

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Estimação do parâmetro não-local de um nanotubo de carbono de parede única via Inferência Bayesiana

Daniel Alves Castello¹

Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Domenio de Souza Faria²

Instituto Politécnico do Estado do Rio de Janeiro, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Leonardo Tavares Stutz³

Departamento de Modelagem Computacional, UERJ, Nova Friburgo, RJ

Resumo. Com o advento dos nanotubos de carbono, CNT, e seu uso em sistemas nanoeletromecânicos, há um grande interesse atualmente por parte da comunidade científica na modelagem do comportamento mecânico de nanovigas. O presente trabalho propõe a formulação de um problema inverso baseado em medições de frequências em nanotubos de carbono em condição biapoçada, com o objetivo de estimar o parâmetro não-local. O problema inverso é solucionado por Inferência Bayesiana, onde amostras da densidade de probabilidade a posteriori para o parâmetro estimado são obtidas através do Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC). O resultado da aplicação do MCMC apresentou desvios relativamente baixos considerando-se ruídos de 1% e 0,01% nas frequências naturais, no qual foram analisadas cinco razões de aspectos diferentes levando em conta os primeiros cinco modos de vibração. O processo culminou em dados estatísticos a cerca do parâmetro não-local e o detalhamento quanto as formulações direta e inversa são apresentadas ao longo do texto.

Palavras-chave. Nanotubos de Carbono, Elasticidade Não-local, Inferência Bayesiana, MCMC, Frequências Naturais

1 Introdução

Desde a descoberta dos nanotubos de carbono (CNT - Carbon Nanotubes) por Sumio Iijima no início da década de 90 [4], a atenção de vários pesquisadores ao redor do mundo tem sido voltada ao estudo dessas estruturas. Nanotubos de carbono exibem formidáveis propriedades mecânicas, térmicas e elétricas, possuindo assim um enorme potencial de aplicações, entre as quais, seu uso como elemento mecânico em sistemas nanoeletromecânicos (NEMS - Nanoelectromechanical Systems) e micrieletromecânicos

¹castello@mecanica.coppe.ufrj.br

²dfaria@iprj.uerj.br

³ltstutz@iprj.uerj.br

(MEMS - Microelectromechanical Systems) [7]. Como elemento mecânico, sofrerá ação de uma força estática ou dinâmica advinda de um mecanismo de excitação, podendo estar em balanço, simplesmente apoiado, duplamente engastado, entre outras configurações possíveis de condições de contorno [8]. Existem NEMS em diversas aplicações, tais como: nanoatuadores, nanosciladores e nanosensores de massa, força e pressão. O conhecimento do comportamento mecânico e dinâmico de nanotubos de carbono é crucial ao sucesso dessas aplicações [7]. Nesse propósito, a Teoria da Elasticidade Não-local de Eringen [3] tem sido amplamente utilizada em nanovigas, devido à dificuldade de experimentação em escala nanométrica e ao grande esforço computacional exigidos pelos métodos baseados em dinâmica molecular [1]. A teoria assume que a tensão em dado ponto é função das deformações em todos os pontos do domínio, diferente do assumido pela Teoria da Elasticidade Clássica em que a tensão em um dado ponto do material é função da deformação nele mesmo [1].

Na última década, pela teoria de Eringen, foram feitas reformulações dos diversos modelos de viga, em especial Euler-Bernoulli e Timonshenko, e analisadas as diversas condições de contorno [6,8]. Com o uso de modelos não-locais de vigas, frequências naturais em nanotubos de carbono de parede única e dupla foram determinadas e reportadas como coerentes àquelas conseguidas experimentalmente ou por métodos baseados em dinâmica molecular [7]. Contudo, o fator não-local deve ser estimado, Duan et al [2] efetuaram a calibração do fator de escala a partir de resultados de frequências naturais por dinâmica molecular.

O presente trabalho propõe a formulação de um problema inverso utilizando o modelo de viga de Euler-Bernoulli não-local, objetivando a estimação do parâmetro não-localidade a partir de dados experimentais de medições de frequências naturais. São analisados nanotubos de carbono de parede única e a solução é realizada via Inferência Bayesiana, tal que o fator não-local de escala é modelado como variável aleatória. Neste artigo, é utilizado o método de Monte Carlo via Cadeias de Markov para aproximação da densidade de probabilidade a posteriori por meio de amostragem. O processo culmina em dados estatísticos de distribuição de probabilidade, médias e desvios, tornando possível a percepção da qualidade na estimativa do fator não-local, tendo em vista a precisão dos dados experimentais. São realizadas estimativas considerando cinco razões de aspecto e os resultados comparados quanto à incerteza estatística obtida.

2 Modelagem Matemática

2.1 Teoria da Elasticidade Não-local

Este artigo faz uso da Teoria da Elasticidade de Eringen [3]. Fatores influentes em nano escala como a constante de rede da estrutura cristalina, distância granular ou o comprimento da ligação entre os átomos constituintes do nanomaterial são incorporados na equação constitutiva de tensão-deformação. A equação constitutiva tensão-deformação não-local em sua forma mais geral é dada por [7]:

$$\sigma_{ij}(x) = \int_V \alpha(|(x - x')|, \tau) E_{ijkl} \epsilon_{kl}(x') dV(x') \quad (1)$$

onde E_{ijkl} representa o módulo de elasticidade, σ_{ij} , o tensor de tensões, ϵ_{ij} o tensor de deformação e $\alpha(|(x - x')|, \tau)$, constitui o módulo não-local, referenciado também como função de atenuação. Nele são relacionadas as influências para a deformação no ponto x pelas deformações em todos os pontos de origem representados por x' , tal que o argumento $|(x - x')|$ é a distância euclidiana entre os pontos. Ainda como argumento deste termo, tem-se $\tau = \frac{e_0 a}{l}$, em que e_0 é uma constante adimensional a ser estimada experimentalmente, sendo específica para o material e, no caso de nanovigas, para a condição de contorno, e a , um comprimento característico do material, que em nanotubos de carbono pode ser usado o comprimento da ligação C-C; 0,142 nm [7]. O produto destes dois é referido como fator não-local. Por fim, V representa o sólido ou corpo de estudo. Para a condição uniaxial de tensão, a relação constitutiva integral da lei de Hooke não-local pode ser expressa de forma reduzida como [7]:

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \sigma(x) = E \epsilon(x) \quad (2)$$

2.2 Modelo de viga Euler-Bernoulli não-local

Considerando um elemento infinitesimal de uma viga de Euler-Bernoulli em vibração transversal e sabendo que V e M são, respectivamente, a força cortante e o momento fletor, tem-se as seguintes condições de equilíbrio:

$$\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} - \rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial^2 M(x, t)}{\partial^2 x} \quad (4)$$

onde $w(x, t)$ corresponde a deflexão na viga, A é a área de seção transversal e ρ a massa específica do material:

Considerando $M = \int_A \sigma y dA$, $I = \int_A y^2 dA$, $\epsilon = -y \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2}$ e a lei de Hooke não-local, equação 2, tem-se a equação diferencial de Euler-Bernoulli (5) [7].

$$EI \frac{\partial^4 w(x, t)}{\partial x^4} + \rho A \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[w(x, t) - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} \right] = 0 \quad (5)$$

Para a condição biapoiada, a solução dessa equação leva a seguinte expressão para as frequências naturais [7]:

$$\omega_n = \frac{\frac{n^2 \pi^2}{L^2} \sqrt{\frac{EI}{\rho A}}}{\sqrt{1 + \frac{n^2 \pi^2}{L^2} (e_0 a)^2}} \quad (6)$$

. em que o modo de vibração é representado por n .

Tendo em vista que devem ser conhecidas as propriedades mecânicas e geométricas de nanotubos de carbono para o cálculo das frequências naturais, a espessura é considerada sendo $h = 0,39$ nm e a massa específica, $\rho = 1,3$ g/cm³ [7]. A rigidez à flexão pode ser expressa da seguinte forma, em que $C = 360$ J/m² e d é o diâmetro médio do nanotubo [7]:

$$EI = \frac{\pi C}{8} d^3 \quad (7)$$

3 Problema Inverso

No contexto de Inferência Bayesiana, o problema inverso em questão consiste em estimar a função de densidade de probabilidade, FDP, do parâmetro não-local a partir das frequências naturais da estrutura. Fazendo uso da abordagem Bayesiana em problemas inversos, dados estatísticos são estimados mediante amostragem da função de densidade a posteriori. O Teorema de Bayes, para a formulação inversa proposta neste trabalho, pode ser expresso como [5]:

$$\pi_{post}(e_0a/\omega^{exp}) = \frac{\pi_{priori}(e_0a)\pi(\omega^{exp}/e_0a)}{\pi(\omega^{exp})} \quad (8)$$

onde ω^{exp} é o vetor contendo as frequências naturais experimentais, π_{post} e π_{priori} são, respectivamente, a densidade de probabilidade a posteriori e a priori, $\pi(\omega^{exp}/e_0a)$ é a função de verossimilhança e $\pi(\omega^{exp})$ a densidade de probabilidade dos dados experimentais, que funciona como uma constante de normalização [5].

Considerando o ruído associado aos erros experimentais aditivo e caracterizado por uma distribuição normal, a função de verossimilhança pode ser expressa como [5]:

$$\pi(\omega^{exp}/e_0a) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N}} \frac{1}{\sqrt{\det(V^{-1})}} \exp -\frac{1}{2}(\omega^{exp} - \omega)^T V^{-1}(\omega^{exp} - \omega) \quad (9)$$

onde V^{-1} é a matriz de covariância dos dados experimentais, N o número de medições, e ω as frequências naturais calculadas previstas por um modelo, neste caso, pela equação 6.

3.1 Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov

O Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov permite a inferência de dados estatísticos dos parâmetros estimados, com pouca ou mesmo nenhuma informação a priori, por meio de amostragem a partir da função de densidade de probabilidade a posteriori [5]. O termo Cadeia de Markov diz respeito ao procedimento de construção de uma sequência de variáveis randômicas; e_0a^1, e_0a^2, \dots ; em que o atual valor, e_0a^t com $t > 1$, é gerado dependendo somente do anterior e_0a^{t-1} , a partir de uma função densidade de probabilidade de transição $q(e_0a^t/e_0a^{t-1})$, também referenciada como distribuição auxiliar [5]. O fim do processo de se gerar amostras ocorre quando caracteriza-se uma distribuição estacionária. A quantidade de amostras até este comportamento é descartada, consideradas amostras de aquecimento, e o restante é utilizado para inferência da probabilidade a posteriori [5].

Neste trabalho foi empregado o algoritmo de Metropolis-Hastings para implementação do MCMC. O algoritmo utilizado se encontra na referência [5].

4 Resultados

Esta seção considera uma análise numérica do problema de estimação do parâmetro não-local em nanovigas de Euler-Bernoulli. Considerando-se um diâmetro médio $d = 1\text{nm}$, cinco razões de aspecto, L/d , foram estudadas: 10, 15, 20, 25 e 30. Os demais parâmetros foram adotados como: $E = C/h = 1,0588\text{TPa}$, $\rho = 1,3\text{g/cm}^3$ e $h = 0,34\text{nm}$.

Frequências naturais experimentais sintéticas foram obtidas a partir do modelo, considerando $e_0a = 0,71\text{nm}$ e ruídos com médias nulas e desvios de 1% e 0,01%, esse último virtualmente nulo. No processo gaussiano de estimação, foram estudadas as frequências dos cinco primeiros modos de vibração. As frequências naturais constam na tabela 1, em que o asterisco como índice indica os valores nos quais há adição de ruído de 1%.

Tabela 1: Frequências naturais (THz) sem e com* ruído nos primeiros 5 modos de vibração

L/d	1°		2°		3°		4°		5°	
10	0,972	0,993*	3,638	3,634*	7,449	7,456*	11,889	11,973*	16,620	16,710*
15	0,438	0,439*	1,697	1,730*	3,638	3,605*	6,086	5,974*	8,880	8,787*
20	0,247	0,248*	0,972	0,979*	2,125	2,089*	3,638	3,598*	5,436	5,480*
25	0,159	0,159*	0,627	0,623*	1,385	1,344*	2,401	2,395*	3,638	3,647*
30	0,110	0,112*	0,438	0,429*	0,972	0,966*	1,697	1,688*	2,593	2,583*

A tabela 2 apresenta o resultado da estimação via MCMC para cada razão de aspecto considerada, adotando-se ruído de 1%, enquanto que a figura 01 as cadeias de Markov para as razões de aspecto: 10, 20 e 30. As cadeias foram obtidas considerando-se distribuições auxiliares com desvios conforme apresentados na tabela 2, como também, um valor inicial para o parâmetro não-local 20% acima do e_0a adotado, $e_0a = 0,852\text{nm}$. As cadeias foram geradas com 50000 estados, sendo os primeiros 1000 estados considerados como amostras de aquecimento e escolha dos desvios para a distribuição auxiliar visou controlar as taxas de aceitação em torno de 30%. Para a condição de ruído virtualmente nulo, duas cadeias considerando razões de aspecto de 10 e de 30 são apresentadas respectivamente, juntamente com a função densidade de probabilidade a posteriori e o histograma do processo de amostragem, nas figuras 2 e 3. Os resultados foram médias de 0,7102 nm e 0,7106 nm respectivamente, assim como desvios de 0,0001 nm e 0,0005 nm, sendo utilizadas distribuições auxiliares com desvios de 0,0003 nm e 0,0015 nm.

Tabela 2: Resultado MCMC para os dados com ruído aditivo de 1%, dados em nm

L/d	Média e_0a	Desvio e_0a	Intervalo de Confiança 95%	Desvio Dist.Auxiliar
10	0,694	0,009	[0,677;0,711]	0,03 nm
15	0,761	0,015	[0,733;0,789]	0,06 nm
20	0,729	0,022	[0,686;0,772]	0,08 nm
25	0,775	0,032	[0,711;0,836]	0,12 nm
30	0,799	0,042	[0,715;0,879]	0,15 nm

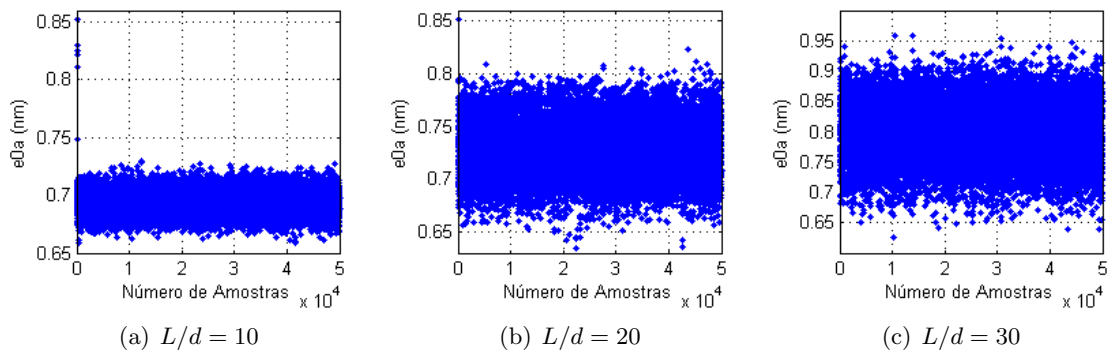


Figura 1: Cadeias de Markov: simulação com ruído de 1%

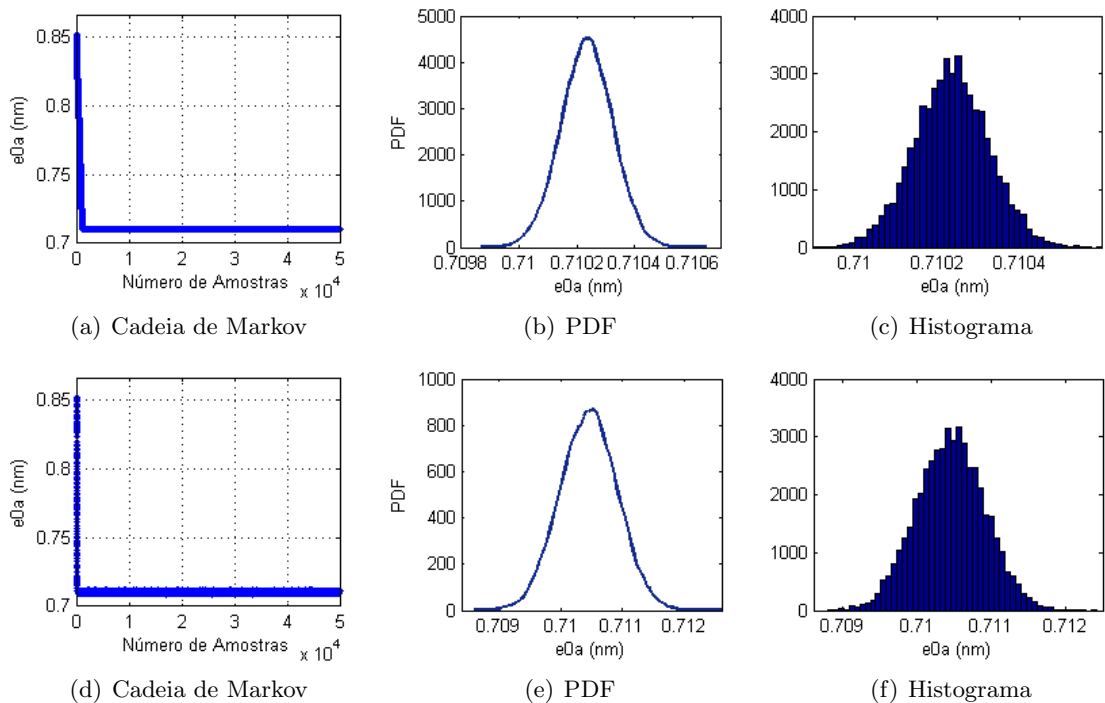


Figura 2: Resultado pelo método MCMC com ruído virtualmente nulo, desvio de 0,01% com $L/d = 10$; em a, b e c; e $L/d = 30$; em e, f e g

5 Conclusões

O modelo matemático para frequências naturais em vigas de Euler-Bernoulli na condição biapoiada caracterizou o problema direto e, a partir dele, o problema inverso foi formulado por abordagem estatística bayesiana utilizando MCMC. O fator não-local foi estimado para cinco razões de aspecto, sendo analisados um desvio de 1% e outro virtualmente nulo de 0,01% aos dados experimentais. Foi percebida maior certeza estatística em razões de

aspecto menores, tal como ocorre nos resultados apresentados na tabela 2 e nas figuras 1 e 2, sendo correlacionada à maior sensibilidade no valor das frequências naturais ao fator não-local em menores razões de aspecto [1]. Devido a isso, afim de se otimizar os resultados pelo método MCMC, alterou-se, tal como mostrado na tabela 2, o desvio da distribuição auxiliar de acordo com a razão de aspecto, controlando o percentual de aceitação em torno de 30%. Em suma, apesar do ruído adicionado, o processo de estimação conseguiu, inferir a FDP para o parâmetro não-local com relativa boa acurácia. Este trabalho representa um estudo inicial na formulação de problemas inversos pela Teoria Não-local aplicada a nanoestruturas, sendo pretendido a continuação por meio de outras considerações e metodologias: solução pelo Método dos Elementos Finitos e implementação de um modelo viscoelástico.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio dos órgãos de fomento: FAPERJ e CAPES.

Referências

- [1] B.Arash, Q.Wang, A review on the application of nonlocal elastic models in modeling of carbon nanotubes and graphenes, *Computational Materials Science*. 51(1), 303-313,2-12. DOI:10.1016/j.commat.2011.07.040
- [2] W. H. Duan, C.M. Wang, Y. Y. Zhang, Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics, *Journal of applied physics*, 101.2: 24305-24305, 2007. DOI: 10.1063/1.2423140
- [3] A.C. Eringen, On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, *Journal of applied physics* 54.9: 4703-4710, 1983. DOI: 10.1063/1.332803
- [4] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature*,1991: 56-58. DOI: 354 56-8
- [5] J.Kaipio, E.Somersalo: Statistical and computational inverse problems. Applied Mathematical Sciences 160, Springer-Verlag,2004
- [6] J.N. Reddy, Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams, *International Journal of Engineering Science*, 45: 288-307, 2007. DOI:10.1016/j.ijengsci.2007.04.004
- [7] Q. Wang, V. K. Varadan, Vibration of carbon nanotubes studied using nonlocal continuum mechanics, *Smart Mater. Struct*, 15 (2006) 659-666. DOI:10.1088/0964-1726/15/2/050
- [8] Wang, C. M., Y. Y. Zhang, and X. Q. He, Vibration of nonlocal Timoshenko beams, *Nanotechnology* 18.10 : 105401, 2007. DOI: 10.1088/0957-4484/18/10/105401