em que existe um alinhamento ou correlação que se estende por uma grande distância. Indicando que, mesmo separadas por distâncias consideráveis, as partes do sistema mantêm uma relação organizada. Em materiais ferromagnéticos, por exemplo, os spins formam aglomerados que se alinham na mesma direção, conferindo-o uma magnetização macroscópica

A conjectura é simples, a transição ocorre a partir de uma reorganização global dos spins, representados por estados binários, sob a influência de interações locais e condições externas, como a temperatura. Entretanto, o conceito pode ser extrapolado para descrever outros sistemas físicos e até mesmo fenômenos de diferentes áreas. No caso de mercados financeiros, por exemplo, o comportamento de agentes econômicos pode ser modelado analogamente aos spins do Modelo de Ising, onde decisões locais de compra ou venda são influenciadas por interações com vizinhos e condições globais.

A generalização natural do Ising é conhecida como Modelo de Potts, onde o spin pode admitir q -estados, discretos, de Hamiltoniano

$$H_{Potts} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}; \quad \sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}. \quad (2.6)$$

Portanto, devido ao Delta de Kronecker, a soma terá contribuição somente de spins adjacentes que tiverem estados iguais, caso contrário o valor da respectiva interação será nula. Dessa forma, para $q = 2$, a menos de uma constante, H_{Potts} e H_{Ising} são equivalentes.

Em suma, ambos os modelos têm transições de fase bem estudadas e definidas. Por exemplo, o Ising, em duas e três dimensões, apresenta transição de fase de Segunda Ordem (AZEVEDO, 2007). Já para Potts, em duas dimensões, isso só acontece para $q \leq 4$, enquanto que $q \geq 5$ se manifesta transição de fase de Primeira Ordem (WU, 1982).

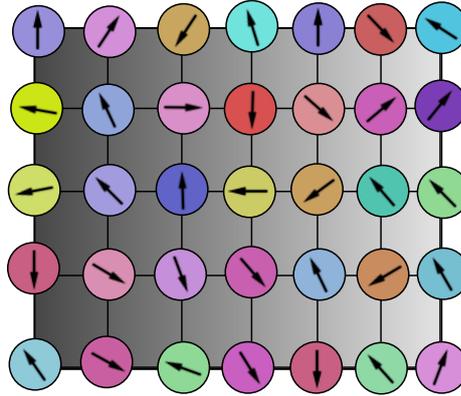
2.3 MODELO XY

Devido à simetria discreta dos modelos de Ising e Potts, esses sistemas não se enquadram no teorema de Mermin-Wagner. No entanto, quando concedemos ao spin a liberdade de se mover em qualquer direção do plano, o sistema adquire uma simetria contínua. Isso ocorre porque o Hamiltoniano, dado pela equação 2.7, é simétrico sob rotações, ou seja, ele permanece inalterado ao girar todos os spins por um ângulo α . No caso deste modelo, o produto escalar entre os estados na equação 2.1 pode ser simplificado, utilizando como referência os ângulos θ de cada spin no plano:

$$H_{XY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j). \quad (2.7)$$

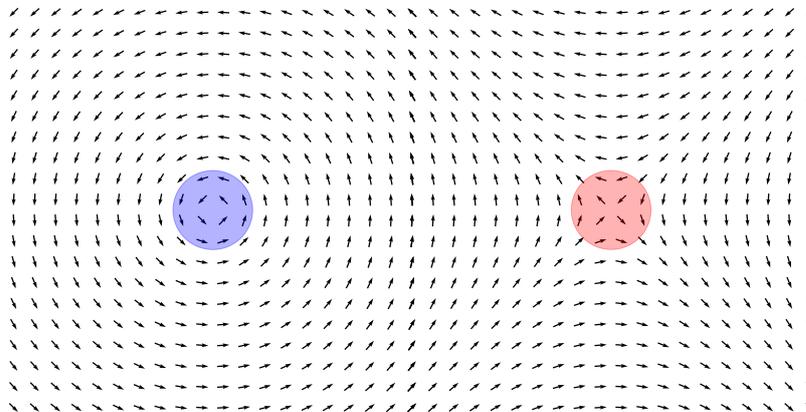
Em virtude disso, em duas dimensões, o Modelo XY (esquemático na figura 4), se enquadra no modelo de Mermin-Wagner e não forma ordem de longo alcance, logo não há magnetização espontânea mesmo para temperaturas baixas. Neste modelo a transição é caracterizada pela alteração de comportamento de defeitos topológicos chamados vórtices e

Figura 4 – Estrutura do Modelo XY Bidimensional.



antivórtices⁹, representados na Figura 5, os quais em baixas temperaturas estão fortemente ligados aos pares. Com o aumento da temperatura a densidade dos defeitos aumenta até que, na Temperatura Kosterlitz-Thouless (T_{KT})¹⁰, eles se dissociam e comportam-se como partículas livres, exibindo uma dinâmica desordenada e interações fracas¹¹, (JANKE, 1996; SOUZA et al., 2017). Além disso, em contraste com transições convencionais, para toda a região em que $T < T_{KT}$, ξ é sempre infinito (CANOVA, 2017).

Figura 5 – Exemplo de vórtice (círculo azul) e antivórtice (círculo vermelho) presentes no modelo XY bidimensional.



Já que a magnetização (calculada para o modelo XY na forma da equação 2.8) não é adequada como observável para caracterizar a transição de fase neste caso, torna-se essencial utilizar outra grandeza física. Nesse contexto, o módulo de helicidade, definido na Equação 2.9, emerge como uma alternativa. Essa grandeza mede a resistência do sistema a uma torção uniforme imposta na amostra (BAEK; MINNHAGEN, 2010). Além disso, pode ser interpretada

⁹ A dinâmica desses defeitos topológicos no modelo XY2D é muito útil para explorar comportamentos em filmes de ^4He (NELSON; KOSTERLITZ, 1977) e filmes finos supercondutores (WELLS et al., 2015)

¹⁰ Para o Modelo XY 2D, $T_{KT} \simeq 0.89$ (HASENBUSCH, 2005)

¹¹ Essa interação é análoga ao comportamento de cargas elétricas em duas dimensões no gás de Coulomb, em que a dissociação em altas temperaturas e o pareamento em baixas determinam a organização do sistema (AMIT; GOLDSCHMIDT; GRINSTEIN, 1980).

como a diferença de energia livre associada à imposição de uma diferença de fase nos spins ao longo de uma direção específica. O módulo de helicidade apresenta um valor não nulo para $T < T_{KT}$ e vai a zero para $T > T_{KT}$ (CANOVA, 2017).

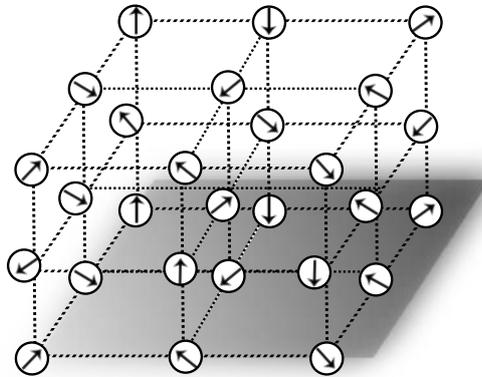
$$M = \frac{1}{N} \sqrt{\left(\sum_{i=1}^N \cos \theta_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^N \sin \theta_i \right)^2} \quad (2.8)$$

$$\Upsilon = -\frac{1}{N} \left(H + \beta \left[\sum_{\langle ij \rangle_x} \sin(\theta_i - \theta_j) \right]^2 \right) \quad (2.9)$$

Em três dimensões, o Modelo XY — representado na Figura 6 —, apesar da existência de vórtices ¹², exibe uma transição de fase convencional de segunda ordem ¹³, semelhante ao Modelo de Ising. Ademais, de modo geral, o Modelo XY exibe transições de fase comparáveis às observadas no Modelo de Heisenberg, descrito pelo Hamiltoniano na Equação 2.10, no qual o spin possui liberdade para se orientar em qualquer direção no espaço. Ambos os modelos, XY e Heisenberg, apresentam transições de fase topológicas em duas dimensões, devido à sua simetria contínua, enquanto em três dimensões exibem transições convencionais de segunda ordem (JANKE, 1996; AZEVEDO, 2007).

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \quad (2.10)$$

Figura 6 – Estrutura do Modelo XY Tridimensional.



¹² A existência de vórtices na rede tridimensional é fundamental para a compreensão de fenômenos em superfluidos, como no ^4He , ou em supercondutores. Ambos com exemplos que possuem expoentes críticos bem determinados e, portanto, pertencem à mesma classe de universalidade do modelo XY3D (JENSEN; KIM; MINNHAGEN, 2000; CAMPOSTRINI et al., 2006).

¹³ Para o Modelo XY 3D, $T_c \simeq 2.2$ (GOTTLOB; HASENBUSCH, 1993)

3 ALGORITMO DE METROPOLIS

Apesar da aparente simplicidade do Hamiltoniano que descreve sistemas de spins, a complexidade desses modelos surge do grande número de graus de liberdade envolvidos. Isso torna a exploração analítica impraticável em muitos casos, como por exemplo o modelo de Ising tridimensional, que até hoje carece de uma solução exata geral. Como consequência, é imprescindível o uso de algoritmos computacionais para simular e analisar esses modelos. Neste contexto, o Algoritmo de Metropolis é um dos mais conhecidos e empregados, vide sua simplicidade e versatilidade.

O Algoritmo de Metropolis (METROPOLIS et al., 1953) consiste em um método de Monte Carlo modificado para investigar propriedades de equações de estado que são construídas a partir de moléculas individuais interagentes entre si, portanto, é ideal para tratamento de Modelos de Spin.

3.1 O ALGORITMO

Suponha um sistema que precise ser atualizado continuamente a fim de alcançar o equilíbrio. A ele serão atribuídas novas configurações geradas a partir, somente, do estado imediatamente anterior, ou seja, estamos lidando com um processo sem memória. Nesse algoritmo a probabilidade P_n de uma dada configuração ocorrer segue uma distribuição de Boltzmann (ZHAO et al., 2017):

$$P_n = \frac{e^{-H_n/k_bT}}{Z}, \quad (3.1)$$

onde Z é a função de partição. Portanto, a probabilidade de transição de uma configuração n para m é dada por

$$P_{n \rightarrow m} = \frac{P_m}{P_n} = e^{-\Delta H/k_bT}. \quad (3.2)$$

Percebe-se que caso $H_m < H_n$, isso implica em $P_{n \rightarrow m} > 1$, ou seja, a nova configuração será aceita com certeza, caso contrário a configuração é aceita com uma certa probabilidade, dada pela equação 3.2. Assim, novas configurações são continuamente geradas e avaliadas com base no critério de aceitação, garantindo que a cadeia de estados evolua de acordo com a distribuição de Boltzmann.

No contexto de modelos de spin, o algoritmo pode ser implementado da seguinte forma:

- Passo 1: Escolha um spin aleatório da rede

- Passo 2: Calcule ΔH caso $\vec{\sigma}_i$ seja modificado;
- Passo 3: Se $\Delta H < 0$, a nova configuração é prontamente aceita.
- Passo 4: Caso contrário a inversão só é aceita se um número aleatoriamente escolhido entre 0 e 1 for menor que $P_{n \rightarrow m}$.
- Passo 5: Escolha aleatoriamente outro spin da rede e refaça os passos anteriores.

Um Passo de Monte Carlo (MCS) é concluído quando todos os spins da rede tiverem ao menos uma chance de serem modificados, ou seja, após o processo ser repetido N vezes, sendo N a quantidade total de spins na rede.

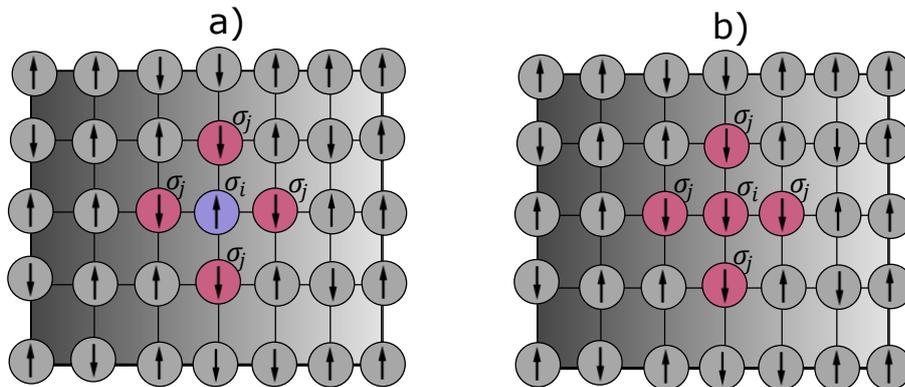
Nos modelos de spin, é possível realizar uma otimização significativa, visto que é computacionalmente custoso calcular H em cada passagem. Em vez de calcular H para os estados final e inicial, basta determinar diretamente a variação ΔH , computando apenas a contribuição da modificação do spin σ_i , selecionado no passo 1, e sua interação com os spins adjacentes σ_j . Essa abordagem é válida porque todas as demais interações no sistema permanecem inalteradas durante o processo. Esse simples truque reduz significativamente o tempo computacional.

3.2 APLICANDO ALGORITMO NO MODELO DE ISING

É evidente pela Figura 7 que a única diferença entre os casos (a) e (b) reside nas interações entre os spins σ_i e σ_j . Assim, o cálculo de ΔH pode ser otimizado da seguinte maneira:

$$\Delta H = H_b - H_a = - \sum_{\langle i,j \rangle_b} \sigma_i \sigma_j + \sum_{\langle i,j \rangle_a} \sigma_i \sigma_j. \quad (3.3)$$

Figura 7 – Configuração antes (a) e depois (b) da inversão de spin. Em destaque o spin σ_i , escolhido aleatoriamente no passo 1 do algoritmo de Metropolis, e os spins adjacentes σ_j .



No somatório da Equação 3.3, apenas as interações do spin selecionado e seus vizinhos contribuem para o cálculo, pois todas as demais interações em H_a e H_b permanecem inalteradas

e se anulam. Isso resulta em uma expressão para ΔH , considerando apenas o spin σ_i e seus vizinhos σ_j :

$$\Delta H = -\sigma_{ib} \sum_{\langle j \rangle_b} \sigma_{jb} + \sigma_{ia} \sum_{\langle j \rangle_a} \sigma_{ja}. \quad (3.4)$$

Aqui, $\langle j \rangle$ representa os sítios pertencentes à vizinhança do spin escolhido. Note-se que os spins adjacentes em b , σ_{jb} , são iguais aos spins adjacentes em a , σ_{ja} . Além disso, devido à inversão do spin, $\sigma_{ia} = -\sigma_{ib}$. Portanto, a variação do Hamiltoniano pode ser simplificada:

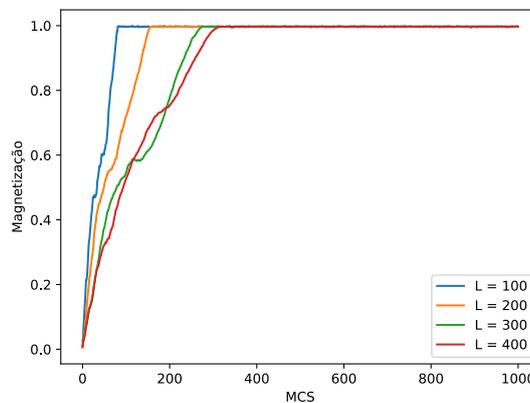
$$\Delta H = 2\sigma_{ia} \sum_{\langle j \rangle_a} \sigma_{ja}. \quad (3.5)$$

Com as otimizações descritas, estão estabelecidas todas as ferramentas necessárias para a implementação eficiente do algoritmo de Metropolis. Durante cada etapa do processo de Monte Carlo, é fundamental registrar a magnetização e quaisquer outras grandezas relevantes para a análise posterior dos dados.

3.2.1 Resultados do Algoritmo no Modelo de Ising

Ao executar cada etapa do algoritmo, é possível obter séries temporais semelhantes às apresentadas na Figura 8: nela observa-se que o sistema precisa de um intervalo inicial para atingir o equilíbrio, conhecido como *tempo de relaxação* (τ). Esse tempo caracteriza a evolução do sistema até alcançar um estado estacionário e apresenta uma proporcionalidade com a largura da rede (L)¹, refletindo a dependência do relaxamento em função do tamanho do sistema.

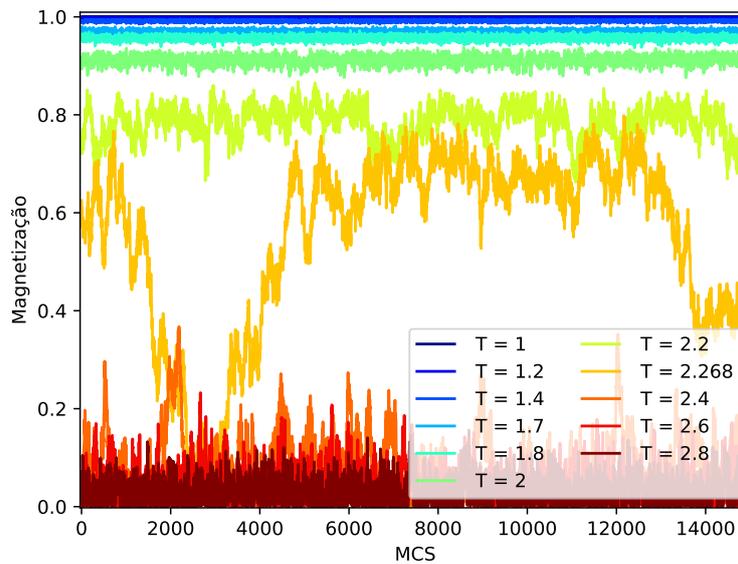
Figura 8 – Séries Temporais da Magnetização no Modelo de Ising, com $T = 1.2$, em uma rede quadrada de diferentes larguras L .



¹ Todas as simulações presentes neste trabalho se refere ou à redes quadradas ($N = L \times L$) ou à cúbicas ($N = L \times L \times L$)

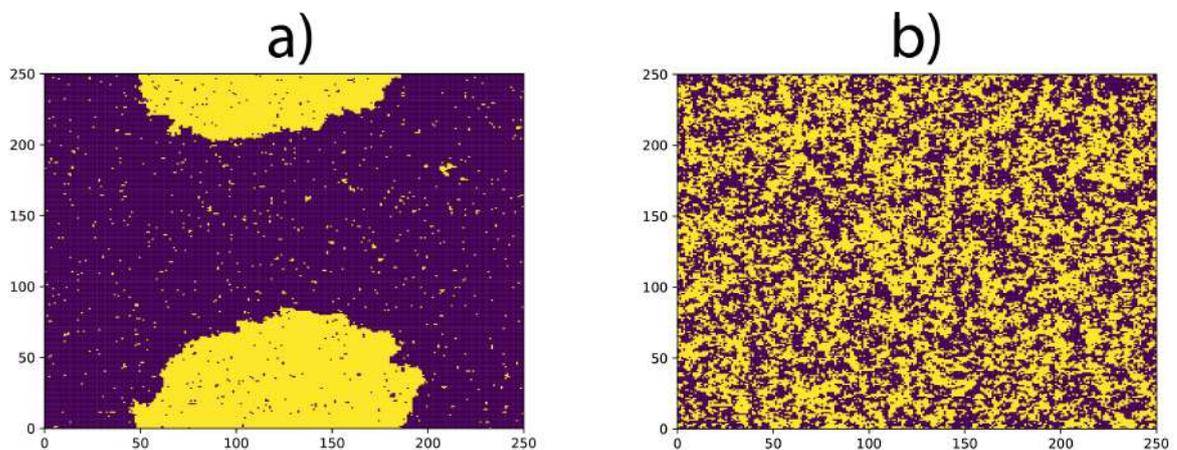
É possível verificar pelas séries temporais da Figura 9 que para $T < T_c \simeq 2.269$ o sistema evolui para uma situação de equilíbrio que exibe uma magnetização média diferente de zero, mas à medida que $T \rightarrow T_c$ o sistema vai perdendo essa capacidade, até que haja transição de fase em $T = T_c$, onde a série temporal não consegue atingir o equilíbrio. De tal modo que para $T > T_c$, a média da magnetização é nula.

Figura 9 – Séries Temporais da Magnetização no Modelo de Ising, após tempo de relaxação, em uma rede quadrada com $L = 100$.



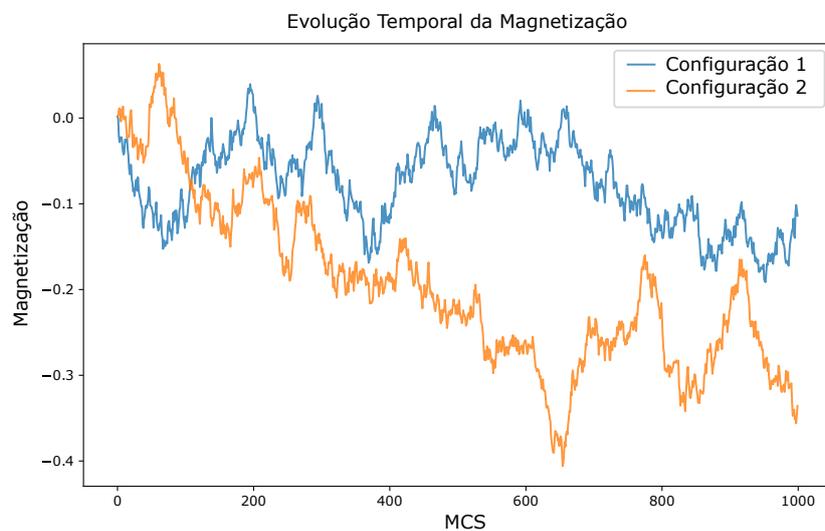
Do ponto de vista estrutural, para $T < T_c$, é possível visualizar a formação de "ilhas" magnéticas, indicando que o sistema apresenta ordem de longo alcance, o que justifica a não nulidade da magnetização espontânea. Já para $T > T_c$, é exatamente o oposto, logo a magnetização espontânea é zero (Figura 10).

Figura 10 – Simulação do Modelo de Ising Bidimensional com $L = 250$, a) $T = 1.75$ b) $T = 3.0$.



Utilizando o algoritmo de Metropolis ainda é possível observar que o modelo de Ising não apenas apresenta uma transição de fase entre uma configuração ordenada e outra desordenada, mas também revela a existência de uma região de mudança associada a comportamento caótico² (JÚNIOR, 1994). Embora a presença dessas regiões dependa do processo dinâmico empregado (MARIZ; HERRMANN; ARCANGELIS, 1990), o fato é que a introdução de um único "dano" (como a inversão de um spin) pode gerar efeitos de divergência na configuração e até mesmo na evolução temporal do sistema³ (como verificado na Figura 11).

Figura 11 – Magnetização calculada para duas redes de Ising $T = 2.269$, submetidos a mesma semente de números aleatórios, iniciando com configurações quase idênticas, diferenciadas por um único "dano".



Quando utilizado o algoritmo de Metropolis no Modelo de Ising, em temperaturas baixas, a propagação do dano é limitada, enquanto o efeito do caos torna-se maior conforme o sistema se aproxima da temperatura crítica, e atinge seu máximo em altas temperaturas. Esses resultados reforçam a complexidade dinâmica do modelo de Ising e sua sensibilidade a pequenas perturbações em diferentes regimes térmicos.

² Comumente verificado em sistemas complexos, o caos é um comportamento dinâmico caracterizado por sensibilidade extrema às condições iniciais. Embora governados por leis determinísticas, sistemas caóticos apresentam dinâmica intrinsecamente imprevisível devido à sua natureza não-linear. Assim, diferenças ínfimas nas condições iniciais entre duas configurações de um sistema caótico podem evoluir, ao longo do tempo, para estados completamente distintos.

³ É relevante destacar como efeitos caóticos, embora determinísticos, podem manifestar-se no modelo de Ising, que incorpora elementos probabilísticos. Nesse contexto, ao utilizar uma mesma semente de números aleatórios, é possível garantir que sistemas com as mesmas condições iniciais evoluam para configurações idênticas em sucessivas simulações. Para investigar o comportamento caótico, basta introduzir configurações iniciais ligeiramente distintas, mantendo a mesma semente de números aleatórios, e observar se, ao longo do tempo, ambos evoluem de forma diferente.

3.3 APLICANDO ALGORITMO NO MODELO XY

O algoritmo segue em suma da mesma forma para o Modelo XY, com a diferença de que no passo 2 do algoritmo se sortearia um ângulo aleatório para o spin, os passos subsequentes seriam realizados de forma análoga. Contudo, o tempo de relaxação τ seria muito maior, devido ao incremento de liberdade de cada spin⁴, dificultando, portanto, o sistema de evoluir. Uma contraproposta seria sortear um incremento de ângulo dentro de um intervalo $[-\Delta\theta, \Delta\theta]$, porém se $\Delta\theta$ for grande é bem provável que a diferença de energia causada pela mudança será proporcional, o que conduziria à rejeição imediata de uma grande amostra de potenciais configurações. Por outro lado, se $\Delta\theta$ for pequeno demais, o sistema explorará o espaço de fases⁵ de maneira lenta, comprometendo a eficiência do algoritmo. Logo, para cada temperatura há uma $\Delta\theta$ que se adequa melhor.

Além desse empecilho, como visto anteriormente, a Figura 8 sugere uma aparente proporcionalidade entre o tempo de relaxação τ e o tamanho da rede L . Contudo, em sistemas críticos, o tempo de relaxação τ tem, na verdade, proporcionalidade com o comprimento de correlação ξ , de acordo com a relação de escala $\tau \propto \xi^z$, onde z é o expoente dinâmico⁶. Em sistemas com extensão finita, o comprimento de correlação ξ não pode divergir, sendo assim limitado pelo tamanho L da rede (JANKE, 1996).

Consequentemente, quando $T \rightarrow T_c$ e ξ cresce, o tempo de relaxação τ aumenta significativamente, tornando extremamente desafiador realizar estudos estatísticos adequados em pontos próximos à transição de fase.

Afim de contornar estes problemas, foi produzido um artifício baseado na atualização dos spins em "Clusters" (SWENDSEN; WANG, 1987), em vez de alterar a configuração a partir da mudança de um único spin, o Algoritmo de Wolff consiste em alterar o estado simultâneo de um aglomerado de spins, sem causar mudanças bruscas de energia. No contexto do Modelo XY, este processo é realizado à partir de uma transformação olhada da perspectiva de uma simetria global (HASENBUSCH, 1990; WOLFF, 1989). Essa abordagem, contudo, ao mudar o estado de tantos spins simultaneamente, pode quebrar correlações na série temporal, que são justamente o foco de análise deste trabalho.

Porém, o uso dessa "simetria global" pode ser aproveitada na perspectiva do algoritmo de Metropolis. Essa abordagem visa contornar a dificuldade na escolha do valor ideal de $\Delta\theta$ para cada temperatura, conforme discutido no início desta seção. A proposta pode ser formalmente

⁴ Essa liberdade aumenta o número de estados intermediários e caminhos possíveis para o sistema percorrer durante sua evolução no espaço de fase, tornando o relaxamento para o equilíbrio significativamente mais lento.

⁵ O espaço de fase descreve todas as possíveis configurações de um sistema físico. Em termos simples, é um espaço abstrato onde cada ponto representa um estado completo do sistema. Através disso é possível visualizar como diferentes estados do sistema estão relacionados e como esses estados mudam ao longo do tempo.

⁶ O expoente dinâmico z caracteriza a dependência do tempo de relaxação τ em relação ao comprimento de correlação ξ em sistemas críticos. Seu valor depende das propriedades físicas do sistema, do tipo de dinâmica empregada e das regras de evolução temporal.

descrita da seguinte maneira:

- Passo 1: Selecione um vetor unitário \vec{r} numa direção aleatória do espaço, esta será a direção ao longo do qual serão projetados os spins.
- Passo 2: Escolha aleatoriamente um spin da rede, calcule a projeção dele e de seus vizinhos em relação à \vec{r} :

$$proj_{\vec{r}} \vec{\sigma} = \frac{\langle \vec{\sigma}, \vec{r} \rangle}{|\vec{r}|} \vec{r} = \cos(\theta_{\sigma} - \theta_r) \vec{r} \quad (3.6)$$

- Passo 3: Seguindo a mesma ideia de otimização da equação 3.5, calcule ΔH (que, em suma, é a diferença de energia, caso haja uma inversão da componente do spin σ_i na direção de \vec{r}), dado por:

$$\Delta H = 2\cos(\theta_{\sigma_i} - \theta_r) \sum_{\langle j \rangle_a} \cos(\theta_{\sigma_j} - \theta_r); \quad (3.7)$$

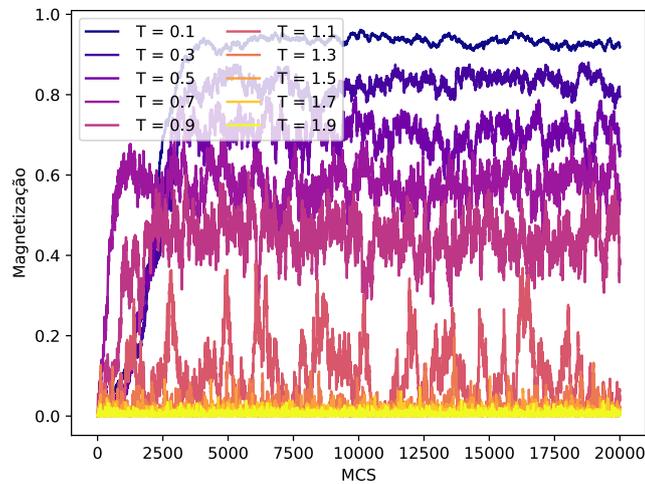
- Passo 4: Siga de maneira análoga ao algoritmo de Metropolis no modelo de Ising, após 1 MCS, volte ao Passo 1 e repita o processo.

Neste processo estamos praticamente imergindo o Modelo de Ising no Modelo de XY. Em vez de atribuir uma direção aleatória a cada spin, opta-se por escolher uma direção de simetria e aplicar o algoritmo exclusivamente nessa direção ao longo de toda a rede. Essa abordagem simplifica o modelo, eliminando a necessidade de selecionar um intervalo ideal de $\Delta\theta$. Na prática, essa simplificação é eficaz, pois todos os spins continuam a ter a possibilidade de girar em qualquer direção, embora o processo seja restrito à direção escolhida para a simetria. Teoricamente, o sistema mantém a capacidade de explorar completamente o espaço de fases, preservando a integridade do modelo original e garantindo que o sistema possa atingir o equilíbrio térmico de forma consistente.

3.3.1 Resultados do Algoritmo no Modelo XY

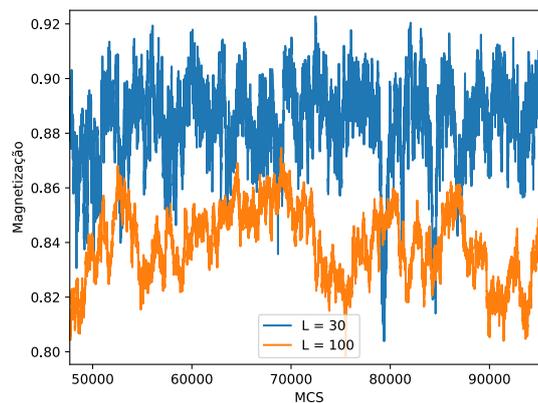
Após a execução do algoritmo, com a magnetização sendo registrada a cada Monte Carlo Step (MCS), é possível obter as séries temporais, conforme ilustrado na Figura 12. Nota-se que a magnetização não é exatamente nula, o que sugere uma aparente quebra de simetria para $T < T_{KT}$.

Figura 12 – Séries Temporais da Magnetização do Modelo XY 2D, para várias temperaturas, com $L = 32$



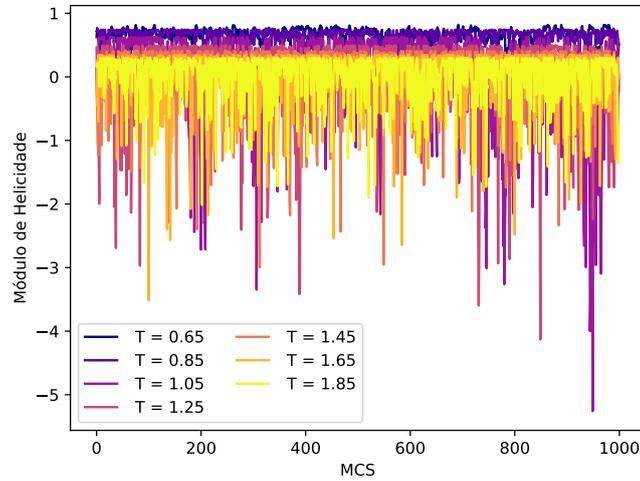
Contudo, esse fenômeno é atribuído a efeitos de tamanho finito, uma vez que a magnetização tende a zero no limite termodinâmico (TOBOCHNIK; CHESTER, 1979), onde $L \rightarrow \infty$. Em sistemas macroscópicos, como cristais, o número de partículas alcança valores da ordem de $N \simeq 10^{23}$, próximo à constante de Avogadro (CIPRA, 1987). A Figura 13 demonstra que, ao aumentar o tamanho da rede L , a magnetização espontânea diminui, corroborando essa expectativa.

Figura 13 – Séries Temporais da Magnetização do Modelo XY 2D, com $T = 0.2$, após tempo de relaxação



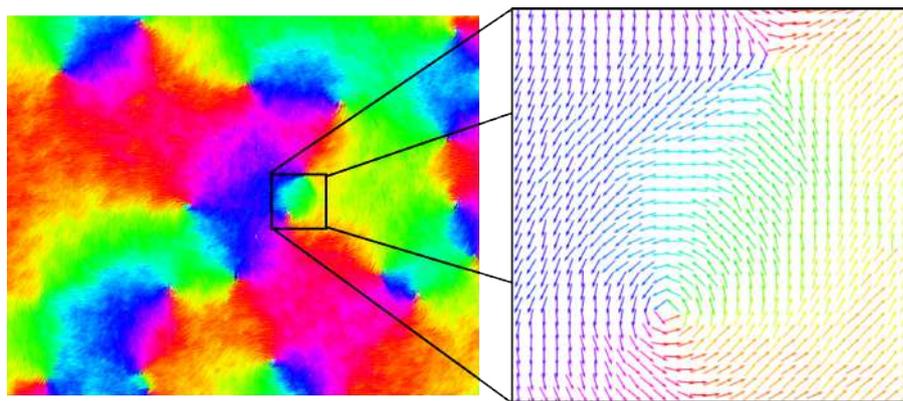
Já para o Módulo de Helicidade, mesmo para grandes tamanho de rede, é perceptível uma diminuição característica do valor médio, conforme se aproxima de T_c , como mostra as séries temporais da Figura 14.

Figura 14 – Séries temporais do Módulo de Helicidade do Modelo XY 2D, com $L = 512$ após o tempo de relaxação, para diferentes temperaturas.



Estruturalmente, mesmo em temperaturas muito baixas, o sistema descrito pelo modelo XY não atinge uma fase completamente ordenada. A presença de vórtices e antivórtices na rede, como ilustrado na Figura 15, evidencia a relevância desses defeitos topológicos na dinâmica do sistema: em temperaturas próximas do zero, a formação de padrões rotacionais induz uma distribuição contínua das orientações dos spins em todas as direções no plano XY. Como consequência, a soma vetorial dos momentos de spin ao longo da rede tende a se anular, resultando em uma magnetização líquida praticamente nula.

Figura 15 – Simulação do Modelo XY 2D, $L = 250$, $T = 0.04$



Além disso, similarmente ao modelo de Ising, o modelo XY também exibe uma mudança de comportamento associada ao surgimento de regimes caóticos (CHIU; TEITEL, 1990). O conjunto dessas características únicas tornam o modelo XY palco de relevância ímpar para o entendimento de dinâmica de defeitos topológicos.

4 MULTIFRACTAL DETRENDED FLUCTUATION ANALYSIS (MF-DFA)

Na perspectiva do mercado de ações, as flutuações nos preços e retornos resultam de uma ampla gama de fatores intrínsecos à dinâmica do sistema. Elementos como diferenças temporais para a tomada de decisões, diferenças das estratégias de investimento, níveis variados de acesso à informação entre os agentes e fenômenos comportamentais, como a euforia do mercado, contribuem significativamente para essa heterogeneidade nas oscilações. Essa diversidade de causas potenciais e a interação entre elas ampliam a complexidade do sistema de tal forma que ele não pode ser adequadamente descrito por um único expoente de escala fractal. Nesse contexto, análises multifractais em séries temporais se destacam como ferramentas robustas, capazes de capturar e quantificar a complexidade intrínseca de sistemas análogos (FONSECA, 2012).

A Multifractal Detrended Fluctuation Analysis (MF-DFA) (KANTELHARDT et al., 2002) é uma técnica utilizada para identificar e quantificar propriedades multifractais em séries temporais não estacionárias¹. Essa metodologia permite detectar correlações de longo alcance e variações de escala em dados complexos. Estrategicamente usada em diversos campos do conhecimento, com o objetivo de verificar mudanças de comportamento através de séries temporais extraídas de diferentes contextos, a fim de detectar anomalias, como: no mercado de ações (DEWANDARU et al., 2015), na análise de atividades sísmicas (TELESCA; LAPENNA, 2006), na taxa de batimento cardíaco (WANG et al., 2021), entre outros. Este método é uma extensão do método DFA (*Detrended Fluctuation Analysis*) (KANTELHARDT et al., 2001), que analisa características fractais em séries temporais.

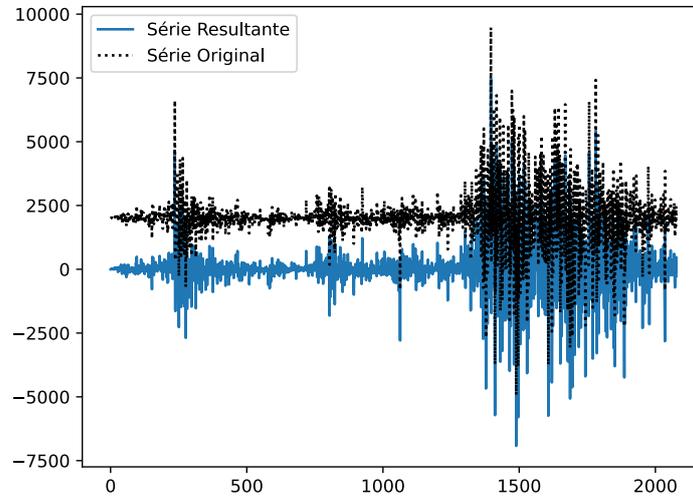
4.1 DETRENDED FLUCTUATION ANALYSIS (DFA)

Inicialmente proposto para analisar variações de padrões complexos e correlações em sequências de nucleotídeos no DNA (PENG et al., 1994), o DFA se trata de um método computacional com finalidade de extrair uma aproximação do expoente de Hurst de uma série temporal. O coeficiente de Hurst (H), trata-se de uma medida que quantifica memória de longo prazo e autocorrelações de uma série temporal.

Devido a essas características, o estudo do expoente H mostra-se relevante para a análise de criticalidade e transições de fase. Já que, em sistemas complexos, a proximidade de pontos críticos está frequentemente associada a um aumento na complexidade estrutural e na organização das dinâmicas internas. Essas mudanças, que incluem o aumento do comprimento de

¹ Uma série temporal não estacionária é uma série cujas propriedades estatísticas, como a média, a variância e a autocorrelação, mudam ao longo do tempo. Em outras palavras, ela não possui uma distribuição constante ao longo de seu período de observação. Essas séries tendem a ter tendências, sazonalidades ou outras variações estruturais que causam mudanças em seus padrões.

Figura 16 – Subtração da série temporal pela média



correlação (ξ) e padrões intrincados, podem ser detectadas por meio da análise das correlações temporais presentes nas séries temporais do sistema. Nessa circunstância, é natural pensar em usar a conhecida função de autocorrelação ($C(s)$).

4.1.1 Função de autocorrelação

Fornecida uma série temporal $\{x(i)\}$, $C(s)$ é dada pela equação 4.1, que se trata de fazer uma convolução ² da série com ela mesma, onde $\bar{x}_i = x_i - \langle x \rangle$. A subtração da série por sua média é motivada pela tentativa de tirar deslocamentos constantes nos dados, ou seja, é uma forma de tirar a tendência (esquemático na Figura 16).

$$C(s) = \langle \bar{x}_i \bar{x}_{i+s} \rangle = \frac{1}{N-s} \sum_{i=1}^{N-s} \bar{x}_i \bar{x}_{i+s} \quad (4.1)$$

Se $C(s)$ decresce exponencialmente, $C(s) \sim e^{-s/s_x}$, com decaimento s_x , significa que a série tem correlações de curto alcance. Por outro lado, quando a série apresenta correlações de longo alcance, $C(s)$ decresce com uma lei de potência, dada pela equação 4.2 com expoente γ que varia de 0 a 1, Em que $\gamma \rightarrow 0$ evidencia autocorrelação forte, enquanto $\gamma \rightarrow 1$ se trata de uma série descorrelacionada (como a famosa caminhada aleatória).

$$C(s) \propto s^{-\gamma} \quad (4.2)$$

² A convolução envolve deslocar uma função ao longo de outra, multiplicando os valores sobrepostos para cada deslocamento, essa operação revela como as formas das duas funções interagem entre si ao longo do tempo ou do espaço.

O uso da $C(s)$ geralmente é bastante útil, porém um cálculo direto algumas vezes pode não ser apropriado devido ao ruído sobreposto aos dados coletados e devido às tendências subjacentes de alguma origem. Na prática, o objetivo é analisar as flutuações em torno dessas tendências. Este é o motivo pelo qual, no cenário que é analisar séries temporais tão complexas quanto a de sistemas em transição de fase, é preferível o uso do DFA em vez do cálculo $C(s)$.

4.1.2 Método DFA

Suponha uma série temporal $\{x(k)\}$,

- Passo 1: Subtrair todos os dados da média do conjunto, análogo ao efetuado no cálculo de $C(s)$.

$$\bar{x}_k = x_k - \langle x \rangle \quad (4.3)$$

- Passo 2: Integrar a Série $x(i)$:

$$Y(i) = \sum_{k=1}^i \bar{x}_k \quad (4.4)$$

- Passo 3: Dividir $Y(i)$ em N_s "caixas" de exato comprimento s . Portanto $N_s \equiv N/s$, onde N é o comprimento total da série temporal. Com essa operação nem sempre N_s vai resultar num número inteiro, portanto deve-se utilizar $N_s \equiv \text{int}(N/s)$. Esse procedimento, entretanto, frequentemente deixa um trecho residual da série, de comprimento $s_x < s$, que não pertence a caixa nenhuma. Para considerar esse resíduo, pode-se duplicar a série original e fazer um corte de comprimento s_x nas extremidades, inicial e final, da série resultante, Figura 17. Com o custo de lidar com uma série com praticamente o dobro do tamanho da original, garante-se a cobertura completa da série, incluindo os trechos residuais que seriam ignorados.
- Passo 4: Calcular a tendência local de cada caixa v , através de um ajuste Polinomial p de grau n . O grau do polinômio denomina o método utilizado (DFA1, DFA2,... DFA n), e sua escolha deve ser adequada à tendência específica da série analisada. No Passo 7, será apresentada uma abordagem para identificar o ajuste mais apropriado, garantindo que a análise seja realizada de maneira consistente e eficaz.
- Passo 5: Subtrair cada segmento pelo valor respectivo do seu ajuste, feito na equação 4.5.

$$Y_s(i) = Y(i) - p_v(i) \quad (4.5)$$

Figura 17 – Acomodação da série em $2N_s$ caixas, em destaque o excedente de tamanho s_x .

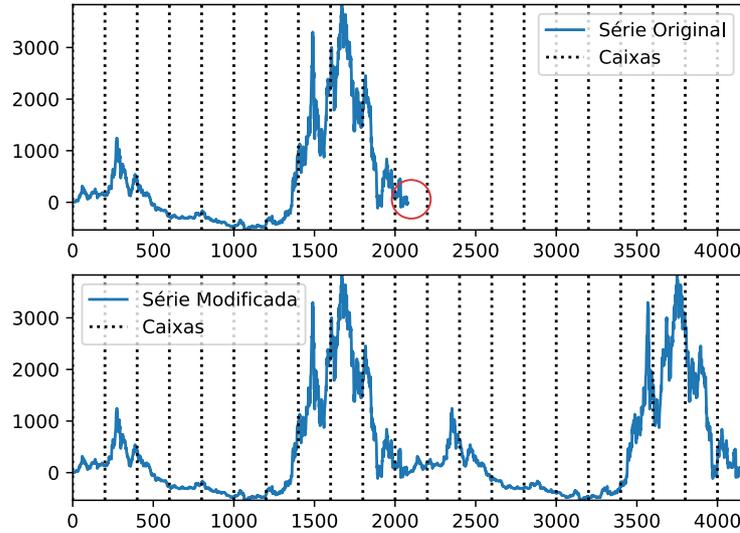
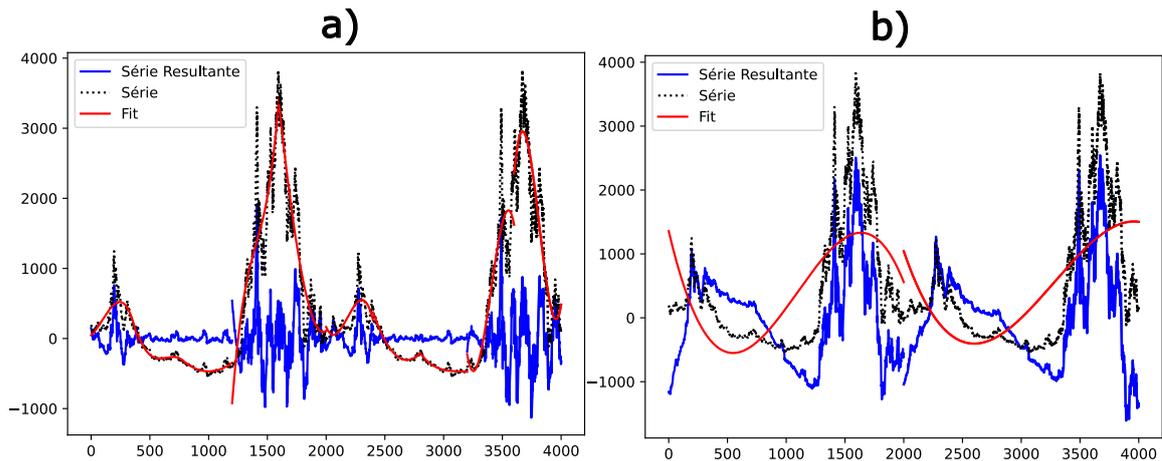


Figura 18 – Série original e a resultante após o Passo 5, com ajuste polinomial de grau 3, com divisão em caixas de tamanho a)400 b)2000



- Passo 6: Calcular a Variância em cada caixa:

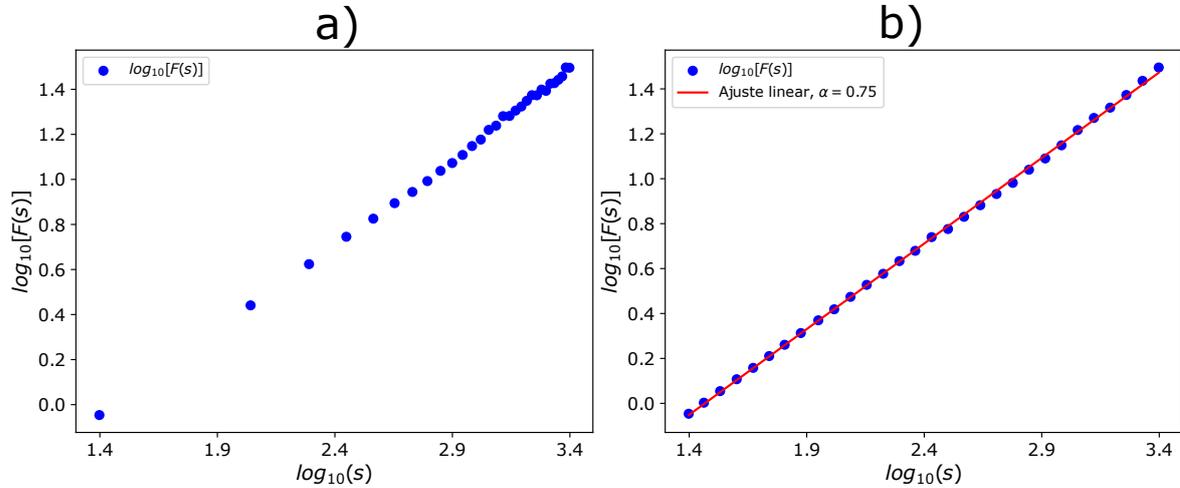
$$F_s^2(\nu) = \langle Y_s^2(i) \rangle \tag{4.6}$$

- Repetir o procedimento para diferentes tamanhos s de caixas. Recomenda-se utilizar tamanhos $s \in [10, N/4]$, pois fora desse intervalo a estatística tende a se tornar pouco confiável (KANTELHARDT et al., 2002). Assim, é possível determinar a Função de Flutuação:

$$F(s) = \left[\frac{1}{2N_s} \sum_{\nu=1}^{2N_s} F_s^2(\nu) \right]^{1/2} . \tag{4.7}$$

É evidente na Figura 18 que, à medida que o comprimento s das caixas aumenta, a variância da série resultante também cresce. Consequentemente, espera-se que a função de flutuação $F(s)$ seja uma função crescente em relação a s . Além disso, se os dados apresentarem

Figura 19 – Valores de $\log[F(s)]$ calculados de um movimento browniano fracionado com $H = 0.75$, a partir de uma disposição de caixas s em intervalo (a) linear uniforme e (b) logarítmico com seu respectivo ajuste linear no gráfico log-log.



correlações de longo alcance, $F(s)$ crescerá segundo uma lei de potência:

$$F(s) \propto s^\alpha. \quad (4.8)$$

Essa equação pode ser linearizada através da aplicação do logaritmo natural em ambos os lados. Assim, o cálculo de H é realizado identificando-se o coeficiente angular da reta obtida no ajuste linear dos dados:

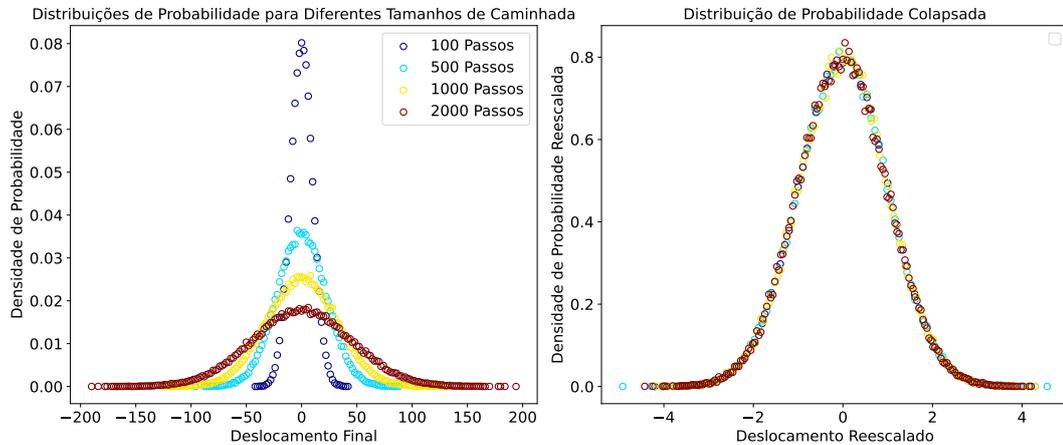
$$\log F(s) \propto H \log s. \quad (4.9)$$

Devido à transformação logarítmica na equação 4.9, se os tamanhos s das caixas forem escolhidos a partir de um intervalo linear uniforme, os pontos no gráfico $\log F(s)$ serão distribuídos de maneira irregular, como mostrado na Figura 19(a). Esse comportamento pode dificultar a obtenção de um ajuste confiável. Para superar essa limitação, recomenda-se utilizar tamanhos de caixa espaçados em intervalos logarítmicos, garantindo uma distribuição mais uniforme dos dados no gráfico log-log e facilitando a análise. O expoente de Hurst então será o coeficiente angular da linha ajustada no gráfico log-log resultante.

A escolha do grau do polinômio (conforme descrito no passo 4), deve ser feita de maneira a obter o melhor ajuste possível, como evidenciado na análise de um movimento Browniano fracionário³ na Figura 19 (b). Se a função de flutuação não for devidamente ajustada, isso pode indicar duas possibilidades principais: os dados analisados podem não apresentar características fractais ou o grau do polinômio utilizado no ajuste do DFA pode não ser o adequado para capturar a tendência da série.

³ O movimento Browniano fracionado se refere à generalização do movimento Browniano clássico, onde as trajetórias exibem dependências temporais de longo alcance. Ele é usado para modelar dinâmicas que não seguem a difusão padrão, como em sistemas complexos onde há correlações temporais ou espaciais. A força da correlação é determinada pelo expoente de Hurst.

Figura 20 – Distribuições de probabilidade dos deslocamentos finais, de 100000 caminhantes, em uma caminhada aleatória unidimensional para diferentes tamanhos de caminhada N . O colapso, através do reescalonamento pelo fator N^α , evidencia a invariância de escala característica de um *random walk*



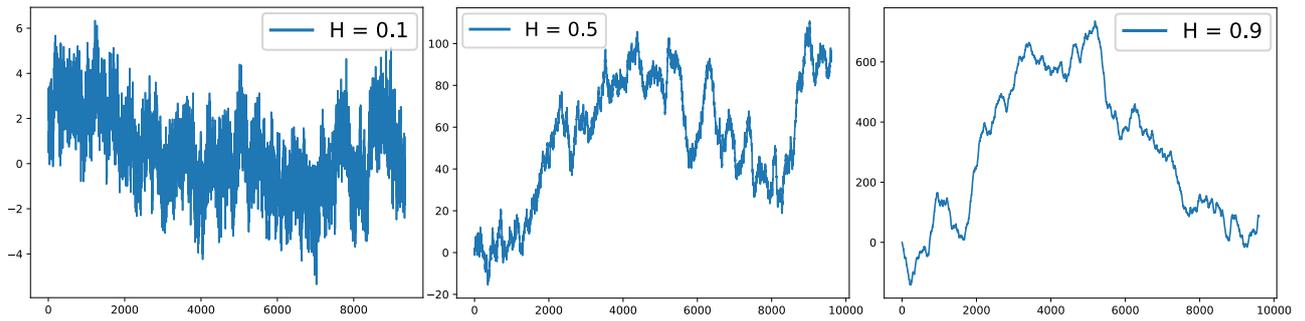
4.1.3 Discussões sobre o expoente α

O comportamento de lei de potência, previsto na equação 4.8, indica que a função de flutuação $F(s)$ escala de maneira previsível com o tamanho da janela s , evidenciando que os dados seguem uma lei de escala. Tal comportamento é característico de séries que apresentam autossimilaridade estatística ou invariância de escala, propriedades típicas de sistemas fractais. Isso significa que, qualitativamente, o sistema exibe padrões semelhantes em diferentes escalas de observação, independentemente do tamanho da "caixa" considerada na análise. A distinção quantitativa, entre os valores de propriedades estatísticas, em diferentes escalas pode ser desfeita através de um reescalonamento apropriado, seguindo a lei de potência. Esse reescalonamento permite a unificação das flutuações observadas, tornando evidente a invariância de escala.

Ao analisar as distribuições de probabilidade de uma série em diferentes janelas de observação, é esperado que o formato da distribuição se modifique, uma vez que a escala temporal ou espacial influencia diretamente as propriedades estatísticas da série, como a variância. Entretanto, essas distribuições podem ser relacionadas entre si por meio de uma lei de escala, em que os valores são reescalados por um fator de normalização proporcional à escala s^α . Esse procedimento permite o colapso das distribuições em uma única distribuição universal, como ilustrado na Figura 20. Essa distribuição universal captura de forma consistente as propriedades estatísticas do sistema em todas as escalas analisadas. A lei de potência, portanto, atua como um mecanismo de unificação, confirmando a presença de autossimilaridade e evidenciando a invariância de escala, características fundamentais de séries temporais e sistemas complexos com comportamento fractal.

O expoente α , presente na lei de potência, desempenha um papel central no método DFA, fornecendo uma estimativa direta do *expoente de Hurst* H . Este último está intimamente relacionado à *dimensão fractal* D , que caracteriza a complexidade ou irregularidade da série

Figura 21 – Exemplos de Séries Temporais e seus respectivos Expoentes de Hurst em destaque



analisada. Para séries temporais, essa relação é expressa como $D = 2 - H$ (FEDER, 1988). Além disso, existe uma relação entre H e o expoente γ , associado à função de autocorrelação $C(s)$, conforme descrito na equação 4.10. Portanto, o expoente de Hurst encapsula todos esses aspectos, conectando a fractalidade de sistemas complexos às suas propriedades de autossimilaridade e memória de longo alcance.

$$H = 1 - \gamma/2 \quad (4.10)$$

Para séries descorrelacionadas ($\gamma \rightarrow 1$), a expressão 4.10 conduz a $H \rightarrow 0.5$, caracterizando um comportamento de ruído branco sem correlações de longo alcance. Por outro lado, para sistemas com fortes correlações de longo alcance ($\gamma \rightarrow 0$), obtém-se $H \rightarrow 1$, indicando persistência elevada no comportamento da série. Adicionalmente, valores de $H < 0.5$ indicam que a série é *antipersistente*, o que significa que, para cada "passo" em uma direção, existe uma maior probabilidade de o próximo ser na direção contrária. Esse comportamento gera uma série altamente *irregular e ruidosa*, contrastando com o caso de $H \rightarrow 1$, onde a série apresenta uma maior suavidade devido à persistência das flutuações, diferenças ilustradas nos gráficos da Figura 21.

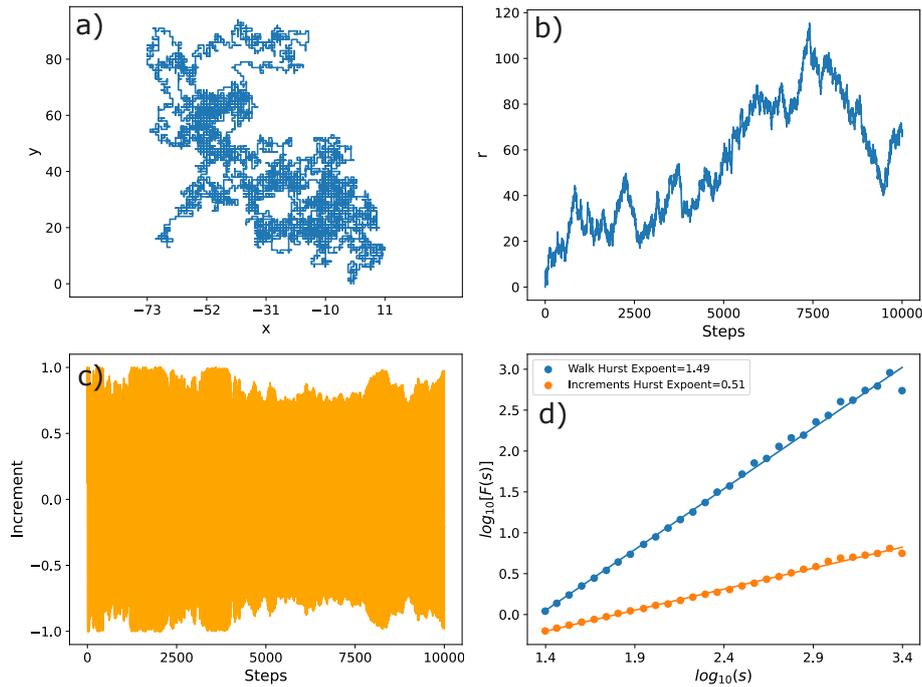
O DFA é uma ferramenta poderosa para a análise de séries temporais, mas requer cuidado na escolha e no tratamento dos dados. No caso dos resultados apresentados na Figura 21, o DFA foi aplicado sobre os incrementos⁴ das séries, e não diretamente sobre os valores absolutos da série original.

Supondo que o DFA fosse aplicado propriamente nas séries da Figura 21 (que nada mais são do que a integral dos seus respectivos incrementos: $Y_i = \sum_{k=1}^i x_k$), os valores encontrados seriam acrescidos de uma unidade no expoente. Isso decorre diretamente do processo de integração, já que ela adiciona uma dependência acumulativa entre os valores. Visto que as flutuações em Y_i não são mais independentes, mas dependem diretamente de todas as flutuações anteriores a

⁴ No contexto de séries temporais, os incrementos correspondem às diferenças entre valores consecutivos da série. Podem ser interpretados como uma derivada discreta, representando as variações ou "passos" que ocorrem de um ponto a outro na sequência.

x_i . Por exemplo, ao considerar uma série de ruído branco, cujo expoente de Hurst é $H = 0.5$, e integrá-la (transformando-a em um passeio aleatório acumulado, ou *random walk*), o expoente resultante será $H = 1.5$, como visto na Figura 22.

Figura 22 – a) Caminhada aleatória em 2 Dimensões. b) Distância r do caminhante à origem, passo a passo. c) Valores dos incrementos da caminhada, passo a passo. d) Função de Flutuação $F(s)$ e valores dos expoentes de Hurst retirados das séries temporais “b” e “d”.



Embora o DFA seja amplamente reconhecido como uma ferramenta eficaz para identificar correlações de longo alcance em séries temporais, ele pode não ser suficiente para analisar séries que exibem múltiplas escalas de correlação ou multifractalidade que são manifestadas somente através do Expoente de Hurst Generalizado, ($H(q)$), o qual pode ser obtido a partir do MF-DFA.

4.2 MÉTODO MF-DFA

A priori o MF-DFA segue os mesmos fundamentos do DFA, porém com uma modificação na definição da função de flutuação $F(s)$. A generalização ocorre no passo 7, onde é incluso um parâmetro de ordem q , resultando na expressão:

$$F_q(s) = \left\{ \frac{1}{2N_s} \sum_{v=1}^{2N_s} [F_s^2(v)]^{q/2} \right\}^{1/q}. \quad (4.11)$$

O parâmetro q desempenha um papel análogo aos momentos de ordem na Mecânica Estatística, permitindo que diferentes aspectos da distribuição de flutuações sejam analisados. Valores de q destacam diferentes regimes de amplitude na série: valores negativos atribuem maior

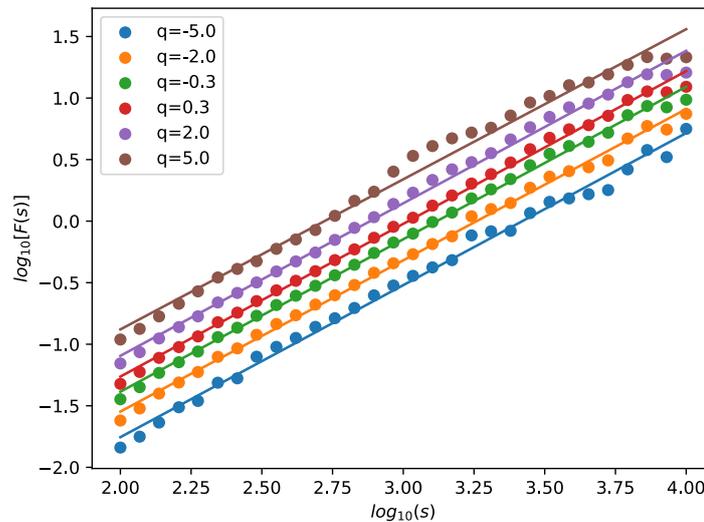
peso às flutuações de pequena amplitude (baixa variância), enfatizando as regiões mais suaves do sistema, enquanto valores positivos ressaltam as flutuações de grande amplitude, privilegiando as regiões com variações mais intensas. Caso os pontos $F_q(s)$ são dispersos para algum q , isso indica que para aquele valor o comportamento multifractal da série está apresentando irregularidades ou ruídos que dificultam a descrição consistente das flutuações.

Contudo, na equação 4.11, observa-se uma divergência quando $q = 0$, devido ao termo “ $1/q$ ”. Para contornar essa limitação, a função de flutuação para $q = 0$ é calculada separadamente:

$$F_0(s) = \exp \left\{ \frac{1}{4N_s} \sum_{v=1}^{2N_s} \ln [F_s^2(v)] \right\}. \quad (4.12)$$

Desta forma é possível obter várias curvas de $F_q(s)$, em que $F_q(s) \propto s^{H(q)}$, onde $H(q)$ representa o expoente de Hurst generalizado, e $H(2)$ é o Coeficiente de Hurst Clássico. Para cada valor de q é obtida uma curva específica. Deste modo, ao efetuarmos uma mudança de escala log-log, análogo ao realizado no método DFA, pode-se extrair $H(q)$ pelo coeficiente angular de cada uma das curvas resultantes, ilustradas na Figura 23.

Figura 23 – Função de Flutuação $F_q(s)$ para alguns q 's, em escala log-log



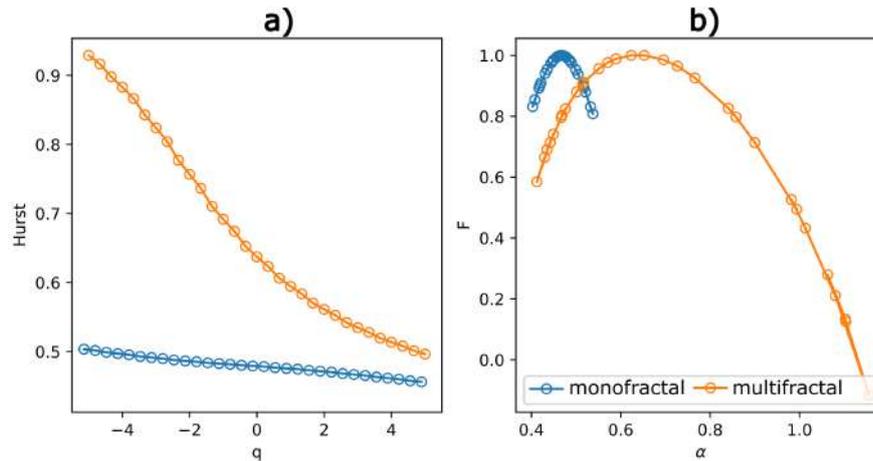
4.3 DISCUSSÕES SOBRE O EXPOENTE DE HURST GENERALIZADO

O expoente de Hurst de um série Monofractal é independente de q . Enquanto que uma série Multifractal é evidenciada por uma variação do expoente de Hurst em relação a q , como visto na Figura 24. Porém, há outra propriedade essencial para a identificação de multifractalidade, o espectro de singularidade $f(\alpha)$, que é calculado a partir da função de escalabilidade $\tau(q)$ - Equação 4.13- via Transformação de Legendre - Equação 4.14-. Feito isso, o principal meio de quantificar a multifractalidade é através da largura do espectro $W = \alpha_{max} - \alpha_{min}$, quanto maior for o valor de W maior será a multifractalidade da série (STOŠIĆ et al., 2015).

$$\tau(q) = qH(q) - 1 \tag{4.13}$$

$$\alpha = \tau'(q), f(\alpha) = q\alpha - \tau(q) \tag{4.14}$$

Figura 24 – Comportamento de uma série Monofractal x Multifractal a partir do a) $H(q)$ b) $f(\alpha)$



Perceba que nem sempre o $H(q)$ de uma Série Monofractal é realmente constante, pois o MF-DFA se trata de um método numérico, e possui erros intrínsecos. Entretanto, quando comparado com um comportamento Multifractal é visível a diferença. De toda forma, para ser mais preciso, qualquer comportamento que se assemelhar à curva azul da Figura 24 será denominado "Frac Multifractalidade".

Entretanto, o método MF-DFA torna-se menos preciso à medida que os dados apresentam forte *antipersistência*, $H(q) \rightarrow 0$. Nesses casos, métodos alternativos são frequentemente adotados para garantir maior robustez na análise. Um dos métodos mais conhecidos e simples consiste em integrar a série temporal antes de submetê-la ao MF-DFA. Esse procedimento modifica o expoente de Hurst, conforme já mencionado, resultando em um valor ajustado dado por $\tilde{H}(q) = H(q) + 1$. Essa abordagem permite compensar as limitações do MF-DFA em séries fortemente antipersistentes, preservando a validade das inferências estatísticas e multifractais.

O método MF-DFA ainda permite ainda identificar tipos multifractalidade: (i) Multifractalidade devido à distribuições de probabilidade largas e (ii) Multifractalidade devido a correlações de longo alcance.

Na multifractalidade do tipo (i) as flutuações de diferentes magnitudes são associadas a diferentes escalas, indicando que a série possui variação muito grande de valores, incluindo extremos significativos, de maneira sobreposta. Esse tipo de multifractalidade está relacionado à presença de caudas pesadas na distribuição de probabilidades dos dados, como distribuição de Lévy, onde flutuações grandes e pequenas coexistem, contribuindo de forma desigual para as propriedades estatísticas do sistema.

Já na multifractalidade do tipo (ii) as dependências temporais ou espaciais entre os valores da série são a principal fonte de multifractalidade, como séries do tipo binomial multifractal. As flutuações em diferentes partes da série não são independentes, mas apresentam correlações que se mantêm em múltiplas escalas, indicando a presença de memória ou persistência que varia de acordo com a magnitude das flutuações.

Para distinguir entre esses dois tipos de multifractalidade, é comum realizar o procedimento de *shuffle*. Esse método embaralha aleatoriamente os valores da série temporal, destruindo as correlações de longo alcance enquanto preserva a distribuição de probabilidades original. A aplicação do MF-DFA à série embaralhada permite avaliar a contribuição da distribuição de probabilidade para a multifractalidade, já que as correlações são eliminadas.

Ao comparar os resultados do MF-DFA na série original e na série embaralhada, é possível separar os efeitos da distribuição de probabilidades e das correlações de longo alcance. Se a multifractalidade persiste após o *shuffle*, isso indica que ela é predominantemente do tipo (i). Por outro lado, se a multifractalidade diminui ou desaparece, ela é majoritariamente do tipo (ii). Dessa forma, o procedimento de *shuffle* é uma ferramenta fundamental para a compreensão detalhada das origens da multifractalidade em séries temporais. Demais exemplos, representações e esclarecimentos podem ser encontrados na referência base (KANTELHARDT et al., 2002).

5 METODOLOGIA

A finalidade deste trabalho é analisar séries temporais de observáveis do modelo XY em redes quadradas (2D) e cúbicas (3D), ambas com condições de contorno periódicas, utilizando MF-DFA. O objetivo principal é identificar possíveis diferenças qualitativas de comportamento multifractal entre sistemas que possam ser identificadas a partir dessa abordagem.

Os resultados apresentados foram obtidos a partir de séries temporais de 50 mil pontos, registradas após o tempo de relaxação dos sistemas. As análises foram realizadas para os observáveis mais relevantes: energia, magnetização e módulo de helicidade, considerando um intervalo de temperatura de $\Delta T = 0.01$.

Em relação aos parâmetros do método MF-DFA: as escalas de caixas consideradas estavam no intervalo $s \in [100, 12500]$, distribuídas em escala logarítmica com 30 pontos; o ajuste polinomial aplicado foi de grau 3, uma escolha justificada pelos melhores ajustes lineares obtidos para a maioria das funções de flutuação $F_q(s)$; 30 valores do parâmetro de ordem $q \in [-5, 5]$ foram utilizados; o método com *shuffle* foi aplicado, mas não revelou características multifractais pronunciadas atribuíveis à ampla distribuição de probabilidades. Assim, pode-se inferir, de antemão, que quaisquer propriedades de multifractalidade presentes nos dados são predominantemente decorrentes de correlações de longo alcance na série temporal.

Inicialmente, os observáveis foram analisados de forma abrangente, com o objetivo de identificar padrões gerais no comportamento dos sistemas e determinar quais variáveis apresentariam maior potencial para diferenciar os modelos investigados, motivo pelo qual a faixa de largura de redes consideradas nessa etapa foi ampla: em redes quadradas com $L = \{32, 64, 128, 256, 512, 1024\}$ e em redes cúbicas com $L = \{32, 64\}$. Essa análise preliminar permitiu o refinamento do escopo na segunda etapa, focando nos observáveis que apresentaram maior relevância qualitativa. Os resultados preliminares estão exibidos nos apêndices A, B e C.

Para o observável energia, em ambos os modelos (XY2D e XY3D), os resultados indicaram um aumento significativo do expoente de Hurst na vizinhança da temperatura crítica, com valores de $H(q)$ próximos de 1. Em regiões fora do regime crítico, os valores de $H(q)$ variaram tipicamente entre 0,5 e 0,75. No entanto, em relação à multifractalidade, os resultados não evidenciaram características relevantes. Os valores de W permaneceram consistentemente baixos em todos os casos, indicando pouca multifractalidade nas séries temporais ao longo do espectro de temperaturas. Nesse contexto, não foram observadas diferenças significativas entre os dois modelos ou entre os tamanhos de rede analisados, sugerindo que a energia não é um parâmetro adequado para caracterizar transições de fase não convencionais.

Por outro lado, as análises das séries temporais de magnetização e módulo de helicidade revelaram diferenças significativas entre os modelos e em função do tamanho da rede. Para

o modelo XY2D, o aumento da dimensão da rede resultou em variações mais pronunciadas. Contudo, os resultados para $L = 512$ e $L = 1024$ foram qualitativamente semelhantes, sugerindo um comportamento de saturação de escala dentro dessa metodologia, levando à escolha de $L = 1024$ para a análise final. Para o modelo XY3D, não foram observadas alterações relevantes nos valores de $H(q)$ entre as redes com $L = 32$ e $L = 64$. Tal comportamento justifica a escolha de $L = 64$ para a análise final.

Na segunda etapa, os cálculos foram realizados a partir de médias obtidas de 20 séries temporais distintas para cada parâmetro selecionado. Esse número de amostras foi definido visando suavizar as curvas dos expoentes de Hurst, melhorando a qualidade da visualização e a confiabilidade estatística, sem comprometer significativamente o tempo computacional. A visualização de como as médias influenciam nos gráficos obtidos pode ser encontrados na Figura 47, no apêndice C.

Os critérios metodológicos empregados na segunda etapa foram idênticos aos da análise inicial, aplicados exclusivamente aos observáveis que demonstraram maior relevância qualitativa para o escopo deste trabalho: Magnetização e Módulo de Helicidade. Esse refinamento permitiu uma análise mais robusta e direcionada, consolidando os resultados obtidos.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

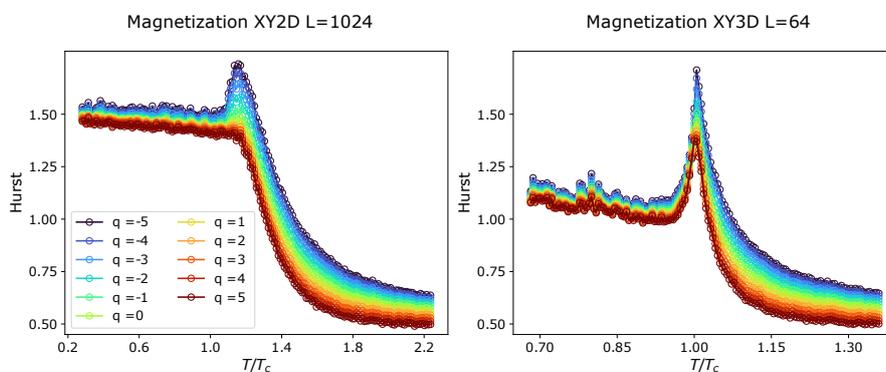
Análises sobre o expoente de Hurst generalizado ($H(q)$), são geralmente apresentados na forma da Figura 24. Entretanto, quando o número de séries temporais analisadas é grande, esse modo torna a visualização muito sobrecarregada. Neste trabalho, por exemplo, foram analisados em média 165 valores de temperatura para cada sistema, o que inviabiliza a visualização conjunta de todas essas séries no gráfico $H(q)$. Portanto, é necessário empregar técnicas de apresentação mais eficazes.

Uma abordagem eficiente para análise consiste na utilização de mapas de calor, os quais permitem representar, de forma condensada e clara, a distribuição dos expoentes em todo o intervalo de temperaturas analisado. Outra alternativa é a apresentação de curvas $H(q)$ em função da temperatura (T) para diferentes valores de q , ou seja, na forma $H(T, q)$. Ambas as técnicas fornecem essencialmente a mesma informação, diferenciando-se apenas na facilidade relativa de visualizar melhor alguns parâmetros em detrimento de outros.

6.1 MAGNETIZAÇÃO

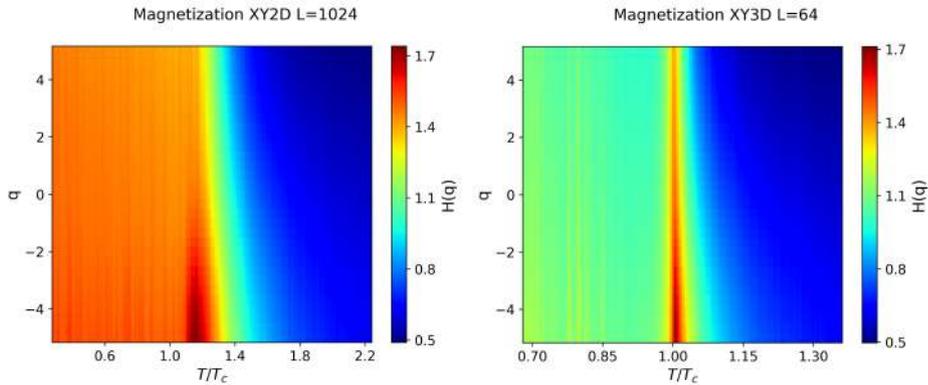
Em ambos os sistemas, verificou-se que para $T \gg T_c^1$, $H(T, q = 2)$ se aproxima de 0.5, indicando que as séries temporais comportam-se como incrementos de uma caminhada aleatória, característicos de processos não persistentes e dominados por flutuações aleatórias. Conforme $T \rightarrow T_c$, os valores crescem, atingindo um máximo próximo à temperatura crítica. No modelo XY3D, o máximo ocorre exatamente em $T = T_c$, enquanto no modelo XY2D o máximo é deslocado, ocorrendo em $T \sim 1.15T_c$, como evidenciado nas Figuras 25 e 26.

Figura 25 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c , para diferentes ordens q .



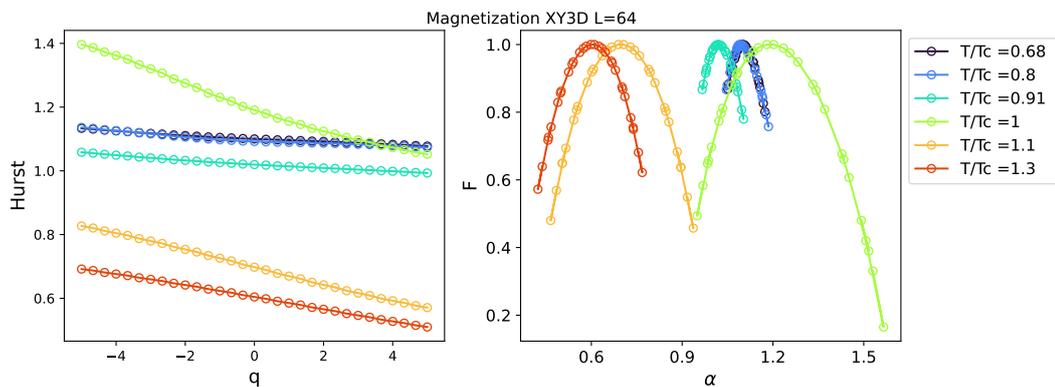
¹ Nesta parte do trabalho, para fins de simplicidade na comparação entre os modelos, refere-se à temperatura de transição T_{KT} no modelo XY2D como T_c , embora, como já discutido no capítulo 2, a transição de Kosterlitz-Thouless não seja uma transição de fase crítica convencional.

Figura 26 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q .



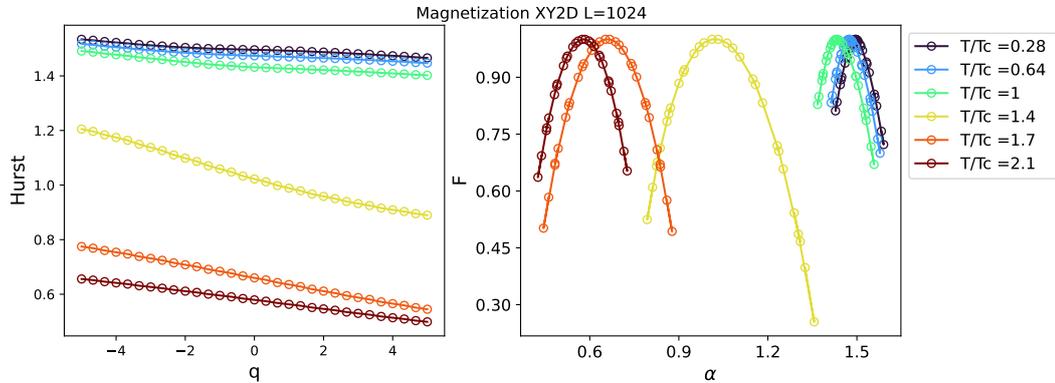
As maiores diferenças surgem no regime $T < T_c$. Na Figura 27 é visto que no modelo XY3D, as curvas $H(T < T_c, q)$ exibem um comportamento de saturação, estacionando em torno de $H \sim 1.0$. O valor $H(q = 2) = 1.0$ sugere uma persistência temporal na série temporal, indicando correlações de longo alcance mesmo abaixo da temperatura crítica. Esse comportamento é notável, pois difere do observado em transições de fase convencionais, como no modelo de Ising, onde as curvas de $H(q, T \ll T_c)$ tendem a valores próximos de 0.5 (ZHAO et al., 2017).

Figura 27 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização do modelo XY em 3 dimensões, para diferentes temperaturas relativas T/T_c .



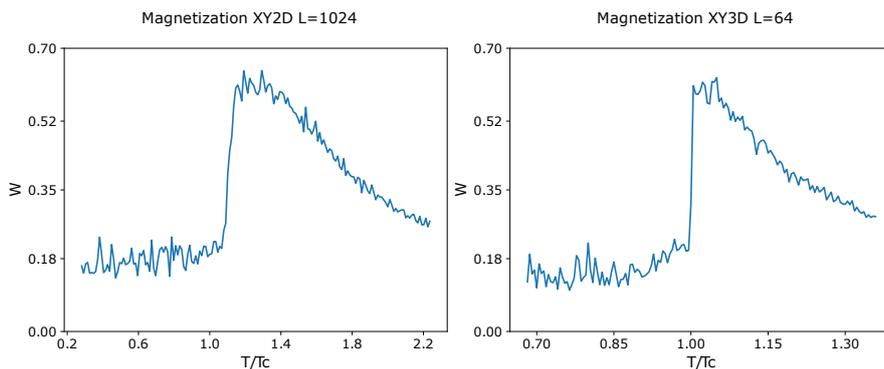
Já no modelo XY2D, as curvas de $H(q, T < T_c)$ apresentam uma dinâmica mais persistente, com os valores de $H(T < T_c, q = 2)$ estacionando em torno de $H \sim 1.5$. De forma particularmente interessante, a curva $H(q = 2, T)$, onde $q = 2$ é associada à autocorrelação do sistema, exibe uma saturação em $T \sim 1.15T_c$ e mantém-se constante em $H \sim 1.5$ para toda a região $T < T_c$. Esse comportamento sugere que, para temperaturas abaixo da crítica, as séries temporais no modelo XY2D se comportam como *random walk*, diferentemente do regime de "passos" aleatórios observado para $T \gg T_c$, visto na Figura 28.

Figura 28 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização do modelo XY em 2 dimensões, para diferentes temperaturas relativas T/T_c .



Do ponto de vista da multifractalidade, calculada pelo parâmetro W , não foram identificadas diferenças qualitativas significativas entre os modelos analisados. Para $T < T_c$, ambos os sistemas exibem baixa multifractalidade, com valores de W próximos a zero, indicando que as séries temporais são dominadas por uma única escala. Ao se aproximar da temperatura crítica T_c , observa-se um aumento abrupto de W , refletindo a complexidade adicional introduzida pela dinâmica crítica, com o máximo ocorrendo em $T = 1.15T_c$ no modelo XY2D e em $T = T_c$ no modelo XY3D. Em seguida, conforme o sistema se afasta para $T > T_c$, ocorre uma redução gradual da multifractalidade, com W retornando a valores baixos à medida que as flutuações se tornam progressivamente menos correlacionadas, mostrado na Figura 29.

Figura 29 – Largura do espectro de singularidade W , obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c



Esses resultados evidenciam a influência fundamental da dimensionalidade na dinâmica crítica dos sistemas XY, revelando que o comportamento persistente abaixo da temperatura crítica é significativamente mais acentuado em duas dimensões do que em três. Além disso, eles destacam a eficácia da técnica MF-DFA na análise de transições de fase, mesmo para a magnetização, frequentemente negligenciada no modelo XY2D, fornecendo *insights* detalhados sobre a persistência temporal e a estrutura multifractal das séries temporais associadas.

6.2 MÓDULO DE HELICIDADE

No modelo XY3D, as curvas de $H(q)$, exibidas na Figura 31, mostram um máximo moderado em $T = T_c$, indicando um aumento das correlações temporais na vizinhança da transição de fase. Fora da região crítica, $H(q)$ converge para valores próximos de 0.5, caracterizando um comportamento similar ao ruído branco, com ausência de persistência temporal relevante. Por outro lado, no modelo XY2D, o comportamento de $H(q)$, mostrados na Figura 30, é mais complexo e apresenta características adicionais. Para $T \gg T_c$, as curvas de $H(q)$ relaxam para valores próximos de 0.5, indicando um regime dominado por flutuações aleatórias. Próximo à região crítica, observa-se um máximo em $T = 1.10T_c$ seguido por um mínimo local em $T = T_c$ e um comportamento crescente conforme $T \rightarrow 0$. Esse comportamento, condensados nas Figura 32 e 33, sugere um regime crítico mais rico em estruturas temporais e correlações de longo alcance.

Figura 30 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade do modelo XY em 2 dimensões, para diferentes temperaturas relativas $T = T_c$.

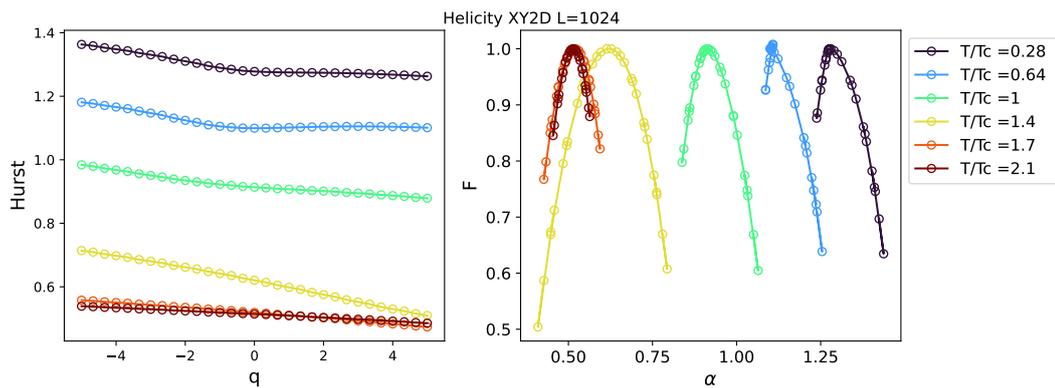


Figura 31 – Gráfico de $H(q)$ e do espectro de singularidade, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade do modelo XY em 3 dimensões, para diferentes temperaturas relativas $T = T_c$.

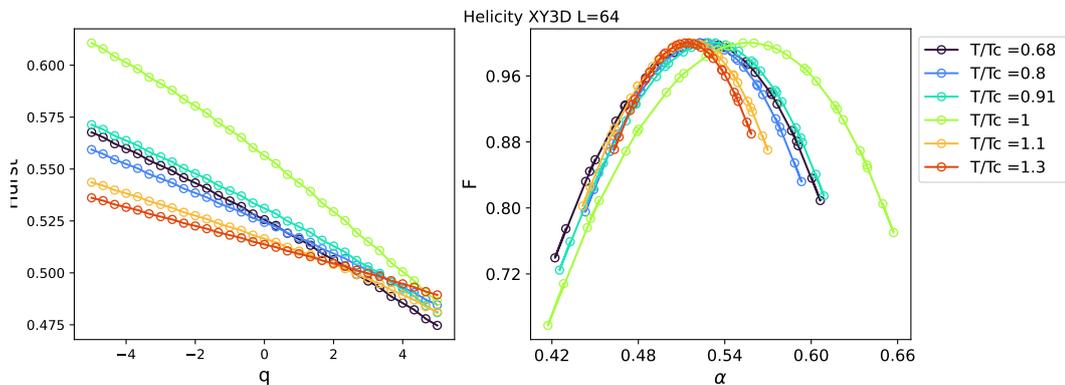


Figura 32 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q .

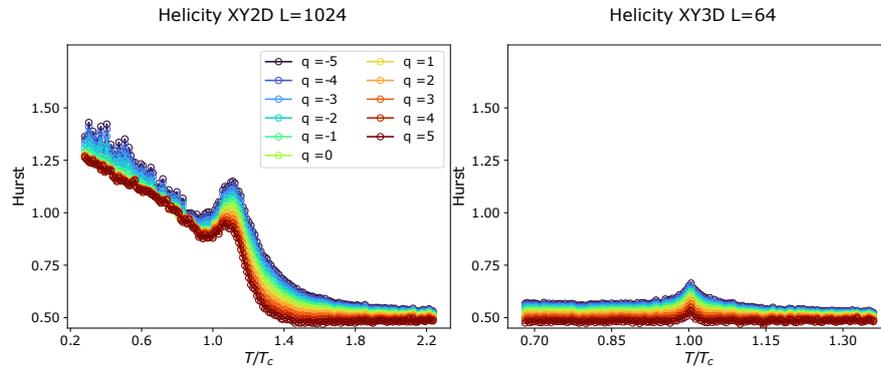
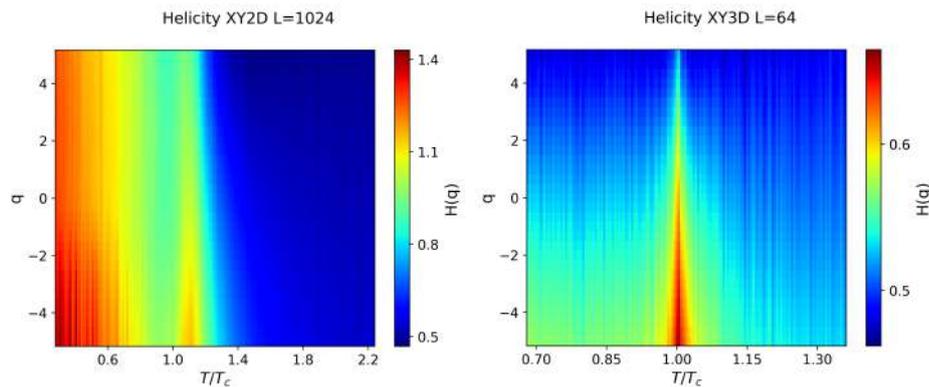


Figura 33 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q .



Em relação a largura do espectro de singularidade W , mostrado na Figura 34, o modelo XY2D apresenta um máximo mais pronunciado em $T \sim 1.2T_c$, além de apresentar um comportamento mais instável para $T < T_c$, devido à maior dispersão nos pontos de flutuação $F_q(s)$ calculada para valores negativos de q , em algumas temperaturas, como mostrado na Figura 35, que indica uma complexidade crítica associada a flutuações de pequena amplitude. Esse resultado contrasta com o modelo XY3D, no qual W se restringe a um máximo mais modesto em T_c , indicando uma multifractalidade menos expressiva, mais estável e localizada.

Figura 34 – Largura do espectro de singularidade W , obtidos a partir de uma média de 20 séries temporais do Módulo de Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c

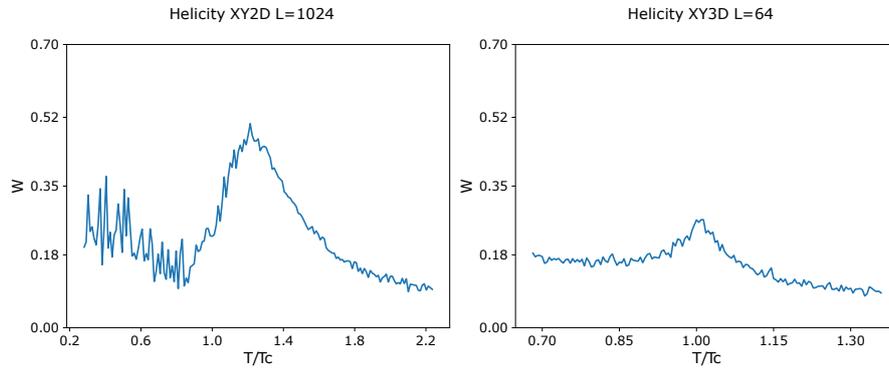
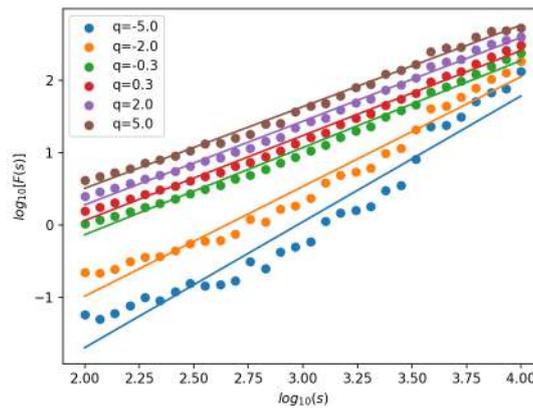


Figura 35 – Função de Flutuação $F_q(s)$ para alguns q 's, em escala log-log. Obtido a partir de uma série temporal do Módulo de Helicidade do modelo XY2D a $T = 0.49$



As diferenças observadas entre os modelos podem ser atribuídas às diferentes transições de fase atribuídas. No modelo XY2D, a criticalidade manifesta-se de maneira mais complexa, com flutuações críticas e multifractalidade acentuada, reflexo da natureza da transição de fase KT . Em contraste, no modelo XY3D, a resposta crítica é mais localizada e sutil, com menor amplitude nas flutuações temporais e menor evidência de multifractalidade.

7 CONCLUSÕES

A análise dos observáveis magnetização e módulo de helicidade nos modelos XY em duas (XY2D) e três dimensões (XY3D), utilizando a técnica de análise multifractal baseada na flutuação (*Multifractal Detrended Fluctuation Analysis* - MF-DFA), revelou comportamentos críticos distintos entre as diferentes dimensões e destacou a eficácia da metodologia para a caracterização de transições de fase não convencionais.

No modelo XY2D, os resultados indicaram uma multifractalidade acentuada, evidenciada pela forte dependência do expoente de Hurst generalizado, $H(q)$, em relação ao parâmetro de ordem q . Essa característica foi particularmente marcante na análise da magnetização, um observável que, tradicionalmente, é negligenciado para analisar transições de fase em sistemas bidimensionais de spins. Ademais, o comportamento complexo do Módulo de Helicidade na região crítica $T < T_c$ também reforça a sensibilidade do método MF-DFA para capturar as dinâmicas complexas desses sistemas.

No modelo XY3D, o comportamento multifractal foi menos pronunciado, com uma dependência mais sutil de $H(q)$, especialmente em temperaturas abaixo da crítica. A análise do módulo de helicidade e da magnetização indicaram um comportamento crítico mais localizado em torno de T_c , caracterizado por máximos mais estreitos e valores absolutos de $H(q)$ menos expressivos em comparação ao modelo XY2D. Essas diferenças podem ser atribuídas à maior dimensionalidade do sistema tridimensional, o que resulta em uma região crítica menos prolongada, vide sua transição de fase convencional. Além disso, o comportamento inesperado de $H(q, T < T_c)$ observado na magnetização do modelo XY em 3D apresenta-se como uma oportunidade relevante para investigações futuras, oferecendo caminhos para uma compreensão mais aprofundada sobre a influência de estruturas topológicas, da dimensionalidade e das diferentes simetrias na dinâmica de sistemas físicos.

Em ambos os casos as variações graduais de $H(q)$ e W em regiões não críticas sugerem que esses parâmetros podem ser utilizados como indicadores de transições de fase iminentes em sistemas semelhantes. E embora seus valores absolutos variem com o aumento da largura da rede, essas mudanças não são tão expressivas a ponto de evidenciar uma lei de escala.

Desta forma a técnica MF-DFA mostrou-se promissora para caracterizar transições de fase no Modelo XY, o que o indica como uma ferramenta potencial para a identificação de comportamentos críticos em outros sistemas. Os resultados sugerem que $H(q)$ e W podem ser empregados como parâmetros sensíveis para monitoramento e previsão de transições de fase.

Estudos demonstram que a dinâmica de sistemas complexos, como o modelo de Ising em diferentes temperaturas, está profundamente relacionada às propriedades multifractais das séries temporais (ZHAO et al., 2017). Além disso, essas séries podem transitar entre dinâmicas

descorrelacionadas e correlacionadas conforme a temperatura se aproxima da região crítica teórica.

Por fim, esta investigação aprofunda a compreensão da aplicabilidade da análise multifractal em sistemas de spin, destacando a importância da dimensionalidade no comportamento crítico de sistemas físicos. Observou-se que, nos modelos XY bidimensionais e tridimensionais, a dinâmica em diferentes temperaturas está intimamente relacionada às propriedades multifractais e às autocorrelações de longo alcance presentes nas séries temporais de seus respectivos observáveis. Esses achados fornecem uma base sólida para pesquisas futuras, com potenciais aplicações em áreas como física estatística, sistemas dinâmicos e materiais críticos.

REFERÊNCIAS

- AMIT, D. J.; GOLDSCHMIDT, Y. Y.; GRINSTEIN, S. Renormalisation group analysis of the phase transition in the 2d coulomb gas, sine-gordon theory and xy-model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 13, n. 2, p. 585, 1980.
- AZEVEDO, J. R. V. Transição de fase quântica e modelos de spins frustrados. Universidade Federal de São Carlos, 2007.
- BABAEV, E.; KLEINERT, H. Nonperturbative xy-model approach to strong coupling superconductivity in two and three dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 59, n. 18, p. 12083, 1999.
- BAEK, S. K.; MINNHAGEN, P. Non-kosterlitz-thouless transitions for the q-state clock models. *Physical Review E*, APS, v. 82, n. 3, p. 031102, 2010.
- BRUSH, S. G. History of the lenz-ising model. *Reviews of modern physics*, APS, v. 39, n. 4, p. 883, 1967.
- CAMPOSTRINI, M. et al. Theoretical estimates of the critical exponents of the superfluid transition in he 4 by lattice methods. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 74, n. 14, p. 144506, 2006.
- CANOVA, G. A. Interações nemáticas competitivas no modelo xy generalizado em duas e três dimensões. 2017.
- CHIU, J.; TEITEL, S. The effect of dynamics on damage spreading in the two-dimensional classical xy model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 23, n. 17, p. L891, 1990.
- CIPRA, B. A. An introduction to the ising model. *The American Mathematical Monthly*, Taylor & Francis, v. 94, n. 10, p. 937–959, 1987.
- CURIE, P. *Propriétés magnétiques des corps a diverses températures*. [S.l.]: Gauthier-Villars et fils, 1895.
- D'ANGELO, F.; BÖTTCHER, L. Learning the ising model with generative neural networks. *Physical Review Research*, APS, v. 2, n. 2, p. 023266, 2020.
- DEWANDARU, G. et al. Developing trading strategies based on fractal finance: An application of mf-dfa in the context of islamic equities. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 438, p. 223–235, 2015.
- FEDER, J. *Fractals*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1988.
- FONSECA, E. L. d. *O estudo das propriedades multifractais de séries temporais financeiras*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2012.
- GLEISER, M. *Criação imperfeita: cosmo, vida e o código oculto da natureza*. [S.l.]: Editora Record, 2014.

GOTTLOB, A. P.; HASENBUSCH, M. Critical behaviour of the 3d xy-model: a monte carlo study. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 201, n. 4, p. 593–613, 1993.

GRABOWSKI, A.; KOSIŃSKI, R. Ising-based model of opinion formation in a complex network of interpersonal interactions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 361, n. 2, p. 651–664, 2006.

GRAVES, T. et al. A brief history of long memory: Hurst, mandelbrot and the road to arfima, 1951–1980. *Entropy*, MDPI, v. 19, n. 9, p. 437, 2017.

HASENBUSCH, M. Improved estimators for a cluster updating of o (n) spin models. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 333, n. 2, p. 581–592, 1990.

HASENBUSCH, M. The two-dimensional xy model at the transition temperature: a high-precision monte carlo study. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, IOP Publishing, v. 38, n. 26, p. 5869, 2005.

JANKE, W. Monte carlo simulations of spin systems. In: *Computational Physics: Selected Methods Simple Exercises Serious Applications*. [S.l.]: Springer, 1996. p. 10–43.

JENSEN, L. M.; KIM, B. J.; MINNHAGEN, P. Dynamic critical behaviors of three-dimensional xy models related to superconductors/superfluids. *Europhysics Letters*, IOP Publishing, v. 49, n. 5, p. 644, 2000.

JÚNIOR, A. A. *Propagação de danos para o modelo Ising em uma rede quadrada totalmente frustrada*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 1994.

JUNIOR, O. B. *Estudo da Existência da Fase de Kosterlitz-Thouless no Estado Fundamental de Rotores Quânticos*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 1997.

KANTELHARDT, J. W. et al. Detecting long-range correlations with detrended fluctuation analysis. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 295, n. 3-4, p. 441–454, 2001.

KANTELHARDT, J. W. et al. Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 316, n. 1-4, p. 87–114, 2002.

KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. In: *Basic Notions Of Condensed Matter Physics*. [S.l.]: CRC Press, 2018. p. 493–515.

KREBS, C.; MYHRVOLD, N. P. et al. High-resolution photography of snowflakes with a field microscope. *Microscopy Today*, Cambridge University Press, v. 29, n. 4, p. 14–20, 2021.

LOVEJOY, S.; SCHERTZER, D. *The weather and climate: emergent laws and multifractal cascades*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2018.

MANDELBROT, B. B.; HUDSON, R. L. *The (mis) behaviour of markets: a fractal view of risk, ruin and reward*. [S.l.]: Profile books, 2010.

MARIZ, A.; HERRMANN, H.; ARCANGELIS, L. de. Comparative study of damage spreading in the ising model using heat-bath, glauber, and metropolis dynamics. *Journal of statistical physics*, Springer, v. 59, n. 3, p. 1043–1050, 1990.

- MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, APS, v. 17, n. 22, p. 1133, 1966.
- METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, American Institute of Physics, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.
- MORNINGSTAR, A.; MELKO, R. G. Deep learning the ising model near criticality. *arXiv preprint arXiv:1708.04622*, 2017.
- NELSON, D. R.; KOSTERLITZ, J. Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Physical Review Letters*, APS, v. 39, n. 19, p. 1201, 1977.
- NUNEZ, P. L. *Brain, mind, and the structure of reality*. [S.l.]: Oxford University Press, 2012.
- OHTA, T.; JASNOW, D. Xy model and the superfluid density in two dimensions. *Physical Review B*, APS, v. 20, n. 1, p. 139, 1979.
- PELISSETTO, A.; VICARI, E. Critical phenomena and renormalization-group theory. *Physics Reports*, Elsevier, v. 368, n. 6, p. 549–727, 2002.
- PENG, C.-K. et al. Mosaic organization of dna nucleotides. *Physical review e*, APS, v. 49, n. 2, p. 1685, 1994.
- SALINAS, S. R. *Introdução à física estatística*. [S.l.]: Edusp, 1999.
- SOUZA, L. C. d. et al. Estudo dinâmico da criatividade do modelo xy em três dimensões. Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2017.
- STEED, R. J. *SIMULATING FINANCIAL MARKETS USING PHYSICAL MODELS*. Tese (Doutorado) — Brigham Young University-Idaho, 2016.
- STOŠIĆ, D. et al. Multifractal analysis of managed and independent float exchange rates. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier, v. 428, p. 13–18, 2015.
- SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Physical review letters*, APS, v. 58, n. 2, p. 86, 1987.
- TELESCA, L.; LAPENNA, V. Measuring multifractality in seismic sequences. *Tectonophysics*, Elsevier, v. 423, n. 1-4, p. 115–123, 2006.
- TOBOCHNIK, J.; CHESTER, G. Monte carlo study of the planar spin model. *Physical Review B*, APS, v. 20, n. 9, p. 3761, 1979.
- TURCOTTE, D. L. *Fractals and chaos in geology and geophysics*. [S.l.]: Cambridge university press, 1997.
- VICARI, E. Critical phenomena and renormalization-group flow of multi-parameter ϕ^4 field theories. *arXiv preprint arXiv:0709.1014*, 2007.
- WANG, J. et al. Effect of oxytocin injection on fetal heart rate based on multifractal analysis. *Chaos, Solitons & Fractals*, Elsevier, v. 148, p. 111045, 2021.
- WELLS, F. S. et al. Analysis of low-field isotropic vortex glass containing vortex groups in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ thin films visualized by scanning squid microscopy. *Scientific reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 1, p. 8677, 2015.

WOLFF, U. Collective monte carlo updating for spin systems. *Physical Review Letters*, APS, v. 62, n. 4, p. 361, 1989.

WU, F.-Y. The potts model. *Reviews of modern physics*, APS, v. 54, n. 1, p. 235, 1982.

ZHAO, L. et al. Multifractality and network analysis of phase transition. *PloS one*, Public Library of Science San Francisco, CA USA, v. 12, n. 1, p. e0170467, 2017.

APÊNDICE A – ENERGIA

Figura 36 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

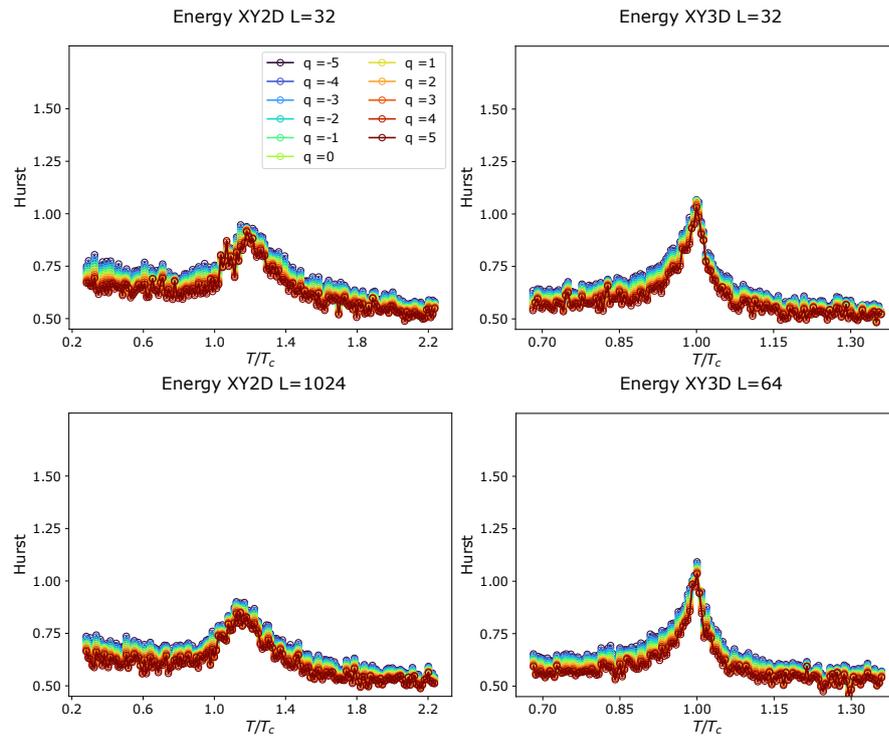


Figura 37 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Energia para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões.

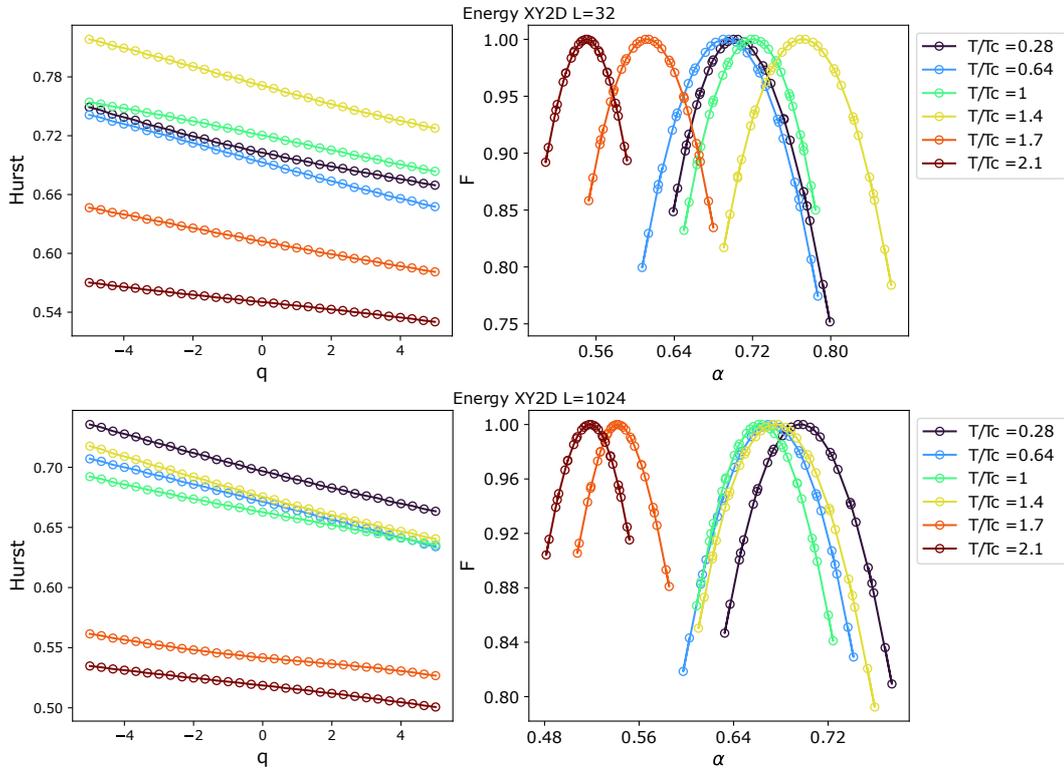


Figura 38 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Energia para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões.

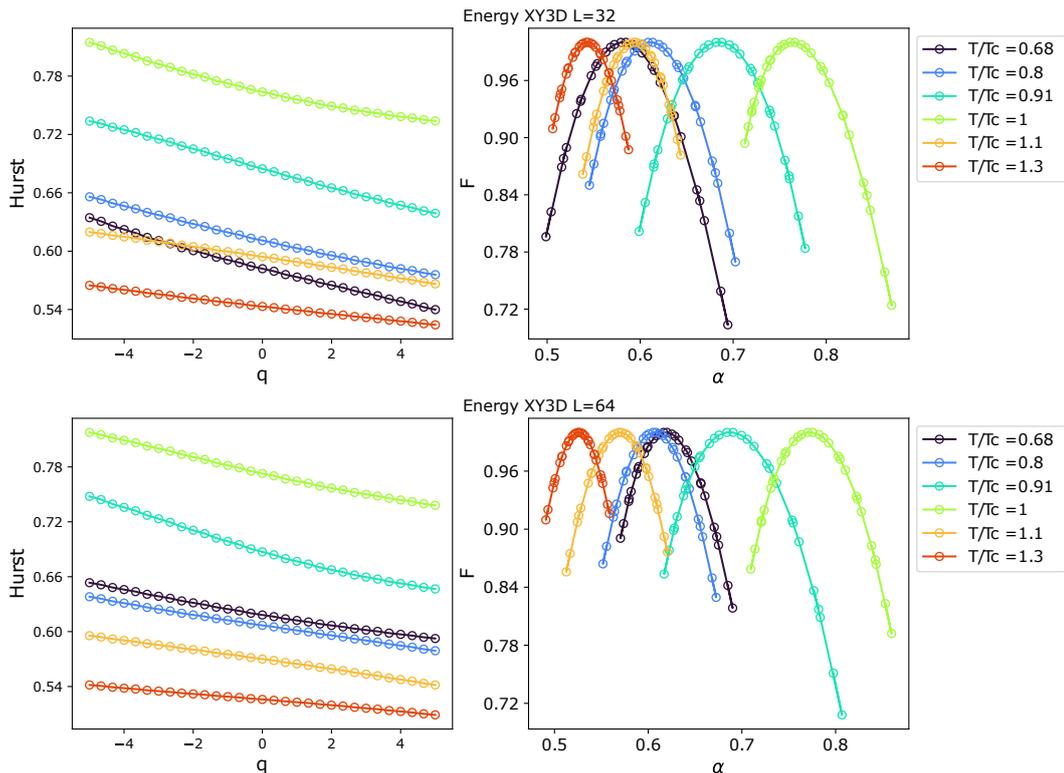


Figura 39 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

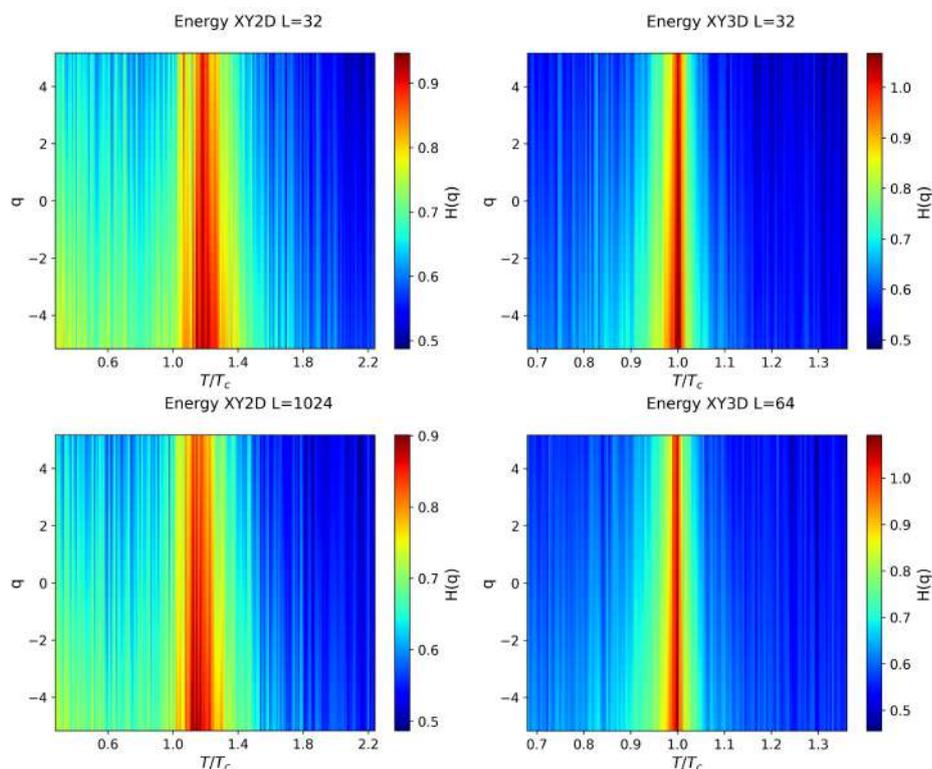
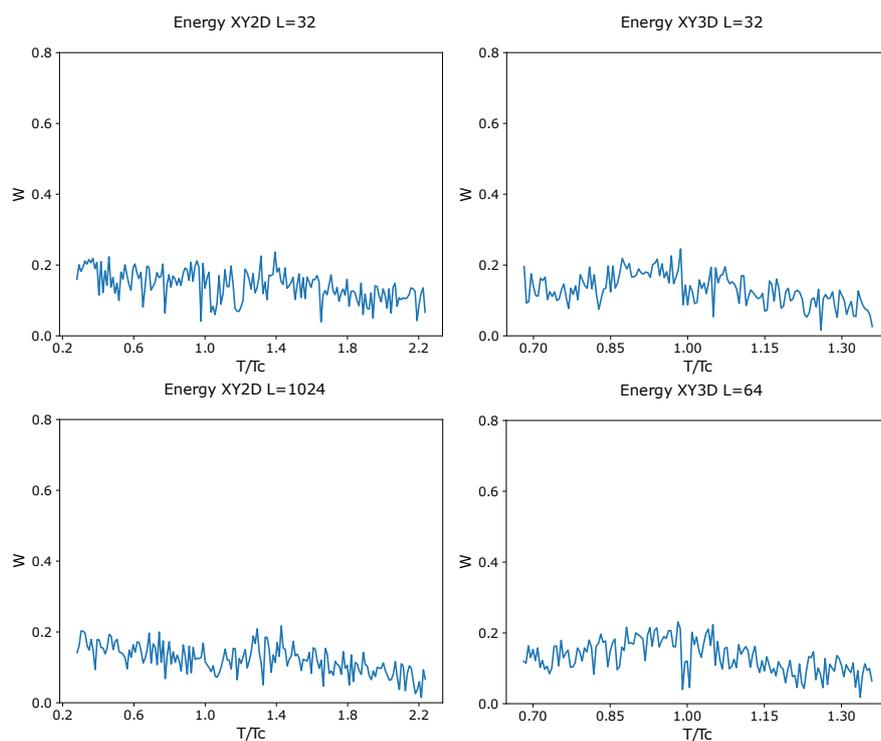


Figura 40 – Largura do espectro de singularidade W da Energia, em função das temperaturas relativas T/T_c



APÊNDICE B – MAGNETIZAÇÃO

Figura 41 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

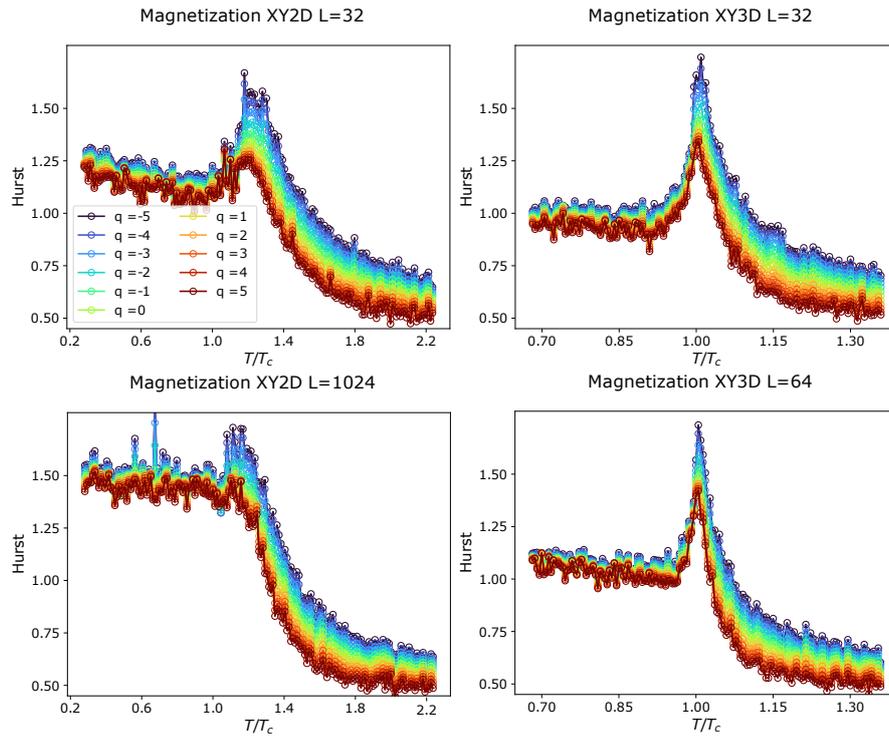


Figura 42 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Magnetização para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões.

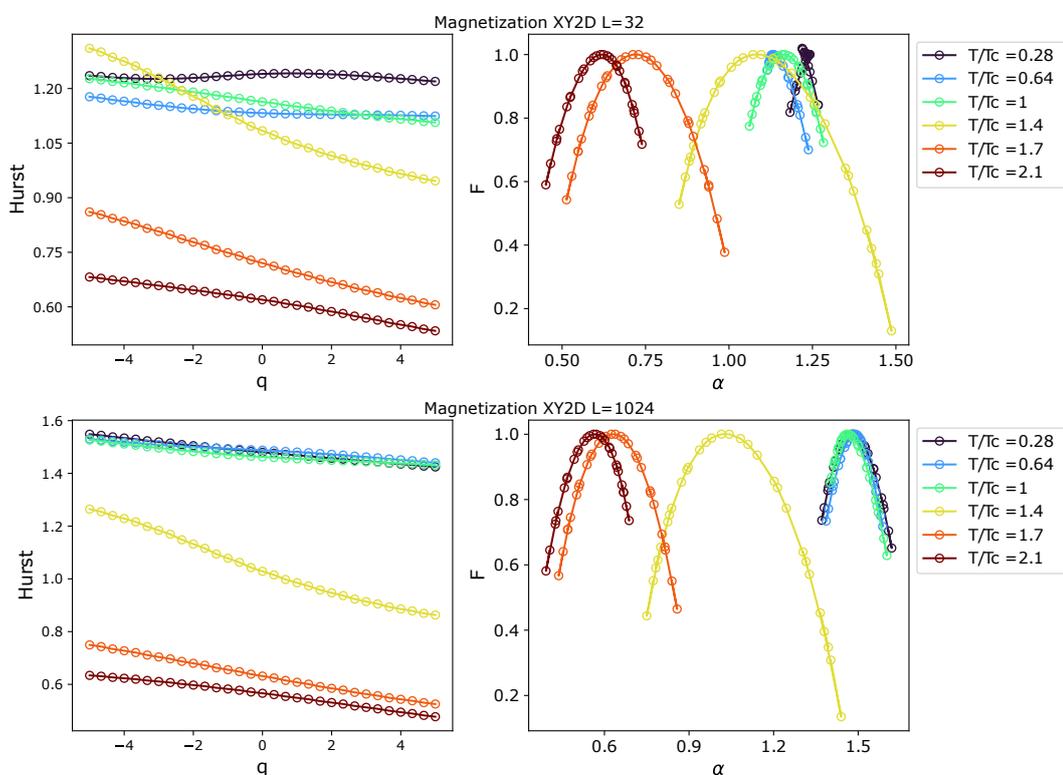


Figura 43 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Magnetização para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões.

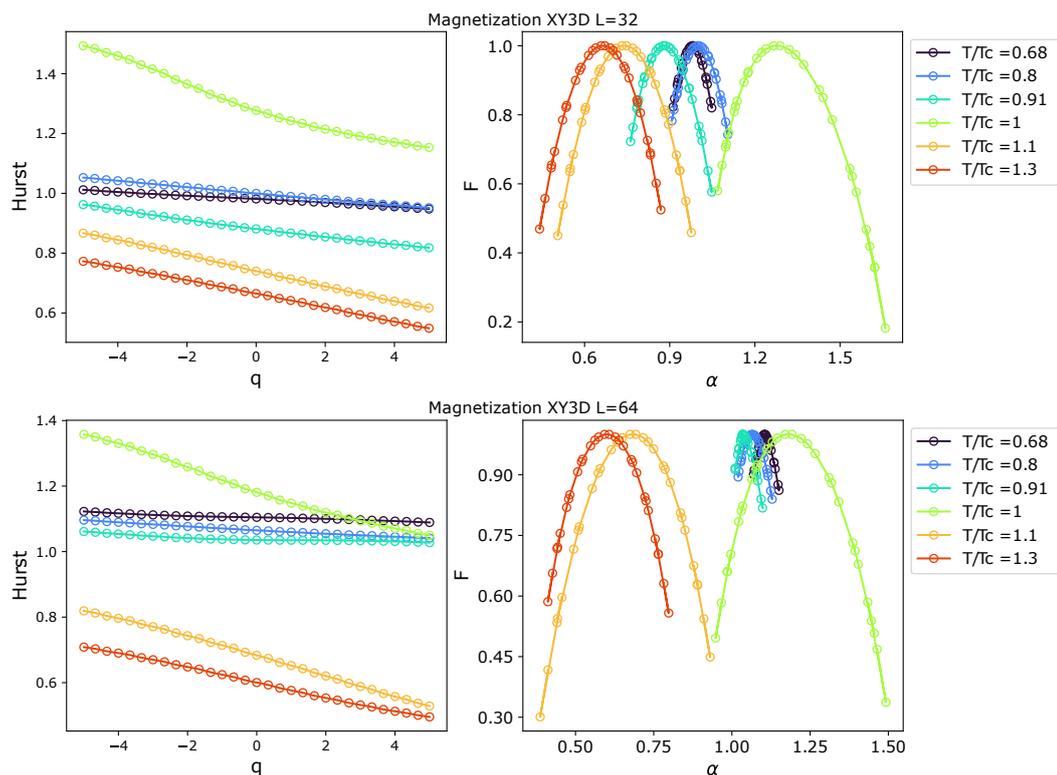


Figura 44 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

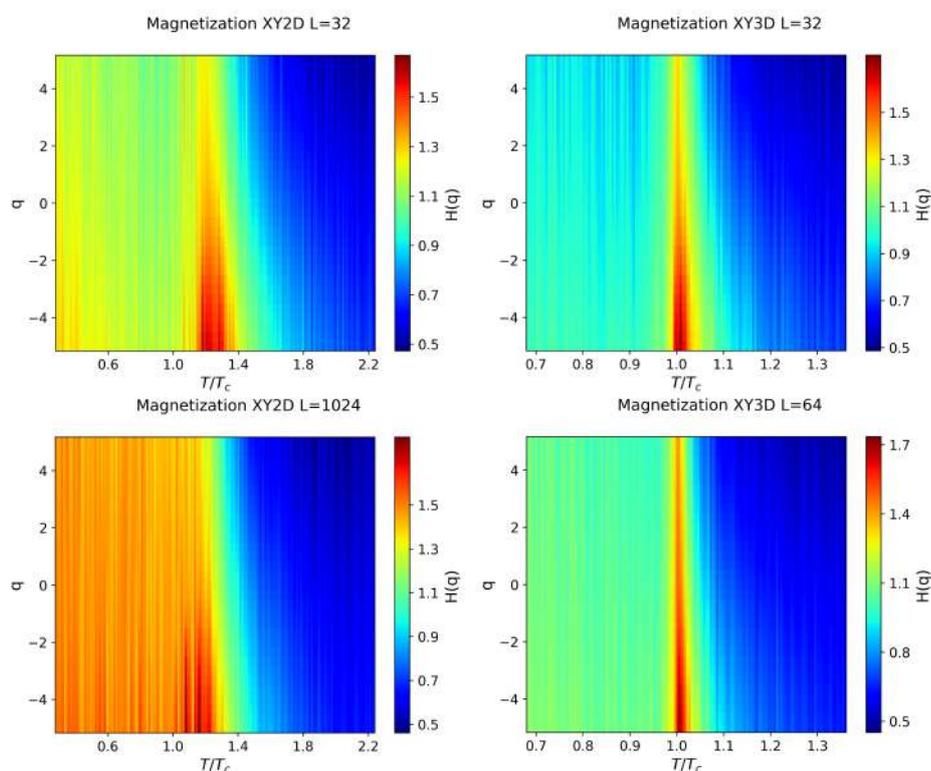
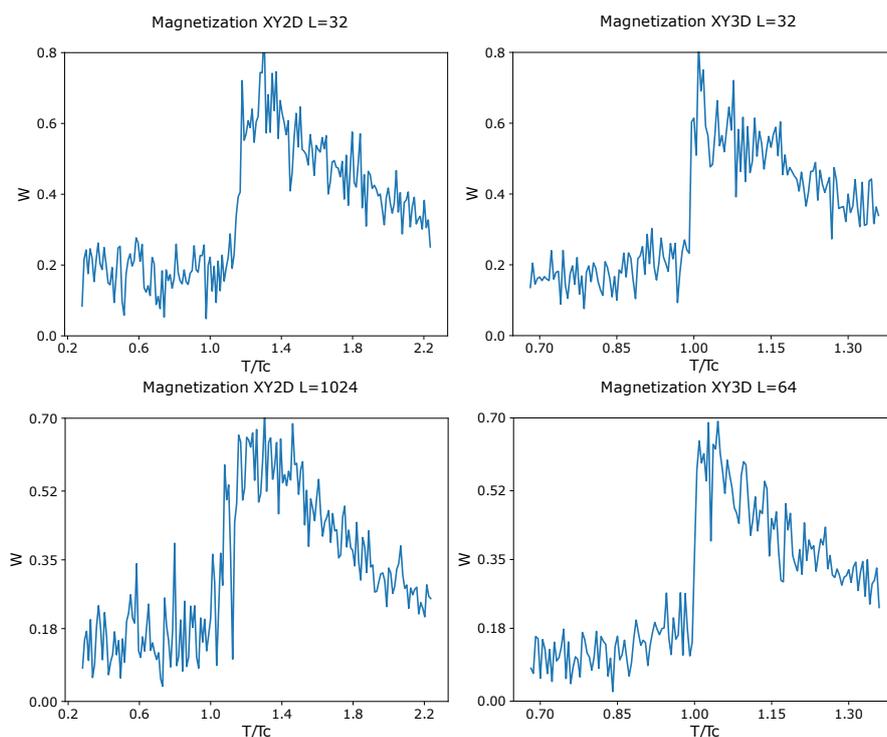


Figura 45 – Largura do espectro de singularidade W da Magnetização, em função das temperaturas relativas T/T_c



APÊNDICE C – MÓDULO DE HELICIDADE

Figura 46 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

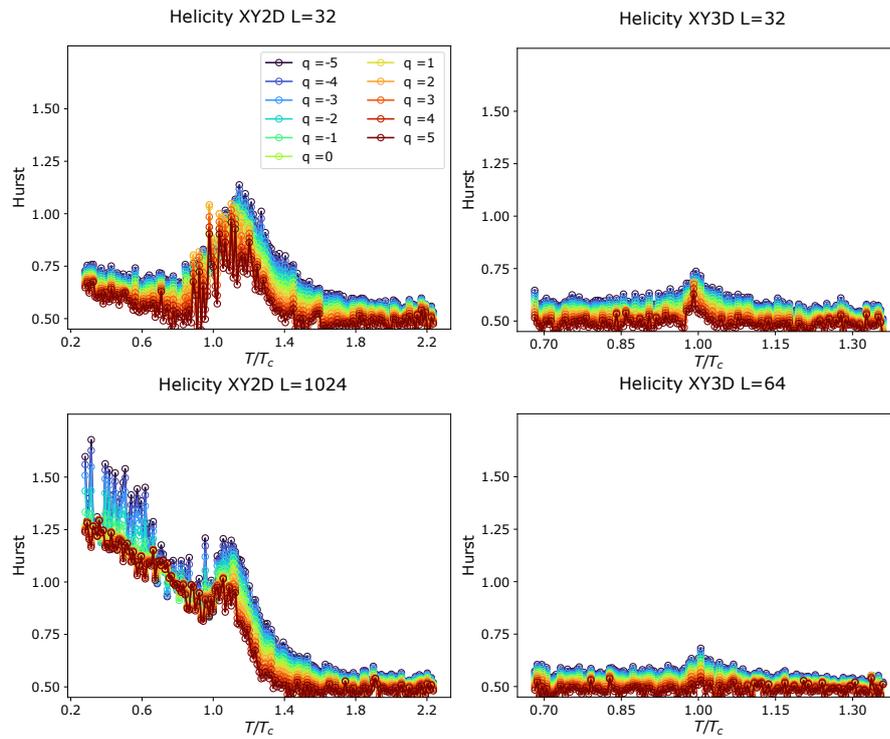


Figura 47 – Conjunto de expoentes de Hurst generalizados obtidos a partir da média de diferentes quantidades de séries temporais: (a) considerando uma única série temporal, (b) com a média de 5 séries temporais, (c) com a média de 10 séries temporais, e (d) com a média de 20 séries temporais.

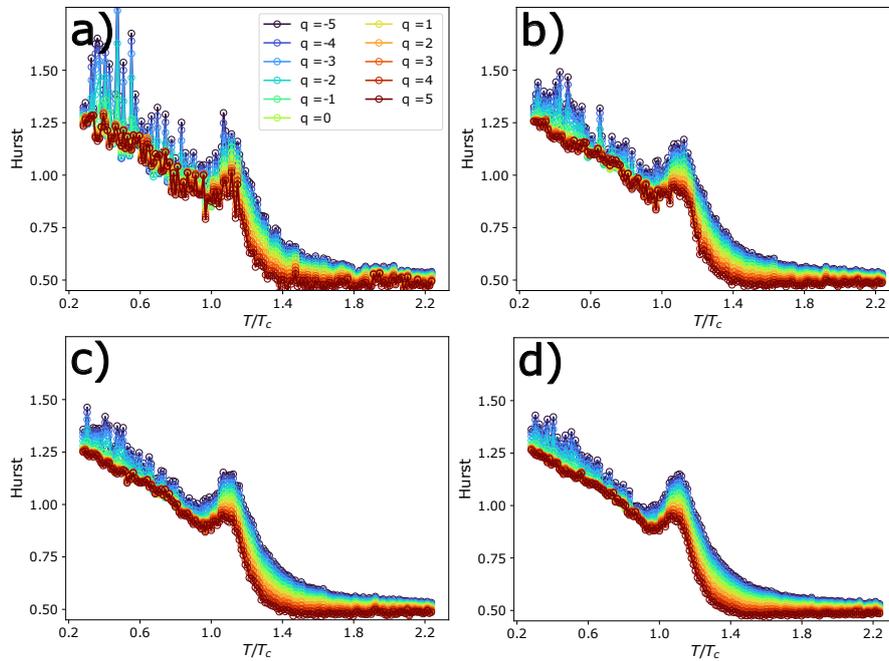


Figura 48 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Helicidade para tamanhos distintos do modelo XY em 2 dimensões.

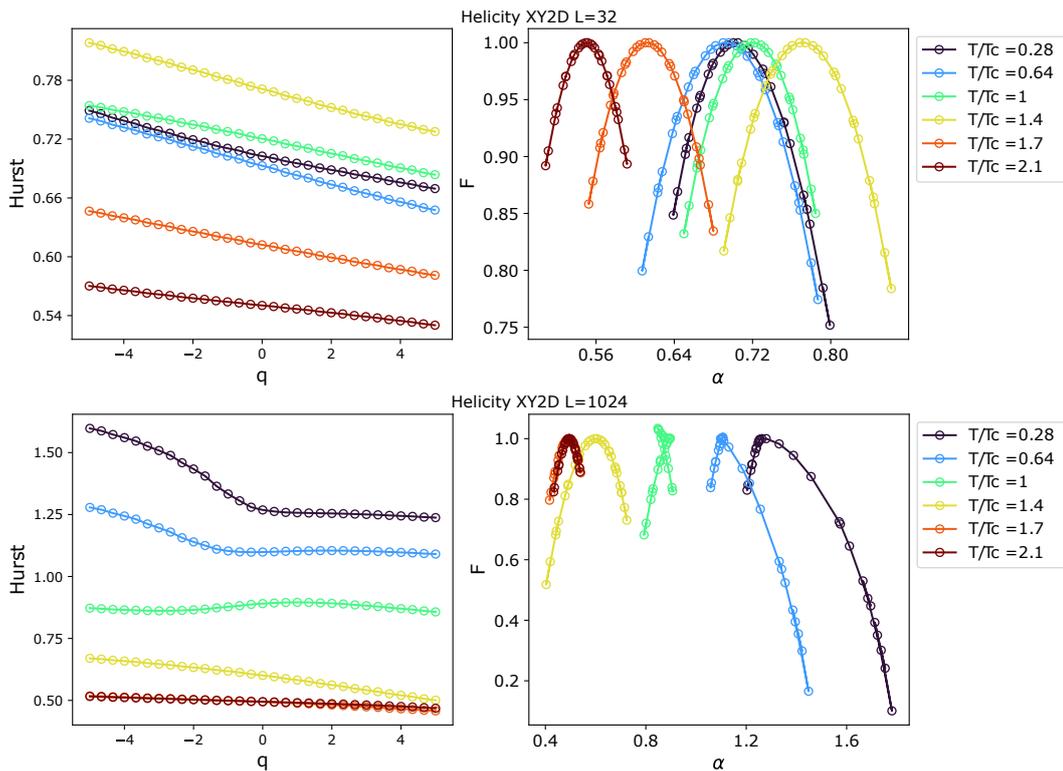


Figura 49 – Respectivamente as curvas do expoente de Hurst generalizado e o espectro de singularidade, para alguns valores de T/T_c , obtidos a partir da serie temporal da Helicidade para tamanhos distintos do modelo XY em 3 dimensões.

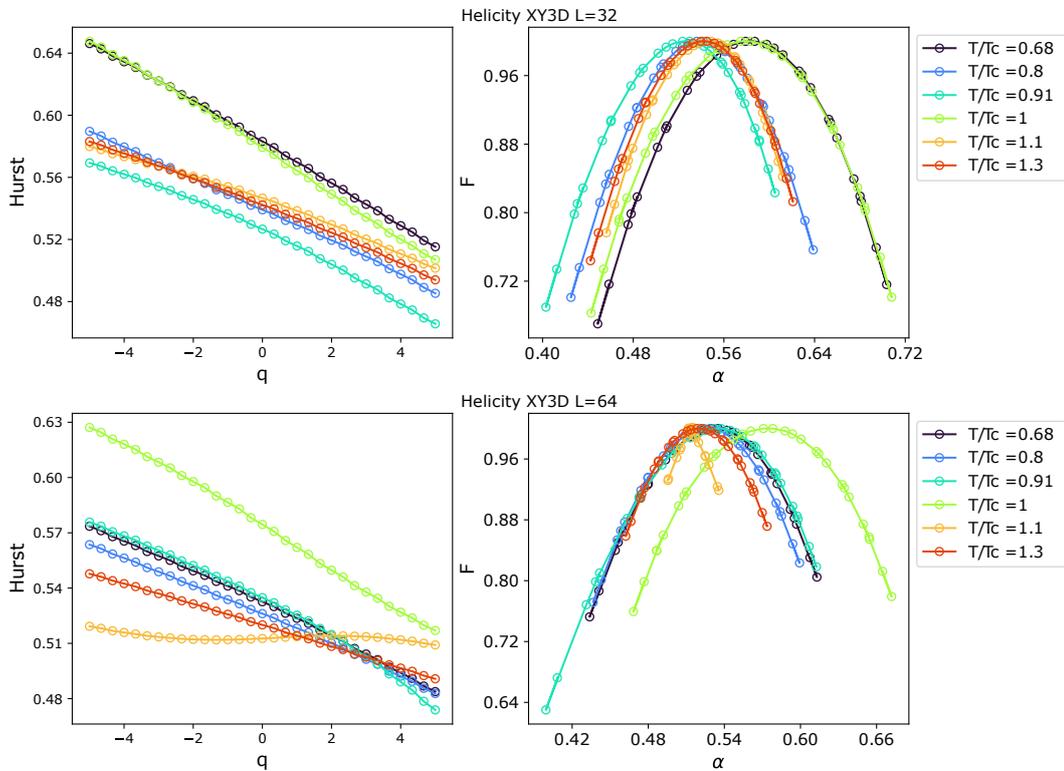


Figura 50 – Mapa de calor do conjunto de expoentes de Hurst generalizado, obtidos a partir da serie temporal da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c para diferentes ordens q , com diferentes tamanhos de sistema.

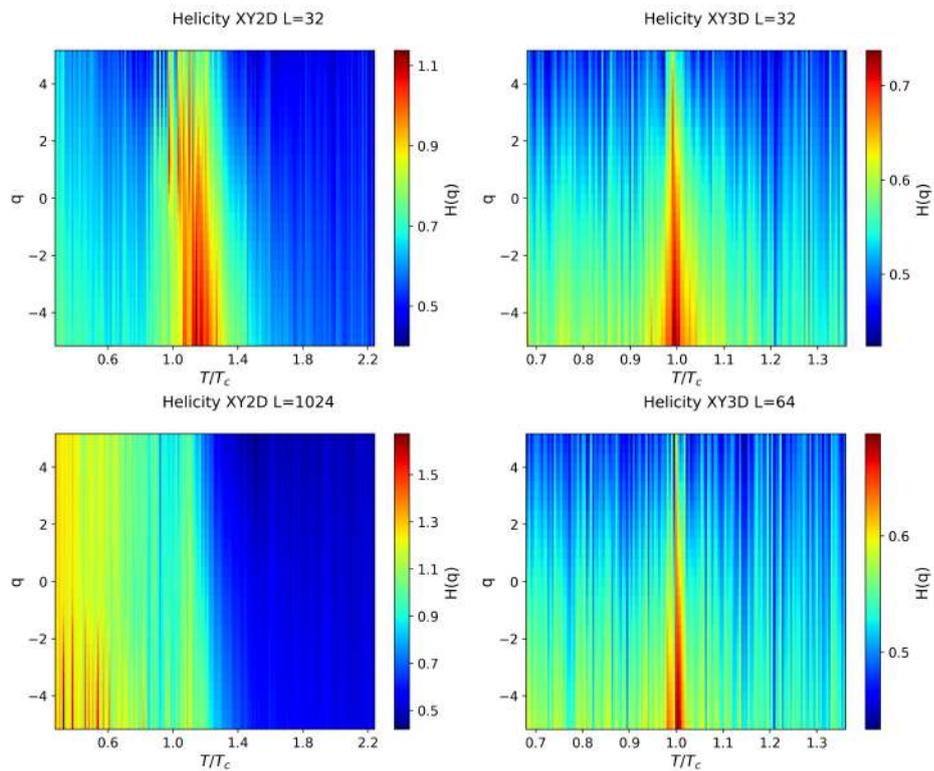


Figura 51 – Largura do espectro de singularidade W da Helicidade, em função das temperaturas relativas T/T_c

