



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto Politécnico

Domenio de Souza Faria

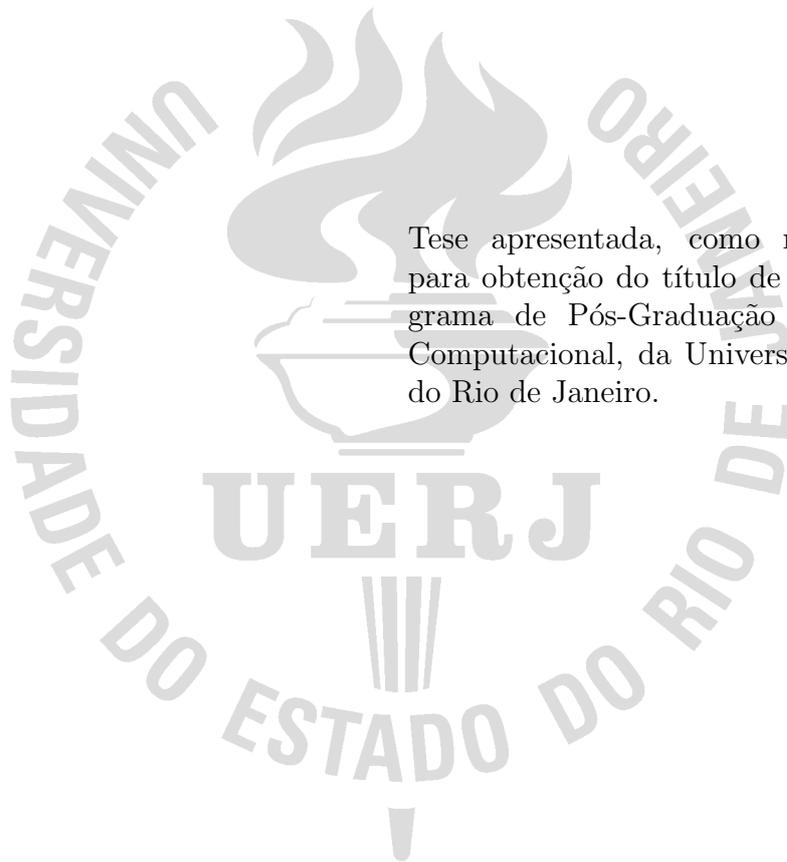
**Viscoelasticidade não-local em dinâmica de estruturas:
modelagem, calibração, seleção e validação de modelos**

Nova Friburgo

2021

Domenio de Souza Faria

**Viscoelasticidade não-local em dinâmica de estruturas: modelagem,
calibração, seleção e validação de modelos**



Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientadores: Prof. Dr. Leonardo Tavares Stutz
Prof. Dr. Daniel Alves Castello

Nova Friburgo

2021

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/BIBLIOTECA CTC/E

F224 Faria, Domenio de Souza.
Viscoelasticidade não-local em dinâmica de estruturas:
modelagem, calibração, seleção e validação de modelos
/ Domenio de Souza Faria. – 2021.
156 f. : il.

Orientadores: Leonardo Tavares Stutz e Daniel Alves
Castello.

Tese (doutorado) - Universidade do Estado do Rio de
Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Dinâmica das estruturas - Teses. 2. Viscoelasticidade -
Teses. 3. Engenharia de estruturas – Modelos matemáticos -
Teses. 4. Problemas inversos (Equações diferenciais) - Teses.
I. Stutz, Leonardo Tavares. II. Castello, Daniel Alves. III.
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto
Politécnico. IV. Título.

CDU 624.072.2:519.6

Bibliotecária Cleide Sancho CRB7/5843

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial
desta tese, desde que citada a fonte.


Assinatura

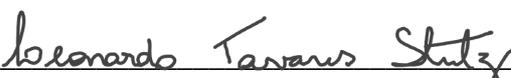
08/02/2022
Data

Viscoelasticidade Não-Local em Dinâmica de Estruturas: Modelagem, Calibração, Seleção e Validação de Modelos

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Doutor ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 17 de dezembro de 2021.

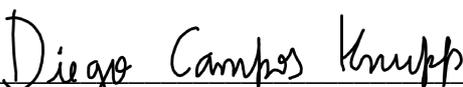
Banca examinadora:



Prof. Leonardo Tavares Stutz, D.Sc. (Orientador)
Instituto Politécnico - UERJ



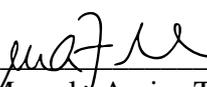
Prof. Daniel Alves Castello, D.Sc. (Orientador)
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ



Prof. Diego Campos Knupp, D.Sc.
Instituto Politécnico - UERJ



Prof. Luiz Alberto da Silva Abreu, D.Sc.
Instituto Politécnico - UERJ



Prof. Marcelo Areias Trindade, Ph.D.
Universidade de São Paulo - USP

Prof. Carlos Frederico Trotta Matt, D.Sc.
Centro de Pesquisas de Energia Elétrica - CEPEL

DEDICATÓRIA

Dedico a conclusão deste trabalho a minha esposa, aos meus pais e demais familiares, como também aos professores e amigos que, de forma direta ou indireta, cooperaram positivamente na minha trajetória acadêmica.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus, por permitir que os meus sonhos pudessem se realizar, pois entendo que tudo existe e acontece se faz pela sua permissão e graça nas nossas vidas.

Agradeço a minha esposa, Hiasmim Rohem Gualberto, pelo carinho, apoio, e principalmente pela compreensão e paciência.

Agradecimento especial aos meus pais e a toda a minha família pelo suporte em todos os momentos da minha vida, por sempre estarem ao meu lado, apoiando e motivando nos momentos mais difíceis.

Agradeço também aos meus orientadores Prof. Dr. Leonardo Tavares Stutz e Prof. Dr. Daniel Alves Castello, pelo apoio intelectual e amigável nas orientações realizadas, com positividade e otimismo em todas as etapas do doutorado.

Agradeço à CAPES pela bolsa concedida inicialmente no curso de doutorado. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Dedico agradecimento também aos meus amigos que compartilharam momentos de sucesso e dificuldades nesse período de doutorado e a todos os professores e funcionários do IPRJ pelo precioso conhecimento transmitido ao longo da minha formação.

Porque melhor é a sabedoria do que os rubis; e tudo o que mais se deseja não se pode comparar com ela.

Provérbios 8:11

RESUMO

FARIA, D. S. *Viscoelasticidade não-local em dinâmica de estruturas: modelagem, calibração, seleção e validação de modelos*. 2021. 156 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2021.

Nesta tese, modelos contínuos viscoelásticos não-locais são abordados para a descrição do comportamento dinâmico de nanoestruturas e problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos são propostos e solucionados por inferência Bayesiana. Nanoestruturas, em aplicações para sistemas nano-eletromecânicos, são afetadas por efeitos de escala e amortecimento por diversas causas. Uma vez que resultados experimentais são sempre, em algum nível, corrompidos por ruído e os modelos teóricos propostos sempre possuem algum nível de erro de modelagem em relação aos sistemas reais investigados, adota-se o paradigma Bayesiano na formulação de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos. Para a incorporação de efeitos de escala, é adotada a Teoria da Elasticidade Não-Local e, para a tratativa generalizada de efeitos dissipativos, amortecimentos dos tipos viscoso e viscoelástico, sendo utilizado o conceito variáveis internas de dissipação ao comportamento viscoelástico. Modelos não-locais viscoelásticos de vigas de Euler-Bernoulli e placas de Kirchhoff são propostos, incluindo os respectivos modelos de elementos finitos. Os problemas inversos de estimação de parâmetros são construídos considerando os parâmetros modais das nanoestruturas modeladas, objetivando inferir sobre o parâmetro não-local de escala, que é associado à incorporação de efeitos de escala na equação constitutiva não-local, e sobre os parâmetros dos modelos de amortecimento, viscoso e viscoelástico. Na formulação dos problemas inversos de seleção de modelos, a modelagem dos efeitos dissipativos por modelos de amortecimento viscoso ou viscoelástico com diferentes quantidades de variáveis internas configuram diferentes classes de modelos. A determinação da melhor classe de modelos, a partir dos dados experimentais, é realizada baseando-se nas evidências obtidas pelo Teorema Bayes. Para a amostragem da função densidade de probabilidade a *posteriori* dos parâmetros e a obtenção das evidências das classes de modelos, o algoritmo *Transitional Markov Chain Monte Carlo* foi adotado. A partir da formulação e solução dos problemas inversos, permitiu-se compreender a topologia do suporte da distribuição a *posteriori* dos parâmetros, avaliar a capacidade preditiva das classes de modelos estudadas, as discrepâncias de modelagem e investigar os impactos do uso de diferentes níveis de informação a *priori*.

Palavras-chave: Teoria da Elasticidade Não-local. Viscoelasticidade. Problemas inversos. Seleção de classes modelos.

ABSTRACT

FARIA, D. S. *Nonlocal viscoelasticity in dynamics of structures: modeling, calibration, selection and model validation*. 2021. 156 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2021.

In this thesis, non-local continuous viscoelastic models are considered to describe the dynamic behavior of nanostructures and inverse problems for parameter estimation and model class selection are formulated and solved by Bayesian inference. Nanostructures, in applications for nano-electromechanical systems, are affected by scale effects and damping effects due to several causes. Furthermore, results from experimental studies are, in general, corrupted by noise and the proposed theoretic models always have some kind of modeling error. Therefore, the Bayesian paradigm is adopted in the formulation of inverse problems for parameter estimation and model class selection. For the incorporation of scaling effects, the Non-Local Elasticity Theory is adopted, and, for the generalized approach for damping effects, viscous and viscoelastic damping models, using the concept of internal variables to describe the viscoelastic behavior. Non-local viscoelastic models of Euler-Bernoulli beams and Kirchhoff plates are proposed, including the respective finite element models. The inverse problems for parameter estimation are constructed considering the modal parameters of the modeled nanostructures, aiming to infer the non-local scale parameter, which is associated with the incorporation of scale effects in the non-local constitutive equation, and the parameters of the viscoelastic model. In the formulation of inverse problems for model selection problems, the modeling of dissipative effects by viscous or viscoelastic models with different quantities of internal variables define different model classes. The best model class is determined from the experimental data based on the evidences by the Bayes rule. For sampling the *posterior* probability density function of the parameters and obtaining the evidences of the model classes, the *Transitional Markov Chain Monte Carlo* algorithm is adopted. From the formulation and solution of the inverse problems, it was possible to understand the topology of the *posterior* probability density functions, evaluate the predictive capabilities of the studied model classes and investigate the model discrepancies as well the impacts of using different levels of prior information.

Keywords: Nonlocal Elasticity Theory. Viscoelasticity. Inverse problems. Model class selection.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Sistema: SWCNT como nanoviga simplesmente apoiada. Modelo contínuo não-local idealizado	77
Figura 2 - Realizações de campos aleatórios. Parâmetros: $E_\infty(x)$, $\Delta_i(x)$ e $\Omega_i(x)$: SWCNT	79
Figura 3 - Propriedades viscoelásticas do modelo de referência em função do domínio espacial da viga. Módulo complexo local - Módulo de armazenamento $E'(x, \omega)$ e fator de perda $\eta(x, \omega)$: SWCNT	80
Figura 4 - Histogramas dos parâmetros modais, obtidos a partir de 10^4 realizações dos campos aleatórios dos parâmetros $E_\infty(x)$, $\Delta_i(x)$ e $\Omega_i(x)$: SWCNT	83
Figura 5 - PDF <i>a priori</i> inicial para o fator de escala β associado à variância do ruído: SWCNT	87
Figura 6 - Taxas de aceitação nos estágios do TMCMC nos casos $3A^b$, $3B^b$, $4A^b$ e $4B^b$: SWCNT	89
Figura 7 - PDFs <i>a priori</i> redimensionadas para o fator de escala β : SWCNT	93
Figura 8 - Comparação entre as PDFs marginais <i>a posteriori</i> obtidas considerando os dois níveis de informação <i>a priori</i> sobre os parâmetros, Solução-1 e Solução-2, no caso 3B: SWCNT	93
Figura 9 - Gráficos de espalhamento. Caso $3B^b$. Classe de modelos \mathcal{M}_2^b : SWCNT	96
Figura 10 - Gráficos de espalhamento. Caso $4B^b$. Classe de modelos \mathcal{M}_3^b : SWCNT	97
Figura 11 - Predições de frequências naturais: SWCNT	99
Figura 12 - Predições de razões de amortecimento: SWCNT	100
Figura 13 - Predições de FRFs. Casos $1A^b$ e $1B^b$: SWCNT	102
Figura 14 - Plausibilidades <i>a posteriori</i> das classes de modelos	105
Figura 15 - Realizações de campos aleatórios. Parâmetros: $E_\infty(x, y)$, $\Delta_i(x, y)$ e $\Omega_i(x, y)$: SLGS	110
Figura 16 - Propriedades viscoelásticas do modelo de referência em função do domínio espacial da placa. Módulo complexo local - Módulo de armazenamento $E'(x, y, \omega)$ e fator de perda $\eta(x, y, \omega)$: SLGS	112
Figura 17 - Histogramas das predições de parâmetros modais em 5000 realizações dos campos aleatórios dos parâmetros $E_\infty(x, y)$, $\Delta_1(x, y)$ e $\Omega_2(x, y)$: SLGS	115
Figura 18 - PDFs marginais <i>a posteriori</i> dos parâmetros. Caso $2B^p$ (Classe de modelos \mathcal{M}_1^p e estimando a variância do erro global), Solução-1 e Solução-2: SLGS	122
Figura 19 - Gráficos de espalhamento de estados. Caso $2B^p$ (Solução-2). Classe de modelos \mathcal{M}_1^p : SLGS	124
Figura 20 - Gráficos de espalhamento de estados. Caso $3B^p$ (Solução-2). Classe de modelos \mathcal{M}_2^p : SLGS	125

Figura 21 - Predições de frequências naturais (Solução-2): SLGS	127
Figura 22 - Predições de razões de amortecimento (Solução-2): SLGS	128
Figura 23 - Predições de FRFs. Casos $1A^p$ e $1B^p$ (Solução-2): SLGS	129
Figura 24 - Plausibilidades a <i>posteriori</i> das classes de modelos: SLGS	134

LISTA DE TABELAS

Tabela	1 - Escala de evidências proposta por Jeffreys (1948)	62
Tabela	2 - Propriedades geométricas, de amortecimento viscoso, massa e não-localidade no modelo de referência: SWCNT	77
Tabela	3 - Propriedades estatísticas nominais dos parâmetros viscoelásticos: SWCNT	78
Tabela	4 - Análise de convergência de malha pelo MEF: SWCNT	80
Tabela	5 - Parâmetros modais. Modelo de referência: SWCNT	81
Tabela	6 - Propriedades estatísticas dos parâmetros modais, obtidas a partir de 10^4 realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x)$, $E_1(x)$, $E_2(x)$, $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$: SWCNT	82
Tabela	7 - Dados experimentais sintéticos: SWCNT	85
Tabela	8 - Parâmetros a serem estimados em cada caso de estudo: SWCNT	86
Tabela	9 - PDFs <i>a priori</i> iniciais para os parâmetros: SWCNT	88
Tabela	10 - Valores mínimos e máximos dos parâmetros na primeira solução do problema inverso: SWCNT	91
Tabela	11 - PDFs <i>a priori</i> redimensionadas após a primeira solução dos problemas inversos: SWCNT	92
Tabela	12 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados. Solução-2. Casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ (Casos sem estimar a variância do erro): SWCNT	94
Tabela	13 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados. Solução-2. Casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$ (Casos estimando a variância do erro): SWCNT	95
Tabela	14 - Predições modais considerando as estimativas de MAP segundo os casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ (Tabela 12): SWCNT	101
Tabela	15 - Evidências das classes de modelos na 1ª execução do TMCMC (Solução-1): SWCNT	103
Tabela	16 - Evidência das classes de modelos na 2ª execução do TMCMC (Solução-2): SWCNT	104
Tabela	17 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos igualmente prováveis <i>a priori</i> : SWCNT	104
Tabela	18 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos distintamente prováveis <i>a priori</i> : SWCNT	106
Tabela	19 - Propriedades mecânicas geométricas, de amortecimento viscoso, massa e não-localidade adotadas como homogêneas espacialmente no modelo de referência: SLGS	109
Tabela	20 - Propriedades estatísticas nominais dos parâmetros viscoelásticos: SLGS	111
Tabela	21 - Análise de convergência de malha pelo MEF: SLGS	113
Tabela	22 - Parâmetros modais. Modelo de referência: SLGS	113

Tabela 23 - Propriedades estatísticas dos parâmetros modais, obtidas a partir de 5 mil realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x, y)$, $E_1(x, y)$, $E_2(x, y)$, $\Omega_1(x, y)$ e $\Omega_2(x, y)$: SLGS	114
Tabela 24 - Dados experimentais sintéticos: SLGS	117
Tabela 25 - Parâmetros a serem estimados em cada caso de estudo: SLGS	118
Tabela 26 - PDFs <i>a priori</i> iniciais para os parâmetros: SLGS	119
Tabela 27 - Valores mínimos e máximos dos parâmetros, amostrados na primeira solução dos problemas inversos: SLGS	121
Tabela 28 - PDFs <i>a priori</i> redimensionadas após a primeira solução dos problemas inversos: SLGS	121
Tabela 29 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados (Solução-2): SLGS	123
Tabela 30 - Predições modais considerando as estimativas de MAP segundo os casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$: SLGS	129
Tabela 31 - Evidências das classes de modelos na 1ª execução do TMCMC (Solução-1): SLGS	131
Tabela 32 - Evidências das classes de modelos na 2ª execução do TMCMC (Solução-2): SLGS	131
Tabela 33 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos igualmente prováveis <i>a priori</i> : SLGS	133
Tabela 34 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos distintamente prováveis <i>a priori</i> : SLGS	133

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	14
1	MODELOS NÃO-LOCAIS VISCOELÁSTICOS: VIGAS E PLACAS	25
1.1	Teoria da Elasticidade Não-Local	25
1.2	Relação constitutiva viscoelástica não-local pela abordagem de variáveis internas e considerando variabilidade espacial	27
1.2.1	<u>Modelo viscoelástico de relaxação: Parâmetros e Propriedades</u>	30
1.2.2	<u>Relação constitutiva viscoelástica não-local com variáveis internas dissipação</u>	33
1.3	Princípio de Hamilton	34
1.4	Modelo não-local viscoelástico: Viga de Euler-Bernoulli	34
1.4.1	<u>Relação constitutiva: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica</u>	35
1.4.2	<u>Equação de movimento: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica</u>	35
1.4.3	<u>Modelo de elementos finitos: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica</u>	38
1.5	Modelo não-local viscoelástico: Placa de Kirchhoff	42
1.5.1	<u>Relação constitutiva não-local viscoelástica: Placa de Kirchhoff</u>	42
1.5.2	<u>Equação de movimento: Placa de Kirchhoff não-local viscoelástica</u>	43
1.5.3	<u>Modelo de elementos finitos: Placa de Kirchhoff não-local viscoelástica</u>	47
1.6	Modelo Espaço de Estado e a Determinação de Parâmetros Modais	53
2	INFERÊNCIA BAYESIANA: ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E SELEÇÃO DE CLASSES DE MODELOS	55
2.1	Estimação de parâmetros	56
2.1.1	<u>Propriedades estatísticas dos parâmetros a partir da PDF a <i>posteriori</i></u>	59
2.1.2	<u>Métodos de Monte Carlo com Cadeias de Markov</u>	60
2.2	Seleção de classes de modelos	61
2.3	Média Bayesiana de modelos	64
2.4	Transitional Markov Chain Monte Carlo	65
2.4.1	<u>Algoritmo TMCMC</u>	68
3	RESULTADOS NUMÉRICOS	70
3.1	Construção e solução dos problemas inversos: Metodologia adotada e investigações objetivadas por inferência Bayesiana	70
3.1.1	<u>Geração de dados experimentais sintéticos</u>	71
3.1.2	<u>Os modelos de referência e as classes de modelo propostas nos problemas inversos</u>	71
3.1.3	<u>Hipóteses para a função de <i>verossimilhança</i></u>	72
3.1.4	<u>Metodologia de solução dos problemas inversos e análise do impacto da escolha da PDF a <i>priori</i> dos parâmetros</u>	74

3.1.5	<u>Plausibilidades a priori das classes de modelos</u>	76
3.2	Resultados Numéricos: Nanotubo de carbono	76
3.2.1	<u>Descrição geral do sistema e do modelo de referência: SWCNT</u>	76
3.2.2	<u>Geração de dados experimentais sintéticos: SWCNT</u>	84
3.2.3	<u>Classes de modelos, PDFs a priori iniciais e problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos: SWCNT</u>	85
3.2.4	<u>Resultados numéricos: Problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana</u>	88
3.2.5	<u>Resultados numéricos: Seleção de classes de modelos: SWCNT</u>	102
3.3	Resultados Numéricos: Lâmina de grafeno	109
3.3.1	<u>Descrição geral do sistema e do modelo de referência: SLGS</u>	109
3.3.2	<u>Geração de dados experimentais sintéticos: SLGS</u>	116
3.3.3	<u>Classes de modelos, PDFs a priori iniciais e problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos: SLGS</u>	117
3.3.4	<u>Resultados numéricos. Problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana: SLGS</u>	120
3.3.5	<u>Resultados numéricos. Problemas inversos de seleção de classes de modelos: SLGS</u>	130
	CONCLUSÃO	136
	REFERÊNCIAS	139
	APÊNDICE A – Expansão de Karhunen–Loève: Variabilidade espacial aleatória	154

INTRODUÇÃO

Nanoestruturas na forma de nanovigas e nanoplacas têm sido aplicadas como os principais componentes para sistemas *nanoeletromecânicos* (NEMS- *Nanoelectromechanical Systems*) (ZANG et al., 2015), tais como nanoatuadores (POPOV et al., 2007; LIN; LEE; CHEN, 2019) e nanorressonadores (HUTTEL et al., 2009; BUNCH et al., 2007). Esses sistemas são viabilizados graças aos avanços tecnológicos em micro e nanofabricação nas últimas décadas (CUI; GU, 2006; ARLETT; MYERS; ROUKES, 2011). Além disso, destacam-se as descobertas relativamente recentes de nanomateriais com propriedades mecânicas, elétricas, químicas, térmicas e ópticas excepcionais, como os nanotubos de carbono (LIJIMA; ICHIHASHI, 1993) e as lâminas de grafeno (NOVOSELOV et al., 2004). Entre as aplicações de nanorressonadores, tem-se os nanossensores mecânicos de massa baseados em ressonância (KE; ESPINOSA, 2005; LIM, 2016). Tais dispositivos são reportados como capazes de alcançar resolução atômica de sensoriamento e aferição de massas (YANG et al., 2006; JENSEN; KIM; ZETTL, 2008; CHASTE et al., 2012). Quando uma partícula se agrega ao nanorressonador, as alterações nas propriedades de massa e de rigidez do sistema resultam em uma alteração na frequência de ressonância, que, por sua vez, pode ser medida e utilizada para a detecção e quantificação da massa adicional agregada (KE; ESPINOSA, 2005; ADHIKARI; CHOWDHURY, 2012; TAMAYO et al., 2013). Tais aplicações requerem estudos experimentais e modelos matemáticos generalizados para se compreender e explorar o comportamento mecânico e dinâmico de nanocomponentes (KARLIČIĆ et al., 2016; CZEKANSKI; ZOZULYA, 2021).

Dado que estudos experimentais em nanoescala são extremamente difíceis de serem executados, tanto pelas dificuldades técnicas para a realização de experimentos em nanoescala quanto pelo custo financeiro inerente, modelos matemáticos têm sido amplamente utilizados para o estudo de nanossistemas (WANG; LI, 2012; KARLIČIĆ et al., 2016). Classificando de uma forma generalizada, entre as opções de modelagem matemática, tem-se a modelagem atomística e a realizada com a adoção de modelos contínuos de nanoestruturas (WANG; VARADAN, 2006; ARASH; ANSARI, 2010). Entre as abordagens atomísticas de modelagem de nanoestruturas, destaca-se a Dinâmica Molecular (*Molecular Dynamics*) (ALDER; WAINWRIGHT, 1957; ALDER; WAINWRIGHT, 1959). Na Dinâmica Molecular, o sistema nanométrico é modelado considerando os átomos participantes e a trajetória de cada um deles é obtida ao longo do intervalo de tempo simulado pela solução das equações de movimento de Newton (KARLIČIĆ et al., 2016; HINCHLIFFE, 2008; LEIMKUHNER; MATTHEWS, 2016). Apesar da Dinâmica Molecular ser amplamente utilizada para a modelagem do comportamento mecânico e dinâmico de nanoestruturas, uma vez que a metodologia consiste em descrever o sistema ao nível das interações atômicas, a simulação tende a ser computacionalmente custosa para sistemas

com maior quantidade de átomos, o que limita o tempo simulado do fenômeno estudado e, portanto, a sua aplicação generalizada (PENG et al., 2002; WANG; VARADAN, 2006; ARASH; ANSARI, 2010; NARENDAR; GOPALAKRISHNAN, 2011). Em contrapartida às simulações atomísticas, os modelos contínuos de nanoestruturas apresentam-se como alternativas, uma vez que a quantidade de átomos no sistema analisado não é uma limitação e a simulação numérica ocorre com um custo computacional consideravelmente menor (WANG; LI, 2012; ARASH; WANG, 2012).

Modelos contínuos baseados na mecânica do contínuo clássica podem não representar acuradamente o real comportamento de nanoestruturas, já que, nesses modelos, o aspecto discreto delas é desprezado, como a distância entre os átomos na rede cristalina e as não-homogeneidades dos nanomateriais (WANG; VARADAN, 2006; ARASH; WANG, 2012). Neste sentido, devido aos efeitos de escala, significativos no comportamento dinâmico dos nanomateriais, esses não podem ser simplesmente considerados como um corpo contínuo e homogêneo (ARASH; WANG, 2012). Algumas teorias não-clássicas contínuas permitem equacionar efeitos de escala (AKGÖZ; CIVALEK, 2011; SANTOS; REDDY, 2012; AREFI; SALIMI, 2015). Tem-se, por exemplo, a Teoria da Elasticidade das Tensões Acopladas (TOUPIN, 1962; MINDLIN; TIERSTEN, 1962; KOITER,), a Teoria Modificada do Gradiente de Deformação (LAM et al., 2003), a Teoria Modificada das Tensões Acopladas (YANG et al., 2002), a Teoria da Elasticidade Não-Local (ERINGEN, 1983) e a Teoria Não-Local do Gradiente de Deformação (LIM; ZHANG; REDDY, 2015).

A Teoria da Elasticidade Não-Local proposta por Eringen (1983) tem sido amplamente adotada para a modelagem do comportamento mecânico de nanoestruturas (ARASH; WANG, 2012; WANG; LI, 2012; KARLIČIĆ et al., 2016). Enquanto que na Teoria da Mecânica do Contínuo clássica ou local considera-se que a tensão em um determinado ponto do corpo material é função apenas da deformação nesse mesmo ponto, na Teoria da Elasticidade Não-Local, a tensão em um determinado ponto do corpo é determinada considerando os campos de deformação desenvolvidos em todo o domínio do corpo elástico em análise (ERINGEN, 1983; ARASH; WANG, 2012; WANG; LI, 2012; KARLIČIĆ et al., 2016). A hipótese de não-localidade pode ser utilizada para se capturar os efeitos de escala pela calibração do parâmetro não-local, simbolizado geralmente por e_0a , sendo a um comprimento interno característico do material e e_0 , uma constante pela qual ocorre a calibração de modelos não-locais de nanoestruturas a partir de dados experimentais ou de resultados numéricos obtidos por modelos já validados (ADHIKARI et al., 2015). Resultados numéricos por MD têm sido considerados como referência para fins de calibração e análise de acurácia de modelos não-locais, sendo reportado que modelos não-locais são mais adequados do que os respectivos locais baseados na Teoria da Elasticidade Clássica (DUAN; WANG; ZHANG, 2007; ANSARI; SAHMANI; ARASH, 2010; ARASH; ANSARI, 2010; MURMU; ADHIKARI, 2011; ANSARI; SAHMANI, 2012;

MURMU; ADHIKARI, 2012; LIANG; HAN, 2012; GHAVANLOO; FAZELZADEH, 2016; TUNA; KIRCA, 2019).

Além da questão da incorporação de efeitos de escala em modelos contínuos de nanoestruturas, considerando as potenciais aplicações de NEMS, tem-se que a operação desses sistemas pode ocorrer influenciada por diferentes fontes de amortecimento, tais como a ação de forças magnéticas externas (LEE; LIN, 2010; SCHMID et al., 2012), a interação com o ambiente fluido (ARLETT; MYERS; ROUKES, 2011; TAMAYO et al., 2013; KE; ESPINOSA, 2005), a interação com o substrato e absorções, umidade e perdas termoelásticas (LIFSHITZ; ROUKES, 2000; KE; ESPINOSA, 2005; EICHLER et al., 2011; CHEN et al., 2011; TAMAYO et al., 2013; AHMADI; RAHIMI; SUMELKA, 2021). Devido à complexidade em se caracterizar e quantificar fenômenos dissipativos, uma vez que geralmente as causas não são bem compreendidas ou completamente equacionadas, modelos generalizados de amortecimento são desejados para uma descrição mais acurada do comportamento de sistemas dinâmicos em nanoescala (LEI et al., 2013; LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013). Com esta finalidade, modelos com amortecimentos do tipo viscoso (ADHIKARI et al., 2015) e viscoelástico têm sido propostos na literatura não-local (LEI et al., 2013; LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013).

Modelos não-locais viscoelásticos de nanobarras (KARLIČIĆ et al., 2015b; AKBAS, 2020), nanovigas (ADHIKARI et al., 2015; LEI et al., 2013; LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013; MARTIN, 2019) e nanoplacas (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017; MOHAMMADSALEHI; ZARGAR; BAGHANI, 2017; ZENKOUR, 2016) foram propostos na literatura, assim como modelos de nanossensores de massa baseados em modelos não-locais viscoelásticos de nanovigas (CAJIĆ; KARLIČIĆ; LAZAREVIĆ, 2015; KHOSRAVI; HOSSEINI, 2020) e nanoplacas (KARLIČIĆ et al., 2015a; RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2018). Geralmente, modelos viscoelásticos reológicos, também referenciados como análogo-mecânicos, são adotados para representar o amortecimento interno em modelos não-locais de nanoestruturas, por exemplo: o modelo viscoelástico de Kelvin-Voigt (POURESMAEELI; GHAVANLOO; FAZELZADEH, 2013; LEI et al., 2013; LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013; KARLIČIĆ et al., 2017), o modelo viscoelástico de Maxwell (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017; MOHAMMADSALEHI; ZARGAR; BAGHANI, 2017), o modelo viscoelástico de Zener (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2018) e o modelo viscoelástico generalizado de Maxwell, podendo se considerar também o particular caso do sólido linear de três parâmetros a partir do modelo viscoelástico generalizado de Maxwell (LEI et al., 2013; RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017). Modelos não-locais viscoelásticos baseados em derivadas fracionárias a partir dos modelos viscoelásticos de Kelvin-Voigt (ANSARI et al., 2015; CAJIĆ; KARLIČIĆ; LAZAREVIĆ, 2017; CAJIĆ et al., 2018) e Zener (MARTIN, 2019) também são apresentados na literatura não-local.

Na literatura clássica (local) sobre viscoelasticidade (HENRIQUES; BORGES; CASTELLO, 2017; RADE et al., 2019), além dos modelos viscoelásticos reológicos e suas

respectivas versões com derivadas fracionárias, outras classes de modelos viscoelásticos são também encontradas na forma de funções escalares de relaxação, incluindo, a título de exemplo, o modelos baseados na função de relaxação de Biot (1954), o modelo de Campos Anelásticos de Deslocamentos Internos (*ADF-Anelastic Displacement Fields*) (LESIEUTRE; MINGORI, 1990; LESIEUTRE; BIANCHINI, 1995; LESIEUTRE; LEE, 1996) e o modelo viscoelástico GHM (GOLLA; HUGHES, 1985; MCTAVISH; HUGHES, 1992; MCTAVISH; HUGHES, 1993). Faria, Stutz e Castello (2020) apresentaram um modelo de viga de Euler-Bernoulli viscoelástico não-local baseado na abordagem de variáveis internas (CASTELLO et al., 2008; BORGES et al., 2015). Semelhante aos modelos viscoelásticos ADF e GHM, variáveis internas de dissipação são incorporadas no modelo constitutivo (VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010). A formulação do modelo de elementos finitos com estados aumentados para a introdução das variáveis internas, responsáveis por descrever o comportamento viscoelástico, foi também apresentada por Faria, Stutz e Castello (2020).

Recentemente, análises de propagação de incertezas paramétricas em modelos não-locais de sistemas em nanoescala têm sido apresentadas por diferentes autores, por exemplo: Radebe e Adali (2014), Radebe e Adali (2015), Lv e Liu (2018), Liu e Lv (2018), Liu e Lv (2019), Ghanipour et al. (2018), Ghanipour e Ghavanloo (2019), Jena, Chakraverty e Jena (2019), Jena, Chakraverty e Malikan (2020) e Xie e Ni (2021). Nesses estudos são caracterizadas as predições dos modelos não-locais levando em conta as propagações de incertezas paramétricas através do modelo teórico adotado, o problema direto. A quantificação de incertezas é justificada pelo fato de que as propriedades materiais de nanoestruturas, quando mensuradas experimentalmente, podem ocorrer com considerável grau de imprecisão, dado que existem as dificuldades técnicas de medição de grandezas físicas em nanoescala e tem-se a presença de imperfeições ou defeitos na estrutura molecular de nanomateriais (LV; LIU, 2018; GHANIPOUR et al., 2018), conforme verificado em investigações experimentais por diferentes autores (KRISHNAN et al., 1998; SALVETAT et al., 1999; XIE et al., 2000; LU; BHATTACHARYA, 2005; LEE et al., 2008; KOTAKOSKI et al., 2011). Dentre os trabalhos citados com avaliação de propagação de incertezas em modelos não-locais, destacam-se alguns exemplos. Radebe e Adali (2014) estudaram as cargas críticas de flambagem em nanoplacas tomando como incertos o parâmetro de escala não-local e as constantes elásticas. Lv e Liu (2018) investigaram o efeito de incertezas em nanomateriais no estudo de vibração e flambagem de nanovigas funcionalmente graduadas em ambientes térmicos, sendo adotado um modelo de viga de Euler-Bernoulli e determinados os valores limites das frequências naturais e as temperaturas críticas de flambagem. Jena, Chakraverty e Jena (2019) avaliaram a propagação de incertezas nas frequências naturais para uma nanoviga de Euler-Bernoulli não-local, adotando como incertos o módulo de elasticidade e a massa específica da viga. Xie e Ni (2021) estudaram o comportamento em vibração transversal de uma lâmina de

grafeno simplesmente suportada em suas extremidades e adotaram o parâmetro não-local de escala como incerto.

Para fins práticos, modelos viscoelásticos não-locais de nanocomponentes devem ser determinados com a formulação e a solução de problemas inversos para se estimar o parâmetro não-local e os demais parâmetros desconhecidos, assim como os associados ao modelo viscoelástico adotado. Problemas inversos de estimação de parâmetros ocorrem quando é necessária a identificação dos parâmetros de uma classe de modelos com base em observações experimentais de um dado sistema (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAIPIO; SOMERSALO, 2006). Na literatura, este processo também é comumente referido como problema inverso de calibração de modelos, atualização de modelos, identificação de modelos ou identificação de parâmetros (YUEN, 2010).

Na maioria dos trabalhos propostos para a calibração de modelos não-locais de nanoestruturas, o problema inverso de estimação de parâmetros é geralmente direcionado apenas ao parâmetro não-local, considerando relações constitutivas elásticas não-locais e resultados numéricos de simulações por MD (DUAN; WANG; ZHANG, 2007; ANSARI; SAHMANI; ARASH, 2010; ARASH; ANSARI, 2010; ARASH; WANG, 2011; MURMU; ADHIKARI, 2011; ANSARI; SAHMANI, 2012; MURMU; ADHIKARI, 2012; LIANG; HAN, 2012; GHAVANLOO; FAZELZADEH, 2016; TUNA; KIRCA, 2019). No geral, as estimativas obtidas consistem de valores pontuais para os parâmetros que proporcionam o melhor ajuste aos resultados numéricos de simulações por MD. Por exemplo, Tuna e Kirca (2019) propuseram uma metodologia que consiste em um problema de otimização unificado com base nos comportamentos mecânico e dinâmico de nanotubos de carbono. Esses comportamentos foram simulados por MD considerando flambagem e vibração, com a obtenção das cargas de flambagem e das frequências naturais, respectivamente; em condições de contorno e razões de aspecto diversas. Problemas inversos para estimação de parâmetros foram formulados para o parâmetro não-local, a massa específica e o módulo de elasticidade. Para a obtenção dos valores ótimos para os parâmetros, os autores adotaram o algoritmo de otimização estocástico de Evolução Diferencial (DE - *Differential Evolution*) (STORN; PRICE, 1997).

Para a calibração de modelos não-locais viscoelásticos de nanoestruturas, a caracterização do amortecimento interno pode ser, em princípio, realizada teoricamente pela solução de um problema inverso de estimação de parâmetros, considerando observações experimentais ou resultados numéricos a partir de simulações por MD (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017). Entretanto, estimação de parâmetros considerando modelos não-locais viscoelásticos é um estudo pouco abordado na literatura não-local (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Já na literatura clássica (local) sobre viscoelasticidade, modelos viscoelásticos são comumente identificados considerando dados experimentais descrevendo o módulo complexo (BORGES et al., 2014; BORGES et al., 2015) ou a relação tensão-deformação do comportamento em relaxação (HAARIO et al., 2014;

VEMAGANTI; MADIREDDY; KEDARI, 2020) de materiais viscoelásticos. Com abordagens determinísticas, diversas classes de modelos viscoelásticos, sobretudo as reológicas com derivadas de ordens fracionárias (BAGLEY; TORVIK, 1983) e as classes com inclusão de variáveis internas de dissipação (LESIEUTRE; BIANCHINI, 1995; GOLLA; HUGHES, 1985; CASTELLO, 2004), têm sido calibradas na literatura (TRINDADE; ALMEIDA, 2006; BORGES et al., 2015; SOUSA et al., 2017; HUANG et al., 2019).

O ponto em questão em relação à abordagem determinística para solução de problemas inversos de identificação de parâmetros é que, comumente, não há a percepção generalizada dos impactos das incertezas nas estimativas paramétricas obtidas, uma vez que, por algoritmos determinísticos de otimização, apenas uma estimativa pontual dos parâmetros é obtida a partir da minimização de uma função objetivo (ÖZİŞİK; ORLANDE, 2000; NICHOLS et al., 2010). Na prática, dados experimentais são frequentemente corrompidos com ruído de medição. Por exemplo, consideráveis variabilidades, em parte por incertezas em medições experimentais, são reportadas por diversos autores na literatura com respeito às propriedades físicas de nanomateriais (KRISHNAN et al., 1998; SALVETAT et al., 1999; XIE et al., 2000; LU; BHATTACHARYA, 2005; LEE et al., 2008; KOTAKOSKI et al., 2011; LV; LIU, 2018; GHANIPOUR et al., 2018). Outra fonte de incerteza surge da discrepância de modelagem, quando, por exemplo, a classe de modelos adotada pode não ser adequada para a representação acurada dos fenômenos observados, sendo sempre utópica a representação matemática perfeita de qualquer sistema dinâmico real de alta complexidade. Esse aspecto pode ser consideravelmente crítico em nanoescala, pois a física que governa os sistemas dinâmicos ainda não é totalmente bem compreendida, como os efeitos de escala no comportamento mecânico dos nanomateriais.

Inferência Bayesiana é uma abordagem apropriada para a formulação de problemas inversos considerando modelos e dados experimentais incertos. Quando aplicada na formulação e solução de problemas inversos de estimação de parâmetros, permite-se que sejam levadas em conta as incertezas nos dados experimentais e o impacto delas nas estimativas dos parâmetros de interesse em um modelo teórico. Os parâmetros desconhecidos são modelados como variáveis aleatórias e as incertezas descritas por funções de densidade de probabilidade (*PDF-Probability Density Function*). Pelo Teorema de Bayes, como resultado do problema inverso, pode-se obter a PDF a *posteriori* dos parâmetros, tal que esta representa o estado de incertezas para as estimativas dos parâmetros depois de terem sido levados em conta os dados experimentais. Portanto, permite-se, de acordo com as densidades de probabilidade, a análise de toda a região de solução no espaço paramétrico (KAPIO; SOMERSALO, 2006).

Em problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana, destacam-se os métodos de Monte Carlo com Cadeias de Markov (MCMC)(METROPOLIS; ULAM, 1949; METROPOLIS et al., 1953; HASTINGS, 1970). Tais métodos consistem de uma família de algoritmos para a exploração de PDFs por amostragem, em que

uma cadeia de Markov é obtida possuindo as mesmas propriedades estatísticas da PDF alvo (KAPIO; SOMERSALO, 2006). Entre os métodos MCMC, existem, por exemplo, os algoritmos *Metropolis-Hastings* (MH)(METROPOLIS; ULAM, 1949; METROPOLIS et al., 1953; HASTINGS, 1970), *Delayed Rejection* (DR) (MIRA, 2001), *Adaptive Metropolis* (AM) (HAARIO; SAKSMAN; TAMMINEN, 2001), *Delayed Rejection Adaptive Metropolis* (DRAM)(HAARIO et al., 2006) e *Coupled Markov Chain Monte Carlo* (CMCMC)(GEYER, 1991; ALTEKAR et al., 2004).

Inferência Bayesiana não é limitada a ser aplicada apenas em problemas inversos para estimação de parâmetros. Adicionalmente, pode-se considerar avaliar, a partir dos dados experimentais, dentre um conjunto de classes de modelos propostas, qual a mais indicada para a representação do sistema investigado, consistindo na formulação de um problema inverso de seleção de classes de modelos. A determinação da melhor classe de modelos deve ser baseada no Princípio da Navalha de Occam (MACKAY, 2005) e no Princípio do Modelo Parcimonioso (BURNHAM; ANDERSON, 1998), tal que a melhor classe é aquela que apresenta o melhor equilíbrio entre complexidade e qualidade de predição em relação aos dados experimentais (MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010). Como quantificação desse equilíbrio, no formalismo Bayesiano, tem-se as evidências das classes de modelos, pelas quais comparação e ranqueamento de classes de modelos são executados (MACKAY, 2005; BECK, 2010). Por fim, havendo mais de uma classe de modelos plausível para representar o sistema, pode-se realizar a média Bayesiana de modelos. Esse processo consiste em realizar uma média ponderada das predições de todas as classes de modelos propostas para inferência, considerando as plausibilidades *a posteriori* das classes de modelos, obtidas da solução do problema inverso de seleção de classes de modelos (MACKAY, 2005; BECK, 2010).

Para problemas inversos de seleção de modelos, métodos MCMC, geralmente, não fornecem diretamente a evidência de uma classe de modelos quando estimada a PDF *a posteriori* dos parâmetros (SKILLING, 2006). Por exemplo, segundo Hernández, Castello e Matt (2018), uma possibilidade seria utilizar amostras de uma cadeia de Markov e adotar um estimador de núcleo de densidade de probabilidade (BOTTEV; GROTHOWSKI; KROESE, 2010) para se efetuar a obtenção de evidências diretamente do Teorema de Bayes. Outra possibilidade é o estimador Média Harmônica proposto por Newton e Raftery (1994), pelo qual a evidência poderia ser estimada considerando, também, amostras da PDF *a posteriori*, apesar de ser reportada como uma metodologia de pouca acurácia (RAFTERY et al., 2006). Além dessas abordagens, na literatura também constam algoritmos como o *Transitional Markov Chain Monte Carlo* (TMCMC)(CHING; CHEN, 2007) e o *Nested Sampling* (NS)(SKILLING, 2006) que possibilitam a exploração por amostragem da PDF *a posteriori* dos parâmetros e a obtenção da evidência do modelo de forma mais direta, sendo alternativas ao uso de métodos MCMC mais comuns, não capazes da obtenção direta das evidências (LLORENTE et al., 2020).

Inferência Bayesiana tem sido aplicada em diversos problemas de engenharia que envolvem sistemas dinâmicos, tanto para estimação de parâmetros quanto para seleção de classes de modelos (MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010; LECOMTE et al., 2012). De forma crescente na última década, autores têm aplicado inferência Bayesiana em viscoelasticidade, sobretudo para a estimação de parâmetros em modelos viscoelásticos. Zhang et al. (2013) realizaram a caracterização de propriedades mecânicas de materiais viscoelásticos em estruturas laminadas, adotando um modelo viscoelástico de derivadas fracionárias de cinco parâmetros. Oates et al. (2013) realizaram quantificação de incertezas em estimação de parâmetros em modelos hiper-elásticos e viscoelásticos análogo-mecânicos não lineares baseados no modelo generalizado de Maxwell, considerando dados experimentais e adotando o algoritmo DRAM para amostragem da PDF a *posteriori*. Hernandez et al. (2015) estimaram os parâmetros de um modelo viscoelástico de derivadas fracionárias análogo-mecânico de Zener com cinco parâmetros e a cadeia de Markov foi obtida pelo clássico algoritmo de amostragem MH. Rappel et al. (2016) conduziram análises de identificação de parâmetros pelas abordagens Bayesiana, adotando o algoritmo de amostragem AM, e determinística, pelo método dos mínimos quadrados, para o modelo viscoelástico análogo-mecânico sólido linear padrão e considerando dados experimentais artificialmente criados de tensão em relaxação. Karathanasopoulos e Ganghoffer (2019) realizaram estimação de parâmetros por inferência Bayesiana pelo algoritmo de amostragem TMCMC. Foi considerado o modelo viscoelástico análogo-mecânico sólido linear padrão na descrição de propriedades mecânicas viscoelásticas de tecidos componentes de tendões. Balbino et al. (2021) adotaram o método MCMC e estimaram os parâmetros de um modelo viscoelástico de derivadas fracionárias de quatro parâmetros, sendo modelada a dependência com a temperatura e verificada a capacidade preditiva do modelo adotado.

Além da estimação de parâmetros de modelos viscoelásticos, recentemente, o problema de seleção de modelos viscoelásticos também tem sido abordado no contexto de inferência Bayesiana. Os autores Haario et al. (2014) adotaram modelos viscoelásticos análogo-mecânicos generalizados de Maxwell e conduziram a identificação de parâmetros para um material polimérico viscoelástico por Inferência Bayesiana, tendo sido adotado o algoritmo AM e dados experimentais de tensão e deformação do comportamento em relaxação do material. Levando em conta a identificabilidade paramétrica, os autores avaliaram a quantidade de unidades de Maxwell apropriada no modelo viscoelástico generalizado, uma vez que as classes de modelos super-parametrizadas não eram identificáveis por causa da redundância paramétrica. Freund e Ewoldt (2015) apresentaram uma discussão sobre o equilíbrio entre a qualidade de ajuste a dados experimentais e a complexidade de modelos viscoelásticos em um formalismo Bayesiano. Eles aplicaram a estratégia de amostragem *Parallel Tempering* (GREGORY, 2005), que é similar ao algoritmo CMCMC (GEYER, 1991; ALTEKAR et al., 2004; LIANG; LIU; CARROLL, 2010), juntamente com uma proposta adaptativa com base no AM (HAARIO; SAKSMAN; TAM-

MINEN, 2001; ANDRIEU; THOMS, 2008). Curvas experimentais consistiram das partes real e imaginária dos módulos complexos dos materiais PVA-bórax aquoso (EWOLDT; BHARADWAJ, 2013) e "pasta de glúten"(NG; MCKINLEY, 2008; NG; MCKINLEY; EWOLDT, 2011). Destaca-se o uso do modelo análogo-mecânico generalizado de Maxwell e um específico para a pasta de glúten, o "Critical-Gel/ Rouse model"(CGRM) (NG; MCKINLEY; EWOLDT, 2011). Pelo uso de uma menor quantidade parâmetros para um ajuste relativamente satisfatório às curvas de calibração, o CGRM se apresentou mais plausível, ainda que os modelos de Maxwell com maior número de modos conseguissem um ajuste melhor aos dados experimentais.

Nesta tese, problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos viscoelásticos não-locais são formulados e solucionados no contexto da inferência Bayesiana. São considerados modelos viscoelásticos não-locais de nanovigas e nanoplacas, onde a não localidade é descrita pela Teoria da Elasticidade Não-Local (ERINGEN, 1983), ao passo que o comportamento viscoelástico é descrito pela abordagem de variáveis internas (CASTELLO, 2004; CASTELLO et al., 2008; BORGES et al., 2015). As hipóteses cinemáticas para vigas e placas são adotadas de acordo com as teorias de viga de Euler-Bernoulli e de placa de Kirchhoff. Modelos de elementos finitos viscoelásticos e não-locais são apresentados em conformidade com a literatura (PHADIKAR; PRADHAN, 2010; REDDY, 1993). Na formulação e análise dos problemas inversos, diferentes classes de modelos viscoelásticos são consideradas, onde as classes se diferem pela quantidade de variáveis internas utilizadas para a descrição do comportamento dinâmico dos nanomateriais. Para fins de comparação, uma classe de modelos não local e com amortecimento viscoso é também considerada. Os dados experimentais considerados nos problemas inversos consistem de parâmetros modais (frequências naturais e razões de amortecimento) gerados de forma sintética, a partir da adição de um ruído aleatório às predições de um modelo de referência. Os modelos de referência são modelos viscoelásticos não-locais que consideram variabilidade espacial nas propriedades viscoelásticas, modeladas por campos aleatórios Gaussianos suaves a partir da expansão espectral de Karhunen–Loève (KL) (SPANOS; GHANEM, 1989). Por inferência Bayesiana, objetiva-se analisar todo o espaço paramétrico das funções de densidade de probabilidade *a posteriori* nas diferentes classes de modelos investigadas e, além disso, a obtenção das respectivas plausibilidades *a posteriori* dessas classes de modelos. Para a amostragem das PDFs *a posteriori* dos parâmetros de interesse e para a determinação das evidências das classes de modelos, é adotado o algoritmo *Transitional Markov Chain Monte Carlo* (TMCMC) proposto por Ching e Chen (2007).

Esta tese é uma continuidade ao que foi abordado na dissertação de mestrado do autor (FARIA, 2017), como também ao que foi abordado em trabalhos anteriores, publicados ao longo da condução das atividades de pesquisa, em especial o artigo (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Na dissertação, um modelo de elementos finitos para uma

viga de Euler-Bernoulli não-local foi apresentado, incluindo a modelagem de comportamento viscoelástico pela inclusão de variáveis internas de dissipação (FARIA, 2017). Problemas inversos de estimação de parâmetros foram construídos e solucionados por inferência Bayesiana com o uso do método MCMC pelo algoritmo de amostragem DRAM (HAARIO et al., 2006). Dados experimentais sintéticos foram gerados a partir dos polos de um sistema dinâmico que consistia em um nanotubo de parede única como viga viscoelástica em vibração transversal. A estimação do parâmetro não-local foi concluída como influenciada de maneira significativa por propagação de incertezas de origem paramétrica e de medição experimental dos polos do sistema modelado. Uma vez que a mesma classe de modelos utilizada na geração dos dados experimentais sintéticos era adotada para estimação de parâmetros nos problemas inversos formulados, as análises foram realizadas por "crime inverso" (KAPIO; SOMERSALO, 2006). Posteriormente, no trabalho apresentado pelo autor e seus orientadores (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020), modificações e extensões à abordagem foram realizadas. Entre elas, incertezas por discrepância de modelo foram abordadas, com a especificação de classes de modelos viscoelásticos distintas na geração dos dados experimentais e no problema inverso de estimação de parâmetros, diferenciando-se pelas quantidades de variáveis internas, não configurando a ocorrência de crime inverso.

As principais contribuições desta tese se concretizam nos seguintes tópicos.

- Proposição de um modelo de elementos finitos de placa de Kirchhoff, a partir de uma relação constitutiva não-local viscoelástica, pela teoria da elasticidade não-local e com a inclusão do comportamento dissipativo viscoelástico pelo conceito de variáveis internas (CASTELLO, 2004; CASTELLO et al., 2008).
- Formulação e solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana para estruturas em nanoescala modeladas com o uso de modelos não-locais viscoelásticos de vigas e placas.

Pode-se argumentar que inferência Bayesiana para solução de problemas inversos de estimação e seleção de modelos viscoelásticos, mesmo considerando modelos locais, é um tópico com abordagem recente, tendo sido pouco trabalhado até o momento na literatura. Logo, contribuições para uma melhor compreensão desses problemas inversos ainda podem ser realizadas, sendo parte do escopo dessa tese. Ademais, não é de conhecimento do autor que estimação de parâmetros em modelos não-locais de nanoestruturas por inferência Bayesiana tenha sido abordada por outros autores, apesar de ser de suma importância para fins práticos de utilização de modelos não-locais, principalmente viscoelásticos de nanoestruturas, face à inevitável e significativa existência de incertezas a partir de experimentos, propriedades materiais e modelos incertos.

Em termos de modelagem de efeitos de escala e viscoelasticidade por modelos não-locais baseados na Teoria da Elasticidade Não-Local, verifica-se que, mesmo existindo

diversas proposições de modelos de elementos finitos com não-localidade e viscoelasticidade em outros trabalhos na literatura não-local (ARASH; WANG, 2012; ELTAHER; KHATER; EMAM, 2016; KARLIČIĆ et al., 2016), não são abordados os modelos viscoelásticos baseados na inclusão de variáveis de internas dissipação, como o ADF ou o GHM, por outros autores. A maioria dos trabalhos têm considerado os modelos análogo-mecânicos ou os análogo-mecânicos de derivadas fracionárias para a modelagem de comportamento viscoelástico em modelos de nanoestruturas baseados na Teoria da Elasticidade Não-Local (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017; MARTIN, 2019). A abordagem de modelagem de amortecimento viscoelástico por inclusão de variáveis internas é conveniente na construção de modelos de elementos finitos de sistemas com amortecimento viscoelástico (VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010). Ademais, apresenta-se um modelo de placa não-local viscoelástico com a inclusão do comportamento dissipativo viscoelástico pelo conceito de variáveis internas, sendo uma extensão da pesquisa até então realizada pelo próprio autor, pois, nos trabalhos anteriores, foram considerados somente modelos não-locais viscoelásticos por variáveis internas para vigas.

A organização dessa tese é realizada conforme segue. No Capítulo 1 são abordados os modelos não-locais viscoelásticos de vigas e placas, o que envolve a Teoria da Elasticidade Não-Local de Eringen (1983) e a modelagem do comportamento viscoelástico pelo conceito de variáveis internas, desde o desenvolvimento das equações de movimento até os respectivos modelos discretizados pelo método dos elementos finitos, considerando os modelos de viga de Euler-Bernoulli e placa de Kirchhoff, além da determinação dos parâmetros modais. No Capítulo 2 são abordados os conceitos de formulação e solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana. No Capítulo 3 tem-se resultados numéricos de solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos considerando duas nanoestruturas como casos de aplicação, um nanotubo de carbono como viga e uma lâmina de grafeno como placa, ambos como estruturas suspensas em vibração. Por fim, ao final da tese são reiteradas as principais conclusões e contribuições, incluindo a realização de sugestões de trabalhos futuros.

1 MODELOS NÃO-LOCAIS VISCOELÁSTICOS: VIGAS E PLACAS

Esse capítulo é dedicado à apresentação da modelagem matemática envolvendo os modelos contínuos não-locais de vigas e placas propostos nesta tese. A Teoria da Elasticidade Não-Local é adotada, o amortecimento no sistema é modelado considerando as hipóteses de amortecimento viscoso e viscoelástico. Ademais, para a viga são adotadas as hipóteses do modelo de viga de Euler-Bernoulli e, para a placa, as respectivas ao modelo de placa de Kirchhoff. Nos modelos apresentados são negligenciados os efeitos de inércia rotacional e cisalhamento transversal e a hipótese de comportamento isotrópico pelos materiais é adotada. As equações de movimento para vigas de Euler-Bernoulli e placas de Kirchhoff não-locais viscoelásticas são obtidas adotando-se que as propriedades viscoelásticas do material possuem variabilidade espacial. Modelos de Elementos Finitos (MEF) para vigas e placas são apresentados e o comportamento viscoelástico é modelado por variáveis internas de dissipação. A apresentação sistemática do desenvolvimento matemático dos modelos de viga e placa propostos se justifica pela especificidade dos modelos abordados.

1.1 Teoria da Elasticidade Não-Local

Pela Teoria da Elasticidade Clássica, é estabelecido que o tensor de tensões $\sigma_{ij}^L(\mathbf{x}, t)$ em um determinado ponto \mathbf{x} do domínio de um corpo material num instante de tempo t é dependente apenas do tensor de deformações $\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t)$ nesse ponto (REDDY, 2007; KARLIČIĆ et al., 2016). Portanto, considerando um sólido homogêneo e linear elástico, a relação constitutiva local é dada por

$$\sigma_{ij}^L(\mathbf{x}, t) = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

onde C_{ijkl} é o tensor de elasticidade de quarta ordem.

A Teoria da Elasticidade Não-local proposta por Eringen (1983) pode ser considerada como uma generalização da Teoria da Elasticidade Clássica. Por esta teoria, é estabelecido um tensor de tensões não-local σ_{ij} em função de todo o campo de deformações em um corpo material \mathcal{B} . Segundo Eringen (2002), teorias de campos clássicas falham nas predições de fenômenos físicos em corpos materiais cujo o comprimento interno característico possui um valor próximo ao comprimento externo característico. Nestes casos, ainda conforme abordado por Eringen (2002), teorias atômicas ou não-locais são as opções para se conseguir levar em conta as significativas interações não-locais atômicas. Dessa forma, pela Teoria da Elasticidade Não-Local, a relação entre o tensor de tensões não-local

σ_{ij} e o local σ_{ij}^L pode ser expressa por

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathcal{B}} \mathcal{K}^{NL}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau) \sigma_{ij}^L(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}' \quad (2)$$

onde $\mathcal{K}^{NL}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau)$ corresponde à função núcleo (*kernel*) não-local. Esta função pondera a influência da tensão local considerada em outro ponto \mathbf{x}' por meio da distância euclidiana $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ e da razão entre comprimentos característicos τ , sendo esta representada por

$$\tau = \frac{e_0 a}{l} \quad (3)$$

onde a é um comprimento característico interno, que pode ser o parâmetro de rede ou o comprimento da ligação química entre átomos de carbono C-C (KARLIČIĆ et al., 2016), e l representa um comprimento característico externo, que pode ser tomado como sendo um comprimento de onda ou, ainda, uma medida externa geométrica que caracterize o objeto material (KARLIČIĆ et al., 2016). O parâmetro e_0 é uma constante do material, devendo ser calibrada de modo a reproduzir resultados oriundos de experimentos ou de outros modelos validados (MURMU; ADHIKARI, 2012),

Eringen (1983) adota a função núcleo $\mathcal{K}^{NL}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau)$ como sendo a função de Green de um operador diferencial linear: $\mathcal{L}[\mathcal{K}^{NL}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \tau)] = \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$, onde δ é a função delta de Dirac. A relação integral dada pela equação (2) pode ser reescrita como

$$\mathcal{L}[\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t)] = \sigma_{ij}^L(\mathbf{x}, t) \quad (4)$$

Eringen (1983) propôs também uma função núcleo específica dada por

$$\mathcal{K}^{NL}(|\mathbf{x}|, \tau) = (2\pi l^2 \tau^2)^{-1} \mathcal{K}_0 \left(\frac{\sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}}}{l\tau} \right) \quad (5)$$

onde \mathcal{K}_0 é a função de *Bessel* modificada.

Por Eringen (1983), com a adoção dessa função núcleo e procedendo a obtenção do operador diferencial linear, uma relação constitutiva equivalente à relação constitutiva integral expressa na Equação (2) foi obtida, sendo dada por

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = \sigma_{ij}^L(\mathbf{x}, t) \quad (6)$$

onde ∇^2 representa o operador Laplaciano e $e_0 a$ é denominado como parâmetro não-local.

Ao se proceder a substituição de (2) em (6), uma lei de Hooke generalizada não-local para um sólido elástico pode ser expressa na forma a seguir.

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_{ij}(\mathbf{x}, t) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t) \quad (7)$$

A forma diferencial dada pela Equação (7) tem sido amplamente utilizada na literatura não-local para o desenvolvimento de modelos elásticos não-locais de nanoestruturas (ARASH; WANG, 2012; WANG; LI, 2012; ELTAHER; KHATER; EMAM, 2016).

1.2 Relação constitutiva viscoelástica não-local pela abordagem de variáveis internas e considerando variabilidade espacial

Amortecimento em sistemas dinâmicos nanométricos pode ocorrer por diversos fatores (CHEN et al., 2011; TAMAYO et al., 2013) e modelos generalizados de amortecimento são desejados com a finalidade de representar, com a melhor acurácia, o real comportamento dinâmico de nanossistemas. Segundo Lei et al. (2013), modelos viscoelásticos de amortecimento são conceitualmente mais gerais do que a hipótese particular de amortecimento viscoso (LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013). Além disso, viscoelasticidade, conforme destacado por Lei et al. (2013), pode ser entendida também como uma não-localidade no domínio do tempo (LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013). De fato, os comportamentos de fluência e relaxação exibidos por materiais viscoelásticos podem ser expressos de uma forma generalizada por integrais de convolução no domínio do tempo (GUTIERREZ, 2014). Desconsiderando a influência da temperatura na modelagem e adotando a hipótese de que as propriedades viscoelásticas possuem variabilidade espacial, um comportamento tensão *versus* deformação viscoelástico linear em relaxação pode ser expresso na forma

$$\sigma_{ij}^{L*}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \mathcal{K}_{ijkl}^*(\mathbf{x}, t - t') \frac{\partial \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t')}{\partial t'} dt' \quad (8)$$

onde \mathcal{K}_{ijkl}^* é o tensor módulo de relaxação de quarta ordem do material, que descreve a resposta do material quando ele é submetido a uma deformação constante, e σ_{ij}^{L*} é o tensor de tensões local viscoelástico, ambos definidos no ponto \mathbf{x} do material e em um instante de tempo t . O intervalo de integração a partir do limite inferior $-\infty$ até o instante de tempo t significa que o modelo contempla todo o histórico de deformações ao longo do tempo para a determinação do comportamento viscoelástico. Este efeito de memória associado aos materiais viscoelásticos indica a não-localidade temporal associada aos modelos em viscoelasticidade.

Tal como considerado por Lei et al. (2013), uma relação constitutiva não-local viscoelástica pode ser obtida por uma combinação da Teoria da Elasticidade Não-Local com relações constitutivas viscoelásticas (LEI; ADHIKARI; FRISWELL, 2013). Dessa forma, combinando as Equações (6) e (8), tem-se

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma_{ij}^*(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \mathcal{K}_{ijkl}^*(\mathbf{x}, t - t') \frac{\partial \varepsilon_{kl}(\mathbf{x}, t')}{\partial t'} dt' \quad (9)$$

onde σ_{ij}^* representa o tensor de tensões não-local viscoelástico.

Alternativamente, considerando um estado de tensões generalizado em três dimensões e adotando a notação matricial de Voigt (REDDY, 2013), tem-se

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \boldsymbol{\mathcal{K}}^*(\mathbf{x}, t - t') \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t')}{\partial t'} dt' \quad (10)$$

onde $\boldsymbol{\mathcal{K}}^* \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ é a matriz dos módulos viscoelásticos de relaxação, análoga ao tensor módulo de elasticidade \mathcal{K}_{ijkl}^* , e $\boldsymbol{\sigma}^* \in \mathbb{R}^6$ e $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^6$ são os vetores de tensões viscoelásticas e deformações, respectivamente, análogos aos tensores σ_{ij}^* e ε_{kl} . As tensões e deformações para um estado tridimensional de tensões são representadas, respectivamente, por

$$\boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}, t) = [\sigma_{xx}^* \quad \sigma_{yy}^* \quad \sigma_{zz}^* \quad \sigma_{xy}^* \quad \sigma_{xz}^* \quad \sigma_{yz}^*]^T(\mathbf{x}, t) \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) = [\varepsilon_{xx} \quad \varepsilon_{yy} \quad \varepsilon_{zz} \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{xz} \quad \gamma_{yz}]^T(\mathbf{x}, t) \quad (12)$$

onde o símbolo T representa a transposição dos vetores, σ_{xx}^* , σ_{yy}^* e σ_{zz}^* são campos de tensões normais; σ_{xy}^* , σ_{xz}^* e σ_{yz}^* são campos de tensões de cisalhamento; ε_{xx} , ε_{yy} e ε_{zz} são campos de deformações normais e γ_{xy} , γ_{xz} e γ_{yz} são campos de deformações por cisalhamento, dados em função do ponto \mathbf{x} no corpo material viscoelástico e do instante de tempo t .

Vale destacar que a matriz dos módulos viscoelásticos de relaxação ocorre sendo o núcleo da integral de convolução no tempo, que compreende as funções que descrevem o comportamento mecânico de um material viscoelástico na sua dependência em relação aos domínios do tempo ou da frequência. Para um material viscoelástico isotrópico, adotando a hipótese da razão de Poisson ser independente do tempo e da frequência (RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2017; RAJABI; HOSSEINI-HASHEMI, 2018; VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010), a matriz $\boldsymbol{\mathcal{K}}^*$ tem a seguinte representação

$$\boldsymbol{\mathcal{K}}^*(\mathbf{x}, t) = \begin{bmatrix} \frac{E^*(\mathbf{x}, t)}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)\nu}{1 - \nu^2} & \frac{E^*(\mathbf{x}, t)}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G^*(\mathbf{x}, t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & G^*(\mathbf{x}, t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G^*(\mathbf{x}, t) \end{bmatrix} \quad (13)$$

onde os parâmetros E^* , ν e G^* são o módulo viscoelástico de relaxação extensional, a razão de Poisson e o módulo viscoelástico de relaxação ao cisalhamento do material. Adicional-

mente, conforme abordado por Vasques, Moreira e Rodrigues (2010), uma possibilidade de modelagem é assumir que os módulos viscoelásticos extensionais e de cisalhamento estão relacionados pela razão de Poisson, Equação (14).

$$G^*(\mathbf{x}, t) = \frac{E^*(\mathbf{x}, t)}{2(1 + \nu)} \quad (14)$$

Portanto, para o caso particular de um material viscoelástico e isotrópico, adotando a hipótese da razão de Poisson ser independente do tempo e da frequência e relacionado os módulos viscoelásticos extensionais e de cisalhamento pela razão de Poisson, a Equação (10) pode ser reescrita na forma

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t E^*(\mathbf{x}, t - t') \bar{\mathcal{K}}^* \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t')}{\partial t'} dt' \quad (15)$$

onde o comportamento viscoelástico é descrito unicamente por um módulo viscoelástico escalar de relaxação extensional E^* . A matriz $\bar{\mathcal{K}}^*$ é, neste caso, obtida da normalização da matriz de módulos viscoelásticos de relaxação \mathcal{K}^* em relação ao módulo escalar de relaxação viscoelástica extensional E^* , combinando a Equação (14) em (13). Dessa forma, tem-se

$$\bar{\mathcal{K}}^* = \begin{bmatrix} \frac{1}{1 - \nu^2} & \frac{\nu}{1 - \nu^2} & \frac{\nu}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1 - \nu^2} & \frac{1}{1 - \nu^2} & \frac{\nu}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu}{1 - \nu^2} & \frac{\nu}{1 - \nu^2} & \frac{1}{1 - \nu^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1 + \nu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1 + \nu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2(1 + \nu)} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Na literatura especializada, diferentes modelos viscoelásticos escalares definem, de diferentes formas, o módulo viscoelástico de relaxação (VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010). Ademais, nesse trabalho, a relação constitutiva viscoelástica utilizada ocorre com a introdução de variáveis internas de dissipação (CASTELLO, 2004). Na Subseção 1.2.1 é apresentado o módulo viscoelástico de relaxação escolhido e, na Subseção 1.2.2, a respectiva relação constitutiva viscoelástica não-local com a inclusão de variáveis internas de dissipação.

1.2.1 Modelo viscoelástico de relaxação: Parâmetros e Propriedades

No presente trabalho, o módulo de relaxação escalar é dado por

$$E^*(\mathbf{x}, t) = E_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) e^{-\Omega_i(\mathbf{x})t} \right] = E_\infty(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{NI} E_i(\mathbf{x}) e^{-\Omega_i(\mathbf{x})t} \quad (17)$$

onde $E_\infty(\mathbf{x})$ é o módulo de relaxação de baixa frequência ou de longo tempo, NI é a quantidade de variáveis internas que descrevem os mecanismos de dissipação viscoelástica no sistema, os parâmetros $\Delta_i(\mathbf{x})$ são as constantes proporcionais de magnitude da relaxação viscoelástica e $\Omega_i(\mathbf{x})$ são os inversos das i -ésimas constantes de tempo $\tau_i(\mathbf{x})$ do decaimento exponencial da relaxação viscoelástica, dados, respectivamente, conforme as Equações (18) e (19). Deve ser observado que todos os parâmetros do modelo viscoelástico de relaxação adotado são definidos em função do ponto \mathbf{x} do corpo material viscoelástico, assumindo, de forma generalizada, a hipótese das propriedades viscoelásticas possuírem variabilidade espacial.

$$\Delta_i(\mathbf{x}) = \frac{E_i(\mathbf{x})}{E_\infty(\mathbf{x})} \quad (18)$$

$$\Omega_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\tau_i(\mathbf{x})} \quad (19)$$

A função de relaxação exponencial adotada, com os parâmetros viscoelásticos do modelo definidos para um ponto \mathbf{x} do corpo material viscoelástico, pode ser vista como uma representação do modelo análogo mecânico de Maxwell, podendo também ser considerado como um caso particular do modelo de Biot (1954) ou, ainda, como similar ao módulo de relaxação do modelo ADF (LESIEUTRE; MINGORI, 1990; LESIEUTRE; BIANCHINI, 1995; LESIEUTRE; LEE, 1996), considerando as observações de Castello (2004) e Vasques, Moreira e Rodrigues (2010). Pode-se ainda considerar similaridades à função de relaxação pelo modelo GHM, uma vez que este é concebido a partir de duas funções exponenciais de decaimento também similares à função de relaxação pelo modelo de Biot (GOLLA; HUGHES, 1985; MCTAVISH; HUGHES, 1992; MCTAVISH; HUGHES, 1993; VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010).

A partir da Equação (17), a relação constitutiva viscoelástica expressa na Equação (15) é reescrita conforme apresentado na Equação (20).

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) \left[\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \int_{-\infty}^t e^{-\Omega_i(\mathbf{x})(t-t')} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t')}{\partial t'} dt' \right] \quad (20)$$

onde $\mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) = E_\infty(\mathbf{x}) \bar{\mathcal{K}}^*$ é a matrix módulo de relaxação de baixa frequência.

Algumas propriedades do modelo devem ser observadas. Tal como similarmente abordado por Vasques, Moreira e Rodrigues (2010), E_∞ é a componente do módulo viscoelástico relacionada a uma parcela elástica do comportamento do material, enquanto que $\sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x})e^{-\Omega_i(\mathbf{x})t}$ à parcela relacionada ao comportamento dissipativo viscoelástico, sendo também referenciado como a função de relaxação desse modelo viscoelástico (VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010).

No domínio do tempo, com condições iniciais nulas de tensão e deformação, a partir da aplicação de uma deformação constante e considerando o instante de tempo $t = 0$, a tensão interna desenvolvida no material viscoelástico é descrita por

$$\lim_{t \rightarrow 0} E^*(\mathbf{x}, t) = E_0(\mathbf{x}) = E_\infty(\mathbf{x}) \left(1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \right) \quad (21)$$

onde E_0 é o módulo de relaxação inicial, também referenciado como *unrelaxed modulus* (CASTELLO, 2004). Por outro lado, no limite quando $t \rightarrow \infty$, tem-se $\lim_{t \rightarrow \infty} E^*(\mathbf{x}, t) = E_\infty(\mathbf{x})$. O tempo de decaimento da função está associado aos inversos das constantes de tempo da exponencial, $\Omega_i(\mathbf{x})$. Quanto maiores as magnitudes dos parâmetros $\Omega_i(\mathbf{x})$, o decaimento exponencial é estabelecido em um intervalo de tempo menor.

Propriedades viscoelásticas importantes podem ser ainda explicitadas a partir da transformada de Laplace e da obtenção do módulo complexo local a partir do modelo viscoelástico de relaxação adotado. Assumindo condições nulas de tensão e deformação para todo o instante de tempo $t \leq 0$, executando a transformada de Laplace da Equação (20), obtém-se

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \tilde{\sigma}^*(\mathbf{x}, s) = \mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{s}{s + \Omega_i(\mathbf{x})} \right) \right] \tilde{\epsilon}(\mathbf{x}, s) \quad (22)$$

onde a notação (\bullet) é a indicação de que trata-se da transformada de Laplace da função temporal em questão. Considerando a Equação (22), substituindo a variável de Laplace por $s = j\omega$, onde ω é uma frequência angular de uma excitação harmônica, com $j = \sqrt{-1}$; a relação constitutiva dada pela Equação (20), no domínio da frequência, é representada pela Equação (23). Por fim, o módulo complexo viscoelástico local $\tilde{E}(\mathbf{x}, j\omega)$ pode ser definido destacando-se algebricamente as partes real e imaginária, conforme apresentado na Equação (24).

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \tilde{\sigma}(\mathbf{x}, j\omega) = \mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{j\omega}{\Omega_i(\mathbf{x}) + j\omega} \right) \right] \tilde{\epsilon}(\mathbf{x}, j\omega) \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}(\mathbf{x}, j\omega) = E_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{j\omega}{\Omega_i(\mathbf{x}) + j\omega} \right) \right] = \\ E_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} + j \frac{\omega \Omega_i(\mathbf{x})}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Nota-se que a resposta mecânico-dinâmica do material é condicionada à frequência imposta, de forma que $\lim_{\omega \rightarrow 0} E^*(\mathbf{x}, j\omega) = E_\infty(\mathbf{x})$ e $\lim_{\omega \rightarrow \infty} E^*(\mathbf{x}, j\omega) = E_0(\mathbf{x})$. Portanto, os parâmetros E_∞ e E_0 são comumente referenciados como os módulos de baixa e alta frequência, respectivamente (CASTELLO, 2004; VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010).

Por fim, o módulo complexo viscoelástico local pode ainda ser representado na forma (CASTELLO, 2004)

$$\tilde{E}(\mathbf{x}, j\omega) = E'(\mathbf{x}, \omega) + jE''(\mathbf{x}, \omega) = E'(\mathbf{x}, \omega) (1 + j\eta(\mathbf{x}, \omega)) \quad (25)$$

onde E' e E'' são as partes real e imaginária do módulo complexo local, \tilde{E}^* , também denominados como módulos de armazenamento e dissipação, respectivamente, e $\eta(\omega)$ é o fator de perda do material, aqui adotado como a razão entre as partes imaginária e real do módulo complexo local, sendo dado por

$$\eta(\mathbf{x}, \omega) = \frac{E''(\mathbf{x}, \omega)}{E'(\mathbf{x}, \omega)} \quad (26)$$

Pelas definições dos módulos de armazenamento e dissipação locais e do fator de perda a partir das Equações (25) e (26), respectivamente, considerando a Equação (24), conforme similarmente apresentado por Castello (2004), tem-se

$$E'(\mathbf{x}, \omega) = E_\infty(\mathbf{x}) \left[1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} \right) \right] \quad (27)$$

$$E''(\mathbf{x}, \omega) = E_\infty(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{\omega \Omega_i(\mathbf{x})}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} \right) \quad (28)$$

$$\eta(\mathbf{x}, \omega) = \frac{\sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{\omega \Omega_i(\mathbf{x})}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} \right)}{1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 + \Omega_i(\mathbf{x})^2} \right)} \quad (29)$$

Percebe-se a relação direta dos módulos de armazenamento E' e dissipação E'' com os parâmetros viscoelásticos E_∞ , Δ_i e Ω_i . Ademais, verifica-se que o fator de perda η é dependente dos parâmetros viscoelásticos Δ_i e Ω_i (CASTELLO, 2004).

1.2.2 Relação constitutiva viscoelástica não-local com variáveis internas dissipação

A Equação (20) pode ser redefinida de acordo com o conceito de variáveis internas (CASTELLO, 2004). A metodologia é conveniente em termos da tratabilidade matemática da integral de convolução no domínio do tempo, da descrição do comportamento viscoelástico. O modelo viscoelástico com a inclusão de variáveis internas de dissipação é obtido satisfazendo a desigualdade de Clausius-Duhem (LEMAITRE; CHABOCHE, 1994), atendendo as restrições impostas pela termodinâmica dos processos irreversíveis (CASTELLO, 2004). A forma diferencial no domínio do tempo para a relação constitutiva viscoelástica não-local, com a inclusão de variáveis internas, é dada por

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) - \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{E}_i(\mathbf{x}) \boldsymbol{\xi}_i(\mathbf{x}, t) \quad (30)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\xi}_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Omega_i(\mathbf{x}) [\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\xi}_i(\mathbf{x}, t)] \quad i = 1, \dots, NI$$

onde $\boldsymbol{\xi}_i$ representa a i -ésima variável interna, a segunda equação em (30) é a equação de evolução respectiva à i -ésima variável interna, \mathbf{E}_0 é a matriz módulo de relaxação de alta frequência e \mathbf{E}_i são as i -ésimas matrizes de magnitude de relaxação, dadas respectivamente por

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{x}) = \left(1 + \sum_{i=1}^{NI} \Delta_i(\mathbf{x}) \right) \mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) \quad (31)$$

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{x}) = \Delta_i(\mathbf{x}) \mathbf{E}_\infty(\mathbf{x}) \quad (32)$$

Por fim, destaca-se que as i -ésimas variáveis internas podem ser definidas no domínio de Laplace em função das deformações no material viscoelástico por (CASTELLO, 2004; VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010)

$$\tilde{\boldsymbol{\xi}}_i(\mathbf{x}, s) = \left(\frac{\Omega_i(\mathbf{x})}{s + \Omega_i(\mathbf{x})} \right) \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{x}, s) \quad (33)$$

Em termos das dependências no tempo e na frequência, o modelo de variáveis internas aqui apresentado é similar ao modelo ADF (VASQUES; MOREIRA; RODRIGUES, 2010; ROULEAU; DEÜ, 2016) e ao modelo GHM-1 ou GHM de primeira ordem (MC-TAVISH; HUGHES, 1992). A abordagem por variáveis internas tem sido utilizada por Castello et al. (2008) e Borges et al. (2015) na literatura sobre viscoelasticidade. Ademais, o modelo viscoelástico em questão foi apresentado considerando a Teoria da Elasticidade Não-Local de Eringen (1983) em trabalhos anteriores por parte do autor, incluindo a dissertação de mestrado (FARIA, 2017) e o artigo em parceria com os orientadores (FARIA;

STUTZ; CASTELLO, 2020), sendo abordado nessa tese com a hipótese adicional das propriedades viscoelásticas possuírem variabilidade espacial.

1.3 Princípio de Hamilton

Nesta tese são considerados modelos não-locais de viga de Euler-Bernoulli e de placa de Kirchhoff na representação do comportamento dinâmico de nanovigas e nanoplacas em vibração transversal. As equações de movimento desses sistemas, neste texto, são obtidas pelo princípio generalizado de Hamilton (PETYT, 2010), dado por

$$\int_{t_1}^{t_2} (\delta U - \delta T + \delta W_{nc}) dt = 0 \quad (34)$$

onde T e U representam, respectivamente, as energias cinética e potencial e δW_{nc} ao trabalho virtual associado às ações de forças não-conservativas. Na notação adotada, o símbolo δ representa o operador variacional (REDDY, 1993). Os termos variacionais podem ser expressos por

$$\delta U = \int_V \boldsymbol{\sigma}^T \delta \boldsymbol{\varepsilon} dv \quad (35)$$

$$\delta T = \int_V \rho (\dot{u} \delta \dot{u} + \dot{v} \delta \dot{v} + \dot{w} \delta \dot{w}) dv \quad (36)$$

$$\delta W_{nc} = \int_S \left[\left(C_u'' \frac{\partial u}{\partial t} - f_u'' \right) \delta u + \left(C_v'' \frac{\partial v}{\partial t} - f_v'' \right) \delta v + \left(C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} - f_w'' \right) \delta w \right] dS \quad (37)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$ foram definidos nas Equações (11) e (12), respectivamente, e, nas direções das coordenadas x , y e z , têm-se, respectivamente, que u , v e w são as componentes do campo de deslocamentos, C_u'' , C_v'' e C_w'' são as constantes de amortecimento viscoso por unidade de área e proporcionais à velocidade e f_u'' , f_v'' e f_w'' são as componentes do vetor de carregamentos por unidade de área.

1.4 Modelo não-local viscoelástico: Viga de Euler-Bernoulli

Essa seção se destina à modelagem matemática de uma viga de Euler-Bernoulli, considerando a Teoria da Elasticidade Não-Local de Eringen (1983) e a existência de amortecimentos viscoelástico e viscoso. Na Subseção 1.4.1 é abordada a relação constitutiva viscoelástica não-local apresentada na Equação (30) para o particular caso de uma viga de Euler-Bernoulli. Na Subseção 1.4.2 é apresentado o desenvolvimento da equação

de movimento para uma viga viscoelástica não-local de Euler-Bernoulli pela aplicação do princípio de Hamilton, considerando as ações de força transversal e de amortecimento do tipo viscoso distribuídos na viga. Por último, na Subseção 1.4.3, a partir da equação de movimento obtida, é desenvolvido o modelo de elementos finitos empregando-se a técnica de Galerkin (REDDY, 1993; RAO, 2010; PHADIKAR; PRADHAN, 2010).

1.4.1 Relação constitutiva: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica

Para um estado uniaxial de tensões, segundo o particular caso do modelo de viga de Euler-Bernoulli (REDDY, 2007; WANG; WANG, 2007; KARLIČIĆ et al., 2016), adotando que a coordenadas espaciais x , y e z são definidas ao longo do comprimento, largura e espessura da viga, tem-se σ_{xx} e ε_{xx} como as únicas tensões e deformações não-nulas. A relação constitutiva não-local elástica para o modelo de viga de Euler-Bernoulli é expressa por

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \sigma_{xx}^*(x, z, t) = E_0(x) \varepsilon_{xx}(x, z, t) - \sum_{i=1}^{NI} E_i(x) \xi_i(x, z, t) \quad (38)$$

$$\frac{\partial \xi_i(x, z, t)}{\partial t} = \Omega_i(x) [\varepsilon_{xx}(x, z, t) - \xi_i(x, z, t)] \quad i = 1, \dots, NI$$

onde as variáveis de campo são definidas em função das coordenadas espaciais x e z e do instante de tempo t , tal que σ_{xx}^* e ε_{xx} são a tensão viscoelástica e a deformação definidas na direção axial da viga e ξ_i é a i -ésima variável interna. Para o modelo de viga de Euler-Bernoulli, os parâmetros viscoelásticos foram adotados como funções da coordenada espacial x da viga.

1.4.2 Equação de movimento: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica

De acordo com o modelo de viga de Euler-Bernoulli, conforme Eltaher, Alshorbagy e Mahmoud (2013), adota-se que os deslocamentos não nulos u e w são relacionados por

$$u(x, z, t) = -z \frac{\partial w(x, t)}{\partial x} \quad (39)$$

onde $w(x, t)$ é a deflexão transversal no plano médio da viga em função da coordenada espacial longitudinal x e do instante de tempo t .

A deformação longitudinal $\varepsilon_{xx}(x, z, t)$ é definida como (ELTAHER; ALSHOR-

BAGY; MAHMOUD, 2013)

$$\varepsilon_{xx}(x, z, t) = \frac{\partial u(x, z, t)}{\partial x} = -z \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} \quad (40)$$

Para as variáveis internas $\xi_i(x, z, t)$, pela Equação (33), pode-se considerar as mesmas propriedades cinemáticas do modelo viga de Euler-Bernoulli, impostas à deformação física pela Equação 40, podendo-se definir, conforme adotado em (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020), um campo de deslocamento interno auxiliar $\bar{w}_i(x, t)$ por

$$\xi_i(x, z, t) = -z \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \quad (41)$$

Considera-se o momento $M(x, t)$ e a força cortante $V(x, t)$ resultantes na seção transversal de uma viga de Euler-Bernoulli, em um ponto x e num instante de tempo t , respectivamente, por

$$M(x, t) = \int_A \sigma_{xx}(x, z, t) z dA \quad (42)$$

$$V(x, t) = \frac{\partial M(x, t)}{\partial x} \quad (43)$$

onde A é a área de seção transversal da viga (INMAN, 2014).

Considerando $dv = dA dx$, as funções variacionais das energias potencial e cinética são dadas por

$$\delta U = - \int_0^L M(x, t) \frac{\partial^2 \delta w(x, t)}{\partial x^2} dx \quad (44)$$

$$\delta T = \int_0^L \rho A \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} \frac{\partial \delta w(x, t)}{\partial t} dx \quad (45)$$

Assumindo que as forças não conservativas possuem componentes apenas na direção transversal z da viga e são distribuídas apenas em relação à coordenada x do comprimento da viga, tem-se

$$\delta W_{nc} = \int \left(C'_w \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} - f'_w(x, t) \right) \delta w(x, t) dx \quad (46)$$

onde C'_w é a constante de amortecimento viscoso por unidade de comprimento e proporcional à velocidade e f'_w é o carregamento transversal distribuído por unidade de comprimento.

Substituindo as Equações (44), (45) e (46) na expressão para o princípio de Hamilton, Equação (34), omitindo os termos relacionados às condições de contorno, tem-se

a equação governante para vigas de Euler-Bernoulli apresentada na Equação (47).

$$\frac{\partial^2 M(x, t)}{\partial x^2} = \rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} + C'_w \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} - f'_w(x, t) \quad (47)$$

Substituindo as relações cinemáticas, Equações (40) and (41), na equação constitutiva não-local viscoelástica para vigas de Euler-Bernoulli, Equação (38), e integrando de acordo com a Equação (42), o momento fletor resultante não-local é dado por

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) M(x, t) = -E_0(x) I \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + \sum_{i=1}^{NI} E_i(x) I \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \quad (48)$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, t)}{\partial t \partial x^2} = \Omega_i(x) \left[\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \right], \quad i = 1, \dots, NI$$

onde a segunda equação em (48) é a equação da evolução temporal dos i -ésimos campos de deslocamentos internos auxiliares $\bar{w}_i(x, t)$ e I é o segundo momento de inércia.

Combinando as Equações (47) e (48), o momento e a força cortante resultantes não-locais são obtidos conforme, respectivamente, apresentado nas Equações (49) e (50).

$$M(x, t) = -E_0(x) I \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + \sum_{i=1}^{NI} E_i(x) I \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} + (e_0 a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} + C'_w \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} - f'_w(x, t) \right] \quad (49)$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, t)}{\partial t \partial x^2} = \Omega_i(x) \left[\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \right], \quad i = 1, \dots, NI$$

$$V(x, t) = \frac{\partial M(x, t)}{\partial x} \quad (50)$$

Por fim, considerando as Equações (47) e (48), as equações diferenciais que governam a dinâmica de uma viga viscoelástica não-local são estabelecidas por

$$\left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \left[\rho A \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial t^2} + C'_w \frac{\partial w(x, t)}{\partial t} - f'_w(x, t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[E_0(x) I \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} \right] - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sum_{i=1}^{NI} E_i(x) I \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \right) \right] = 0 \quad (51)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^4 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^4} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \Omega_i(x) \left[\frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, t)}{\partial x^2} \right] \right\}, \quad i = 1, \dots, NI$$

Em relação à Equação (51), destaca-se que esta é uma equação de movimento generalizada ao se considerar não-localidade, viscoelasticidade e amortecimento viscoso. O

modelo elástico não-local, por exemplo, pode ser recuperado anulando as i -ésimas amplitudes de relaxação E_i e substituindo o módulo viscoelástico de alta frequência E_0 pelo módulo de elasticidade E para uma viga elástica. Além disso, o amortecimento externo pode ser anulado, $C'_w = 0$, bem como um modelo local clássico elástico ou viscoelástico de Euler-Bernoulli podem ser obtidos considerando $e_0 a = 0$. Cabe mencionar que, em relação às i -ésimas variáveis internas, essas ocorreram, a partir de uma escolha *ad-hoc*, como derivadas a quarta de deslocamentos internos \bar{w}_i , que foram introduzidos na Equação (41). Portanto, as i -ésimas equações de evolução das variáveis internas em (51) são apresentadas derivadas duas vezes em relação à coordenada espacial x .

1.4.3 Modelo de elementos finitos: Viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica

Nesta seção é apresentado o desenvolvimento do modelo de elementos finitos (MEF) para vigas considerando a Teoria da Elasticidade Não-Local e a modelagem de amortecimentos do tipo viscoso e viscoelástico. O processo de obtenção do MEF é similar ao adotado por Phadikar e Pradhan (2010) para vigas não-locais elásticas e ao apresentado no livro sobre o Método dos Elementos Finitos de Reddy (1993) para vigas locais de Euler-Bernoulli, sendo aplicada a técnica de Galerkin (RAO, 2010). Na metodologia adotada, uma formulação fraca elementar é obtida a partir de uma integral de resíduos ponderados e, para a aproximação dos campos de deslocamentos internos aos domínios dos elementos finitos, são adotados polinômios de interpolação de Hermite apropriados ao modelo de viga de Euler-Bernoulli (REDDY, 1993). Conforme segue, apresenta-se o processo de discretização espacial da viga e a obtenção da equação de movimento elementar do MEF para a viga de Euler-Bernoulli não-local viscoelástica.

O sistema é discretizado em um número N de elementos finitos de comprimento $l_e = L/N$, onde L é o comprimento total da viga, havendo $N+1$ nós na malha de elementos finitos. O domínio Ω_e de um e -ésimo elemento finito é dado por $\Omega_e \in [x_e, x_{e+1}]$, sendo x_e e x_{e+1} as localizações nodais do e -ésimo elemento finito, de acordo com a coordenada espacial global $x \in [0; L]$ (REDDY, 1993; PHADIKAR; PRADHAN, 2010). Com esta configuração, tem-se $l_e = x_{e+1} - x_e$ e a coordenada local elementar $\bar{x} \in [0; l_e]$, definida por $\bar{x} = x - x_e$. São considerados dois nós por elemento finito, cada um possuindo dois graus de liberdade, o deslocamento $w(x, t)$ e a rotação $\frac{\partial w(x, t)}{\partial x}$, que são as variáveis primárias do sistema (REDDY, 1993).

Da Equação (51), a integral de resíduos ponderados é estabelecida ao nível elemen-

tar, considerando um e -ésimo elemento finito Ω_e do sistema, por

$$\int_0^{l_e} \left\{ \left(1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \right) \left[\rho A \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial t^2} + C'_w \frac{\partial w(\bar{x}, t)}{\partial t} - f'_w(\bar{x} + x_e, t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left[E_0(\bar{x} + x_e) I \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} - \sum_{i=1}^{NI} E_i(\bar{x} + x_e) I \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \right\} \chi(\bar{x}, t) = 0 \quad (52)$$

$$\int_0^{l_e} \left[\frac{\partial^5 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial t \partial \bar{x}^4} - \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left\{ \Omega_i(\bar{x} + x_e) \left[\frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} \right] \right\} \right] \chi(\bar{x}) d\bar{x} = 0$$

onde $\chi(x)$ é a função de ponderação do resíduo (REDDY, 1993). Procedendo integrações por partes, a formulação fraca é obtida.

$$\begin{aligned} & \int_0^{l_e} \left\{ \rho A \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial t^2} \chi(\bar{x}) + C'_w \frac{\partial w(\bar{x}, t)}{\partial t} \chi(\bar{x}) - f'_w(\bar{x} + x_e, t) \chi(\bar{x}) + \right. \\ & \quad \left. + (e_0 a)^2 \left(\rho A \frac{\partial^3 w(\bar{x}, t)}{\partial t^2 \partial \bar{x}} \frac{\partial \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + C'_w \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial t \partial \bar{x}} \frac{\partial \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + f'_w(\bar{x} + x_e, t) \frac{\partial^2 \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2} \right) + \right. \\ & \quad \left. + \left[E_0(\bar{x} + x_e) I \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} - \sum_{i=1}^{NI} E_i(\bar{x} + x_e) I \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2} \right\} d\bar{x} + \\ & \quad + \left[-\chi(\bar{x}) V(\bar{x}, t) + \frac{\partial \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \left(M(\bar{x}, t) - (e_0 a)^2 \left[\rho A \frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial t^2} + C'_w \frac{\partial w(\bar{x}, t)}{\partial t} \right] \right) \right]_0^{l_e} = 0 \end{aligned} \quad (53)$$

$$\int_0^{l_e} \left\{ \frac{\partial^3 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial t \partial \bar{x}^2} - \Omega_i(\bar{x} + x_e) \left[\frac{\partial^2 w(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_i(\bar{x}, t)}{\partial \bar{x}^2} \right] \right\} \frac{\partial^2 \chi(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2} = 0, \quad i = 1, \dots, NI$$

A partir da formulação fraca, Equação (53), podem ser obtidas as matrizes elementares de massa, rigidez e amortecimento, \mathbf{M}_e , \mathbf{K}_e e \mathbf{D}_e , respectivamente, e um vetor elementar de carregamentos generalizados, \mathbf{P}_e , conforme segue. Considerando a coordenada elementar \bar{x} , a deflexão transversal $w(\bar{x}, t)$, os i -ésimos campos de deslocamentos internos auxiliares $\bar{w}_i(\bar{x}, t)$ e a função de ponderação do resíduo $\chi(\bar{x})$ são interpolados para o interior de um elemento finito, respectivamente, por

$$w(\bar{x}, t) = \mathbf{N}^T(\bar{x}) \mathbf{q}_e(t) \quad (54)$$

$$\bar{w}_i(\bar{x}, t) = \mathbf{N}^T(\bar{x}) \bar{\mathbf{q}}_{ei}(t) \quad (55)$$

$$\chi(\bar{x}) = \mathbf{N}(\bar{x}) \quad (56)$$

onde $\mathbf{N}(\bar{x})$ é o vetor contendo as funções de interpolação de Hermite (REDDY, 1993)

apropriadas ao modelo de viga de Euler-Bernoulli, $\mathbf{q}_e(t)$ é vetor elementar de deslocamentos nodais generalizados e $\bar{\mathbf{q}}_{ei}(t)$ é o i -ésimo vetor de deslocamentos internos auxiliares, dados, respectivamente, por

$$\mathbf{N}(\bar{x}) = \left[\left(\frac{2\bar{x}^3}{l_e^3} - \frac{3\bar{x}^2}{l_e^2} + 1 \right), \left(\frac{\bar{x}^3}{l_e^2} - \frac{2\bar{x}^2}{l_e} + \bar{x} \right), \left(\frac{3\bar{x}^2}{l_e^2} - \frac{2\bar{x}^3}{l_e^3} \right), \left(\frac{\bar{x}^3}{l_e^2} - \frac{\bar{x}^2}{l_e} \right) \right]^T \quad (57)$$

$$\mathbf{q}_e = [q_{e1} \quad q_{e2} \quad q_{e3} \quad q_{e4}]^T \quad (58)$$

$$\bar{\mathbf{q}}_{ei} = [\bar{q}_{ei1} \quad \bar{q}_{ei2} \quad \bar{q}_{ei3} \quad \bar{q}_{ei4}]^T \quad (59)$$

onde, nos componentes dos vetores \mathbf{q}_e e $\bar{\mathbf{q}}_{ei}$ de deslocamentos generalizados, os subscritos $(\bullet)_1$ e $(\bullet)_2$ indicam que os graus de liberdade são a deflexão e a rotação no nó terminal localizado em x_e e $(\bullet)_3$ e $(\bullet)_4$, os respectivos no nó terminal em x_{e+1} .

Após a substituição das Equações (21), (54), (55) e (56) na formulação fraca, Equação (53), o modelo de elementos finitos elementar para a viga viscoelástica não-local é determinado com a seguinte equação de movimento.

$$\mathbf{M}_e \ddot{\mathbf{q}}_e(t) + \mathbf{D}_e \dot{\mathbf{q}}_e(t) + \left(\mathbf{K}_\infty^e + \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{K}_i^e \right) \mathbf{q}_e(t) - \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{K}_i^e \bar{\mathbf{q}}_{ei}(t) = \mathbf{P}_e(t) \quad (60)$$

$$\bar{\mathbf{K}}_e \dot{\bar{\mathbf{q}}}_{ei}(t) + \mathbf{K}_{\Omega_i}^e \bar{\mathbf{q}}_{ei}(t) - \mathbf{K}_{\Omega_i}^e \mathbf{q}_e(t) = \mathbf{0}, \quad i = 1, 2, \dots, NI$$

onde \mathbf{M}_e e \mathbf{D}_e são, respectivamente, as matrizes elementares de massa e amortecimento, \mathbf{K}_∞^e é a matriz de rigidez de baixa frequência, \mathbf{K}_i^e e $\mathbf{K}_{\Omega_i}^e$ são, respectivamente, as i -ésimas matrizes associadas aos parâmetros viscoelásticos E_i e Ω_i de uma i -ésima variável interna, $\bar{\mathbf{K}}^e$ é a matriz de rigidez normalizada, obtida da integração das funções de forma, e \mathbf{P}_e é o vetor contendo os carregamentos generalizados. As matrizes e vetores elementares são apresentados como segue.

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e = \rho A \int_0^{l_e} \mathbf{N}(\bar{x}) \mathbf{N}^T(\bar{x}) d\bar{x} + \\ + (e_0 a)^2 \rho A \int_0^{l_e} \frac{d\mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}} \frac{d\mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}} d\bar{x} - \left[(e_0 a)^2 \rho A \frac{d\mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}} \mathbf{N}^T(\bar{x}) \right]_0^{l_e} \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_e = C'_w \int_0^{l_e} \mathbf{N}(\bar{x}) \mathbf{N}^T(\bar{x}) d\bar{x} + \\ + (e_0 a)^2 C'_w \int_0^{l_e} \frac{d\mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}} \frac{d\mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}} d\bar{x} - \left[(e_0 a)^2 C'_w \frac{d\mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}} \mathbf{N}^T(\bar{x}) \right]_0^{l_e} \end{aligned} \quad (62)$$

$$\mathbf{K}_\infty^e = \int_0^{l_e} E_\infty(\bar{x} + x_e) I \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (63)$$

$$\mathbf{K}_i^e = \int_0^{l_e} E_i(\bar{x} + x_e) I \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (64)$$

$$\mathbf{K}_{\Omega_i}^e = \int_0^{l_e} \Omega_i(\bar{x} + x_e) \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (65)$$

$$\bar{\mathbf{K}}_e = \int_0^{l_e} \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_e(t) = \int_0^{l_e} \left(\mathbf{N}(\bar{x}) - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{\partial \bar{x}^2} \right) f'_w(\bar{x} + x_e, t) d\bar{x} + \\ + (e_0 a)^2 \left[-\frac{\partial f'_w(\bar{x} + x_e, t)}{\partial \bar{x}} \mathbf{N}(\bar{x}) + f'_w(\bar{x} + x_e, t) \frac{\partial \mathbf{N}(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \right]_0^{l_e} + \begin{bmatrix} -V_e^L \\ M_e^L \\ V_{e+1}^L \\ -M_{e+1}^L \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (67)$$

onde V_e^L e M_e^L são as condições de contorno, forças cortantes e momentos fletores locais ($e_0 a = 0$) definidos na localização nodal x_e , enquanto que V_{e+1}^L e M_{e+1}^L são os respectivos no nó em x_{e+1} . Conforme as definições dadas por Reddy (1993), a especificação do momento resultante e da força cortante nos contornos são as chamadas condições de contorno naturais do problema, enquanto que a especificação da deflexão, w , e da rotação, $\frac{\partial w}{\partial x}$, nos contornos são as condições de contorno ditas essenciais.

Uma vez definidas as matrizes e os vetores elementares para o modelo não-local viscoelástico de viga de Euler-Bernoulli, as matrizes e vetores globais podem ser obtidos pelas técnicas de montagem clássicas na literatura do Método dos Elementos Finitos (REDDY, 1993; RAO, 2010).

1.5 Modelo não-local viscoelástico: Placa de Kirchhoff

Nesta seção, há a apresentação e o desenvolvimento do modelo não-local viscoelástico de placa de Kirchhoff, com a modelagem de ações de carregamento transversal e amortecimento viscoso distribuídos ao longo do plano da placa. A abordagem nesta seção é organizada de forma similar ao que foi realizado para viga de Euler-Bernoulli na Seção 1.4. Na Subseção 1.5.1 é abordada a relação constitutiva viscoelástica não-local particularizada para o caso de uma placa de Kirchhoff, na Subseção 1.5.2 é apresentado o desenvolvimento da equação de movimento pela aplicação do princípio de Hamilton e, na Subseção 1.5.3, o modelo de elementos finitos empregando-se a técnica de Galerkin (REDDY, 1993; RAO, 2010; PHADIKAR; PRADHAN, 2010).

1.5.1 Relação constitutiva não-local viscoelástica: Placa de Kirchhoff

Para a placa, adota-se que as coordenadas espaciais x e y são definidas no plano e z ao longo de sua espessura. Pela teoria de placa de Kirchhoff (REDDY, 1993), as deformações ε_{zz} , γ_{xz} e γ_{yz} são assumidas como campos nulos (REDDY, 1993). Portanto, os vetores $\boldsymbol{\sigma}^*$ e $\boldsymbol{\varepsilon}$ de tensões e deformações são, respectivamente, definidos por

$$\boldsymbol{\sigma}^*(x, y, z, t) = [\sigma_{xx} \quad \sigma_{yy} \quad \sigma_{xy}]^T(x, y, z, t) \quad (68)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x, y, z, t) = [\varepsilon_{xx} \quad \varepsilon_{yy} \quad \gamma_{xy}]^T(x, y, z, t) \quad (69)$$

Em relação à equação constitutiva viscoelástica não-local generalizada, Equação (30), na aplicação ao modelo de placa de Kirchhoff, pode-se reescrevê-la com algumas poucas alterações conforme segue.

$$\left[1 - (e_0 a)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \boldsymbol{\sigma}^* = \mathbf{E}_0(x, y) \boldsymbol{\varepsilon}(x, y, z, t) - \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{E}_i(x, y) \tilde{\boldsymbol{\xi}}_i(x, y, z, t) \quad (70)$$

$$\frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\xi}}_i(x, y, z, t)}{\partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\boldsymbol{\varepsilon}(x, y, z, t) - \tilde{\boldsymbol{\xi}}_i(x, y, z, t) \right]$$

onde as matrizes viscoelásticas são definidas de acordo com as coordenadas espaciais x e y por

$$\mathbf{E}_\infty(x, y) = E_\infty(x, y) \bar{\mathcal{K}}^* \quad (71)$$

$$\mathbf{E}_i(x, y) = E_i(x, y) \bar{\mathcal{K}}^* \quad (72)$$

$$\mathbf{E}_0(x, y) = E_0(x, y)\bar{\mathcal{K}}^* \quad (73)$$

onde a matriz normalizada $\bar{\mathcal{K}}^*$ é, neste caso, dada por

$$\bar{\mathcal{K}}^* = \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \frac{1}{1-\nu^2} & \frac{\nu}{1-\nu^2} & 0 \\ \frac{\nu}{1-\nu^2} & \frac{1}{1-\nu^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2(1+\nu)} \end{bmatrix} \quad (74)$$

1.5.2 Equação de movimento: Placa de Kirchhoff não-local viscoelástica

Considera-se uma placa retangular de comprimento L_x , largura L_y e espessura h , definidos ao longo os eixos coordenados x , y e z , respectivamente. De acordo com o modelo de placa de Kirchhoff, conforme similarmente apresentado por Petyt (2010), pela hipótese de pequenas deformações e considerando apenas deflexão transversal na placa, os deslocamentos não nulos são definidos por

$$u(x, y, z, t) = -z \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial x} \quad (75)$$

$$v(x, y, z, t) = -z \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial y} \quad (76)$$

onde $w(x, y, t)$ é a deflexão transversal do plano médio da placa em função das coordenadas espaciais x e y e do instante de tempo t .

Os campos de deformações para uma placa de Kirchhoff são apresentados na Equação (77) (PETYT, 2010). Para as variáveis internas $\xi_i(x, y, z, t)$, pela Equação (33) e considerando aplicadas as mesmas propriedades cinemáticas do modelo de placa de Kirchhoff, Equação (77); define-se o campo de deslocamento interno auxiliar $\bar{w}_i(x, y, z, t)$ apresentado na Equação (78).

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x, y, z, t) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \gamma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\ -z \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \\ -2z \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \end{bmatrix} \quad (77)$$

$$\xi_i(x, y, z, t) = \begin{bmatrix} -z \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x^2} \\ -z \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial y^2} \\ -2z \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x \partial y} \end{bmatrix} \quad (78)$$

Tal como apresentado por Pradhan e Phadikar (2009), Aksencer e Aydogdu (2011) e Arash e Wang (2011), tem-se os momentos resultantes pela integração em z das tensões não-locais na placa na forma

$$\begin{bmatrix} M_{xx} \\ M_{yy} \\ M_{xy} \end{bmatrix} = \int_{-h/2}^{h/2} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} z dz \quad (79)$$

Pelos momentos fletores M_{xx} , M_{yy} e M_{xy} , as forças de cisalhamento resultantes Q_x e Q_y são definidas (PHADIKAR; PRADHAN, 2010).

$$Q_x = \frac{\partial M_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial M_{xy}}{\partial y} \quad (80)$$

$$Q_y = \frac{\partial M_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial M_{xy}}{\partial x} \quad (81)$$

Para o teorema de Hamilton, considerando $dv = dx dy dz$ e que são desprezíveis os efeitos de inércia rotacional, as funções variacionais das energias potencial e cinética são dadas nas Equações (82) e (83). Para as forças não conservativas, adota-se que o amortecimento viscoso e os carregamentos externos possuem componentes apenas na direção transversal z da placa, portanto, considera-se δW_{nc} como apresentado na Equação (84).

$$\delta U = - \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \left(M_{xx}(x, y, t) \frac{\partial^2 \delta w(x, y, t)}{\partial x^2} + M_{yy}(x, y, t) \frac{\partial^2 \delta w(x, y, t)}{\partial y^2} + 2M_{zz}(x, y, t) \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x \partial y} \right) dx dy \quad (82)$$

$$\delta T = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \rho h \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial t} \frac{\partial \delta w(x, y, t)}{\partial t} dx dy \quad (83)$$

$$\delta W_{nc} = \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \left(C_w'' \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial t} - f_w''(x, y, t) \right) \delta w(x, y, t) dx dy \quad (84)$$

Substituindo as Equações (82), (83) e (84) no princípio de Hamilton, Equação (34), obtém-se a equação governante de equilíbrio para placas de Kirchhoff a seguir, omitindo-se os termos relacionados às condições de contorno.

$$\rho h \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 M_{xx}(x, y, t)}{\partial x^2} + \quad (85)$$

$$- 2 \frac{\partial^2 M_{xy}(x, y, t)}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 M_{yy}(x, y, t)}{\partial y^2} = f_w''(x, y, t)$$

Os momentos resultantes em termos das deflexões transversais na placa são obtidos a partir da substituição das deformações definidas na Equação (77) na relação constitutiva viscoelástica não-local, Equação (70), resultando nas Equações (86), (87) e (88).

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) M_{xx}(x, y, t) = -E_0(x, y) \bar{D} \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial y^2} \right] + \quad (86)$$

$$+ \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2 \partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2} \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2 \partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2} \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) M_{yy}(x, y, t) = -E_0(x, y) \bar{D} \left[\nu \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial y^2} \right] + \quad (87)$$

$$+ \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \bar{D} \left[\nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2} \right]$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2 \partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x^2} \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2 \partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y^2} \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) M_{xy}(x, y, t) = \quad (88)$$

$$- E_0(x, y) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x \partial y} + \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x \partial y}$$

$$\frac{\partial^3 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x \partial y \partial t} = \Omega_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x \partial y} \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

onde \bar{D} é a rigidez à flexão da placa normalizada em relação ao módulo viscoelástico de relaxação E^* , dada por

$$\bar{D} = \frac{h^3}{12(1 - \nu^2)} \quad (89)$$

Conduzidas derivadas parciais nas Equações (86), (87) e (88), com a substituição na equação governante de equilíbrio do sistema, Equação (85), é resultada a equação de movimento que descreve a dinâmica de uma placa de Kirchhoff viscoelástica não-local pela ação de forças dissipativas de amortecimento viscoso e de carregamentos transversais.

$$\begin{aligned} & \left[1 - (e_0 a)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \left(\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} - f_w''(x, y, t) \right) + \\ & \quad \bar{D} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ E_0(x, y) \left[\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right] - \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \left[\frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial y^2} \right] \right\} + \\ & \quad \bar{D} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left\{ E_0(x, y) \left[\nu \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right] - \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \left[\nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial y^2} \right] \right\} + \\ & \quad + 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[E_0(x, y) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} - \sum_{i=1}^{NI} E_i(x, y) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x \partial y} \right] = 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial x^2 \partial t} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\Omega_i(x, y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x^2} \right) \right] \quad i = 1, \dots, NI \quad (90)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial y^2 \partial t} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\Omega_i(x, y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial y^2} \right) \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial x^2 \partial t} \right) = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\Omega_i(x, y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x^2} \right) \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial y^2 \partial t} \right) = \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left[\Omega_i(x, y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial y^2} \right) \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

$$\frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x \partial y} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial x \partial y \partial t} \right) = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \left[\Omega_i(x, y) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial x \partial y} \right) \right] \quad i = 1, \dots, NI$$

Na Equação (90), as dependências das coordenadas espaciais e do tempo dos campos de deslocamentos foram omitidas por questões de espaço e melhor compreensão da equação de movimento. Ademais, exceto a primeira equação em (90), todas as demais são as i -ésimas equações de evolução dos deslocamentos internos auxiliares associados às i -ésimas variáveis internas. Por fim, em similaridade ao modelo de viga de Euler-Bernoulli apresentado na Equação (51), a equação de movimento para a placa em (90) ocorre com

propriedades análogas no sentido de que trata-se de um modelo generalizado ao se considerar não-localidade, viscoelasticidade e amortecimento viscoso. Pode-se reiterar, inclusive, que o modelo elástico não-local pode ser recuperado anulando-se as i -ésimas amplitudes de relaxação E_i e substituindo o módulo viscoelástico de alta frequência E_0 pelo módulo de elasticidade E para um modelo elástico de placa de Kirchhoff. Além disso, o amortecimento externo pode ser anulado, $C_w'' = 0$, bem como os modelos locais elástico ou viscoelástico de placa de Kirchhoff podem ser obtidos considerando $e_0 a = 0$. Novamente, em relação às i -ésimas variáveis internas, essas ocorreram, também a partir de uma escolha *ad-hoc*, como derivadas a quarta de deslocamentos internos \bar{w}_i . As i -ésimas equações de evolução das variáveis internas na Equação (90) são, então, respectivas às derivadas segundas dos momentos fletores M_{xx} , M_{yy} e M_{xy} , dadas por $\frac{\partial^2 M_{xx}}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 M_{yy}}{\partial y^2}$ e $\frac{\partial^2 M_{xy}}{\partial x \partial y}$, considerando as Equações (86), (87) e (88), respectivamente.

1.5.3 Modelo de elementos finitos: Placa de Kirchhoff não-local viscoelástica

O modelo de elementos finitos para uma placa de Kirchhoff não-local viscoelástica é obtido aplicando a técnica de Galerkin, baseando-se nas referências (PHADIKAR; PRADHAN, 2010; REDDY, 1993). O domínio da placa é discretizado em $N = N_x N_y$ elementos finitos retangulares de comprimentos laterais $l_x = L_x/N_x$ e $l_y = L_y/N_y$, onde N_x e N_y são as quantidades de elementos finitos ao longo das coordenadas espaciais x e y definidas no plano médio da placa, respectivamente. São considerados quatro nós por elemento finito, sendo $N_1 = [x_e, y_e]$, $N_2 = [x_{e+1}, y_e]$, $N_3 = [x_e, y_{e+1}]$ e $N_4 = [x_{e+1}, y_{e+1}]$ as localizações nodais, onde x_e e x_{e+1} são localizações nodais definidas na coordenada espacial x , enquanto que y_e e y_{e+1} , em y . O domínio espacial Ω_e de um e -ésimo elemento finito é definido por $x \in [x_e, x_{e+1}]$ e $y \in [y_e, y_{e+1}]$. Dessa forma, tem-se as relações $l_x = x_{e+1} - x_e$ e $l_y = y_{e+1} - y_e$ entre as localizações nodais e as dimensões elementares. Dessas definições, estabelecem-se as coordenadas locais elementares $\bar{x} \in [0; l_x]$ e $\bar{y} \in [0; l_y]$, com $\bar{x} = x - x_e$ e $\bar{y} = y - y_e$.

Para um e -ésimo elemento finito, tem-se integrais de resíduos ponderados por

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} \left\{ [1 - (e_0 a)^2 \nabla^2] \left(\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} - \check{f}_w''(\bar{x}, \bar{y}) \right) + \right. \\
& \quad + \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} \right) - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} + \nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] + \\
& \quad + \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}^2} \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\nu \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} \right) - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] + \\
& \quad \left. + 2 \frac{\partial^2}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0 \\
& \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2 \partial t} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left[\check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0 \tag{91} \\
& \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2 \partial t} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{x}^2} \left[\check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0 \\
& \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2 \partial t} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}^2} \left[\check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0 \\
& \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2 \partial t} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{y}^2} \left[\check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0 \\
& \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \left(\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2 \partial t} \right) - \frac{\partial^2}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \left[\check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right) \right] \right\} \chi d\bar{x} d\bar{y} = 0
\end{aligned}$$

onde a função de ponderação χ é função das coordenadas elementares \bar{x} e \bar{y} e adotou-se a notação $(\check{\bullet})(\bar{x}, \bar{y}) = (\bullet)(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e)$ para indicar a transformação de coordenadas.

Pelo teorema de Green (REDDY, 1993; REDDY, 2013), empregando-se integrações por partes na Equação (91), a formulação fraca é obtida.

$$\int_{\Omega_e} I(\bar{x}, \bar{y}) d\bar{x} d\bar{y} + \oint_{\Gamma_e} B(s) ds = 0 \tag{92}$$

onde $I(\bar{x}, \bar{y})$ contém os termos bilineares e simétricos em w e em χ ou lineares em χ , integrados no domínio Ω_e do e -ésimo elemento finito da placa, enquanto em $B(s)$ ocorrem termos determinados a partir das condições de contorno definidas na fronteira Γ_e do e -ésimo elemento finito. Os integrandos $I(\bar{x}, \bar{y})$ e $B(s)$ são apresentados conforme segue.

$$\begin{aligned}
I(\bar{x}, \bar{y}) = & \left[\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} - \check{f}_w''(\bar{x}, \bar{y}, t) \right] \chi + \\
& + (e_0 a)^2 \nabla \left[\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} \right] \cdot \nabla \chi + (e_0 a)^2 \nabla^2 \check{f}_w''(\bar{x}, \bar{y}, t) + \\
& + \bar{D} \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} + \nu \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} \right) - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} + \nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{x}^2} + \\
& + \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\nu \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} \right) - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} \left(\nu \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{y}^2} + \\
& + 2 \left[\check{E}_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} - \sum_{i=1}^{NI} \check{E}_i(\bar{x}, \bar{y}) \bar{D} (1 - \nu) \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \\
& \left[\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial t \partial \bar{x}^2} - \check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{x}^2} \quad i = 1, \dots, NI \\
& \left[\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial t \partial \bar{y}^2} - \check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{y}^2} \quad i = 1, \dots, NI \\
& \left[\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial t \partial \bar{x}^2} - \check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{y}^2} \quad i = 1, \dots, NI \\
& \left[\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial t \partial \bar{y}^2} - \check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{y}^2} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{y}^2} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{y}^2} \quad i = 1, \dots, NI \\
& \left[\frac{\partial^3 \bar{w}_i}{\partial t \partial \bar{x} \partial \bar{y}} - \check{\Omega}_i(\bar{x}, \bar{y}) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} - \frac{\partial^2 \bar{w}_i}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right) \right] \frac{\partial^2 \chi}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \quad i = 1, \dots, NI
\end{aligned} \tag{93}$$

$$\begin{aligned}
B(s) = (e_0 a)^2 \left\{ -\frac{\partial}{\partial n} \left[\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + C_w'' \frac{\partial w}{\partial t} + \check{f}_w''(\bar{x}, \bar{y}, t) \right] \chi + \right. \\
\left. - \check{f}_w''(\bar{x}, \bar{y}, t) \frac{\partial \chi}{\partial n} \right\} - V_n^L \chi + M_n^L \frac{\partial \chi}{\partial n}
\end{aligned} \tag{94}$$

Conforme Reddy (1993) e Phadikar e Pradhan (2010), em relação à fronteira Γ_e do elemento finito, n e s são as coordenadas normal e tangencial, respectivamente; n_x e n_y são os componentes do vetor \hat{n} unitário normal à Γ_e , V_n^L e M_n^L são forças cortantes e momentos fletores locais definidos em função das coordenadas n e s e o operador $\frac{\partial}{\partial n}$ é dado por

$$\frac{\partial}{\partial n} = n_x \frac{\partial}{\partial \bar{x}} + n_y \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \tag{95}$$

Ainda conforme Reddy (1993) e Phadikar e Pradhan (2010), os carregamentos

resultantes no contorno, V_n^L e M_n^L , são relacionados aos momentos fletores, M_{xx} , M_{yy} e $M_{x,y}$, e forças cortantes resultantes, Q_x e Q_y , por

$$M_n = M_{xx}n_x^2 + 2M_{xy}n_xn_y + M_{yy}n_y^2 \quad (96)$$

$$M_{ns} = (n_x^2 - n_y^2) M_{xy} + [M_{yy} - M_{xx}] n_xn_y \quad (97)$$

$$V_n = Q_xn_x + Q_y n_y + \left(n_x \frac{\partial}{\partial y} - n_y \frac{\partial}{\partial x} \right) M_{ns} \quad (98)$$

Para cada nó em um elemento finito tem-se três graus de liberdade, a saber, a deflexão transversal w e as rotações $\frac{\partial w}{\partial x}$ e $\frac{\partial w}{\partial y}$, as variáveis primárias do sistema discretizado. Um polinômio de 12 termos é adotado para a interpolação dos deslocamentos transversais $w(x, t)$ e suas derivadas em x e em y no interior de cada elemento finito (REDDY, 1993; KRAUTHAMMER; VENTSEL, 2001; PHADIKAR; PRADHAN, 2010). Considerando as localizações nodais e o sistema de coordenadas local elementar adotado, tem-se

$$w(\bar{x}, \bar{y}, t) = \mathbf{N}^T(\bar{x}, \bar{y}) \mathbf{q}_e(t)$$

$$\bar{w}_i(\bar{x}, \bar{y}, t) = \mathbf{N}^T(\bar{x}, \bar{y}) \bar{\mathbf{q}}_{ei}(t), \quad i = 1, 2, \dots, NI \quad (99)$$

$$\chi(\bar{x}, \bar{y}) = \mathbf{N}(\bar{x}, \bar{y})$$

onde $\mathbf{N}(\bar{x}, \bar{y})$ é o vetor de funções de forma, $\mathbf{q}_e(t)$ é o vetor contendo os deslocamentos generalizados nodais e $\bar{\mathbf{q}}_{ei}(t)$ é o respectivo vetor de deslocamentos internos auxiliares respectivos à i -ésima variável interno do modelo viscoelástico de relaxação adotado.

O vetor de deslocamentos nodais generalizado $\mathbf{q}_e(t)$ e o respectivo i -ésimo interno $\bar{\mathbf{q}}_{ei}(t)$ são, respectivamente, definidos como

$$\mathbf{q}_e(t) = [\mathbf{q}_{e1}(t) \quad \mathbf{q}_{e2}(t) \quad \mathbf{q}_{e3}(t) \quad \mathbf{q}_{e4}(t)]^T \quad (100)$$

$$\bar{\mathbf{q}}_{ei}(t) = [\bar{\mathbf{q}}_{ei1}(t) \quad \bar{\mathbf{q}}_{ei2}(t) \quad \bar{\mathbf{q}}_{ei3}(t) \quad \bar{\mathbf{q}}_{ei4}(t)]^T, \quad i = 1, 2, \dots, NI \quad (101)$$

onde o n -ésimo vetor $\mathbf{q}_{en}(t)$ contém os graus de liberdade associados ao nó N_n , sendo $\bar{\mathbf{q}}_{ein}(t)$ o respectivo i -ésimo deslocamento interno, dados por

$$\mathbf{q}_{en}(t) = \left[w(x, y, t) \quad \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial x} \quad \frac{\partial w(x, y, t)}{\partial y} \right] \Big|_{N_n} \quad (102)$$

$$\mathbf{q}_{ein}(t) = \left[\bar{w}_i(x, y, t) \quad \frac{\partial \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial x} \quad \frac{\partial \bar{w}_i(x, y, t)}{\partial y} \right] \Big|_{N_n} \quad (103)$$

O vetor $\mathbf{N}(\bar{x}, \bar{y})$ é dado por

$$\mathbf{N}(\bar{x}, \bar{y}) = \left[\begin{array}{c} -\frac{2\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^3} + \frac{2\bar{y}^3}{ly^3} + \frac{3\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly^2} - \frac{3\bar{y}^2}{ly^2} - \frac{2\bar{x}^3y}{lx^3\ ly} + \frac{3\bar{x}^2y}{lx^2\ ly} - \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx\ ly} + \frac{2\bar{x}^3}{lx^3} - \frac{3\bar{x}^2}{lx^2} + 1 \\ -\frac{\bar{x}^3y}{lx^2\ ly} + \frac{2\bar{x}^2y}{lx\ ly} - \frac{\bar{x}\bar{y}}{ly} + \frac{\bar{x}^3}{lx^2} - \frac{2\bar{x}^2}{lx} + \bar{x} \\ -\frac{\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^2} + \frac{\bar{y}^3}{ly^2} + \frac{2\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly} - \frac{2\bar{y}^2}{ly} - \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx} + \bar{y} \\ \frac{2\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^3} - \frac{3\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly^2} + \frac{2\bar{x}^3y}{lx^3\ ly} - \frac{3\bar{x}^2y}{lx^2\ ly} + \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx\ ly} - \frac{2\bar{x}^3}{lx^3} + \frac{3\bar{x}^2}{lx^2} \\ -\frac{\bar{x}^3y}{lx^2\ ly} + \frac{\bar{x}^2y}{lx\ ly} + \frac{\bar{x}^3}{lx^2} - \frac{\bar{x}^2}{lx} \\ \frac{\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^2} - \frac{2\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly} + \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx} \\ \frac{2\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^3} - \frac{2\bar{y}^3}{ly^3} - \frac{3\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly^2} + \frac{3\bar{y}^2}{ly^2} + \frac{2\bar{x}^3y}{lx^3\ ly} - \frac{3\bar{x}^2y}{lx^2\ ly} + \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx\ ly} \\ \frac{\bar{x}^3y}{lx^2\ ly} - \frac{2\bar{x}^2y}{lx\ ly} + \frac{\bar{x}\bar{y}}{ly} \\ -\frac{\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^2} + \frac{\bar{y}^3}{ly^2} + \frac{\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly} - \frac{\bar{y}^2}{ly} \\ -\frac{2\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^3} + \frac{3\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly^2} - \frac{2\bar{x}^3y}{lx^3\ ly} + \frac{3\bar{x}^2y}{lx^2\ ly} - \frac{\bar{x}\bar{y}}{lx\ ly} \\ \frac{\bar{x}^3y}{lx^2\ ly} - \frac{\bar{x}^2y}{lx\ ly} \\ \frac{\bar{x}\bar{y}^3}{lx\ ly^2} - \frac{\bar{x}\bar{y}^2}{lx\ ly} \end{array} \right] \quad (104)$$

Com a substituição da Equação (99) na Equação (92), considerando a definição dada pela Equação (21) sobre os módulos viscoelásticos de relaxação de baixa e alta frequências, o modelo de elementos finitos para a placa de Kirchhoff pode ser obtido na forma de uma equação de movimento do sistema discretizado, igual à Equação (60), porém redefinindo as matrizes e os vetores. Para a placa de Kirchhoff viscoelástica não-local, as

matrizes e o vetor de carregamentos generalizado são definidos como segue.

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_e = \rho h \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\bar{x} d\bar{y} + \\ + (e_0 a)^2 \rho h \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N}^T d\bar{x} d\bar{y} - (e_0 a)^2 \rho h \oint_{\Gamma_e} \frac{\partial}{\partial n} [\mathbf{N}] \mathbf{N}^T ds \end{aligned} \quad (105)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_e = C_w'' \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\bar{x} d\bar{y} + \\ + (e_0 a)^2 C_w'' \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N}^T d\bar{x} d\bar{y} - (e_0 a)^2 C_w'' \oint_{\Gamma_e} \frac{\partial}{\partial n} [\mathbf{N}] \mathbf{N}^T ds \end{aligned} \quad (106)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_\infty^e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} E_\infty(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e) \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \nu \left(\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} \right) + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + 2(1 - \nu) \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \end{aligned} \quad (107)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_i^e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} E_i(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e) \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \nu \left(\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + 2(1 - \nu) \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \end{aligned} \quad (108)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\Omega_i}^e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \Omega_i(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e) \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \end{aligned} \quad (109)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{K}}_e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \right. \\ \left. + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \end{aligned} \quad (110)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_e(t) = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} [\mathbf{N} - (e_0 a)^2 \nabla^2 \mathbf{N}] f(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e, t) d\bar{x} d\bar{y} + \\ - (e_0 a)^2 \oint_{\Gamma_e} \left[\frac{\partial f_w''}{\partial n}(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e, t) \mathbf{N} - f_w''(\bar{x} + x_e, \bar{y} + y_e, t) \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial n} + \right. \\ \left. + V_n^L \mathbf{N} - M_n^L \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial n} \right] ds \end{aligned} \quad (111)$$

Da mesma forma que o modelo de elementos finitos para vigas de Euler-Bernoulli, uma vez definidas as matrizes e os vetores elementares para o modelo não-local viscoelástico de placa de Kirchhoff, as matrizes e vetores globais podem ser obtidos pelas técnicas de montagem clássicas na literatura do Método dos Elementos Finitos (REDDY, 1993; RAO, 2010).

1.6 Modelo Espaço de Estado e a Determinação de Parâmetros Modais

Nas Subseções 1.4.3 e 1.5.3, modelos de elementos finitos elementares de viga de Euler-Bernoulli e placa de Kirchhoff não-locais viscoelásticos foram desenvolvidos matematicamente, tendo, como resultado, equações de movimento elementares respectivas aos sistemas discretizados. Realizados os vetores e matrizes globais do MEF, obtidos pelas técnicas de montagem clássicas na literatura do Método dos Elementos Finitos (REDDY, 1993; RAO, 2010), tem-se a equação de movimento global do modelo discretizado por

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}}(t) + \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}}(t) + \left(\mathbf{K}_\infty + \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{K}_i \right) \mathbf{q}(t) - \sum_{i=1}^{NI} \mathbf{K}_i \bar{\mathbf{q}}_i(t) = \mathbf{P}(t) \quad (112)$$

$$\bar{\mathbf{K}}\dot{\bar{\mathbf{q}}}_i(t) + \mathbf{K}_{\Omega_i} \bar{\mathbf{q}}_i(t) - \mathbf{K}_{\Omega_i} \mathbf{q}(t) = \mathbf{0}, \quad i = 1, 2, \dots, NI$$

onde \mathbf{M} e \mathbf{D} são, respectivamente, as matrizes globais de massa e amortecimento, \mathbf{K}_∞ é a matriz global de rigidez de baixa frequência, \mathbf{K}_i e \mathbf{K}_{Ω_i} são, respectivamente, as i -ésimas matrizes globais associadas aos parâmetros viscoelásticos E_i e Ω_i de uma i -ésima variável interna, $\bar{\mathbf{K}}$ é a matriz global respectiva à matriz elementar $\bar{\mathbf{K}}_e$ e \mathbf{P} é o vetor global contendo os carregamentos generalizados.

Para a representação em espaço de estados do MEF global viscoelástico, considera-se um vetor de estados \mathbf{X} , dado por

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}(t) \\ \dot{\mathbf{q}}(t) \\ \bar{\mathbf{q}}_1(t) \\ \bar{\mathbf{q}}_2(t) \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{q}}_{NI}(t) \end{bmatrix} \quad (113)$$

Considerando as Equações (113) e (112), tem-se

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B}\mathbf{U} \quad (114)$$

onde \mathbf{A} é a matriz de estado, \mathbf{U} é o vetor de entrada e \mathbf{B} a matriz de entrada, dados,

respectivamente, por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}_0 & -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{D} & \mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}_1 & \mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}_2 & \cdots & \mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}_{NI} \\ \bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_1} & \mathbf{0} & -\bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_2} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_2} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_{NI}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & -\bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{K}_{\Omega_{NI}} \end{bmatrix} \quad (115)$$

$$\mathbf{U} = [\mathbf{0}, \mathbf{P}(t), \mathbf{0}, \cdots, \mathbf{0}]^T \quad (116)$$

$$\mathbf{B} = [\mathbf{0}, \mathbf{M}^{-1}, \mathbf{0}, \cdots, \mathbf{0}] \quad (117)$$

A partir da representação em espaço de estados, por exemplo, os polos do sistema podem ser obtidos calculando-se os autovalores da matriz de estado \mathbf{A} , dada pela Equação (115) (INMAN, 2014). Para um n -ésimo polo complexo, as respectivas frequências naturais ω_n e razões de amortecimento ζ_n são calculadas por

$$\begin{aligned} \omega_n &= \sqrt{\text{Re}(s_n)^2 + \text{Im}(s_n)^2} \\ \zeta_n &= -\frac{\text{Re}(s_n)}{\omega_n} \end{aligned} \quad (118)$$

onde a notação $\text{Re}(\bullet)$ e $\text{Im}(\bullet)$ indica a extração das partes real e imaginária, respectivamente, da variável (\bullet) (INMAN, 2014).

Os polos relacionados aos deslocamentos generalizados físicos se apresentam na forma de pares complexos conjugados, enquanto que os associados aos graus de liberdade pelas variáveis internas de dissipação são puramente reais (GOLLA; HUGHES, 1985; MCTAVISH; HUGHES, 1992; MCTAVISH; HUGHES, 1993; LESIEUTRE; BIANCHINI, 1995). A quantidade de polos total depende da quantidade de graus de liberdade do sistema discretizado e da quantidade de campos de deslocamentos internos. Nos modelos de viga e placa viscoelásticos propostos nessa tese, para um total de Z deslocamentos generalizados físicos, tem-se Z deslocamentos internos para cada um dos i -ésimos campos de deslocamentos internos. Logo a quantidade de polos total é dada por $(2 + NI)Z$.

A determinação dos parâmetros modais é considerada como o problema direto a ser utilizado na construção de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos nesta tese. Todas as simulações computacionais dos modelos viscoelásticos não-locais de viga e placa apresentados nessa tese foram implementados elaborando-se códigos e utilizando os recursos numéricos do *software* MATLAB®.

2 INFERÊNCIA BAYESIANA: ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS E SELEÇÃO DE CLASSES DE MODELOS

Problemas inversos de estimação de parâmetros ocorrem quando há a necessidade de se estimar os parâmetros de uma determinada classe de modelos a partir de um fenômeno físico observado (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006). Os dados experimentais são dependentes das propriedades físicas do sistema e do processo de medição experimental. Proposto um modelo teórico para a descrição dos fenômenos físicos envolvidos, as grandezas de interesse, que são os parâmetros desconhecidos desse modelo, são estimadas extraindo informações sobre o sistema a partir dos dados experimentais (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006). Na prática, os dados experimentais são comumente corrompidos por ruído e, além disso, os modelos teóricos propostos apresentam sempre algum nível de erro de modelagem. Dessa forma, são conseqüentemente incertas quaisquer inferências de parâmetros para o sistema investigado. Para o tratamento das incertezas em problemas inversos de estimação de parâmetros, basicamente, tem-se as abordagens probabilísticas Frequentista e Bayesiana (NICHOLS et al., 2010; NICHOLS; MOORE; MURPHY, 2011).

Na perspectiva do paradigma Frequentista, pelo método da máxima *verossimilhança*, o problema inverso é formulado como um problema de otimização, onde a probabilidade de ocorrência dos dados experimentais é maximizada (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; NICHOLS et al., 2010; NICHOLS; MOORE; MURPHY, 2011). Dessa forma, a solução do problema inverso se resume, geralmente, à determinação de um valor paramétrico pontual, tal que a respectiva predição ótima pelo modelo teórico é aquela que melhor se aproxima aos dados experimentais (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; NICHOLS et al., 2010; NICHOLS; MOORE; MURPHY, 2011).

Diferentemente, por abordagem Bayesiana, os parâmetros a serem estimados são modelados como variáveis aleatórias e as incertezas são representadas por meio de funções densidade de probabilidade (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006). O estado de conhecimento *a priori* sobre os parâmetros é considerado e introduzido na formulação por meio da PDF *a priori* dos parâmetros. Pelo Teorema de Bayes, tem-se a PDF *a posteriori* dos parâmetros. Esta representa o estado de conhecimento atualizado sobre os parâmetros do modelo após serem considerados os dados experimentais pela função de *verossimilhança* (KAPIO; SOMERSALO, 2006). Propriedades estatísticas sobre os parâmetros estimados podem ser obtidas a partir da PDF *a posteriori*, incluindo, por exemplo, as médias e os intervalos de confiança (KAPIO; SOMERSALO, 2006). A principal característica da abordagem Bayesiana é a possibilidade da identificação de toda a região de solução no espaço paramétrico, de acordo com as respectivas densidades de probabilidade pela PDF *a posteriori* dos parâmetros. Portanto, permite-se avaliar,

generalizadamente, o impacto das incertezas nas estimativas dos parâmetros de interesse.

Além da aplicação para problemas inversos de estimação de parâmetros, inferência Bayesiana é também apropriada para problemas inversos de seleção de classes de modelos e realização de médias de modelos. Pelo formalismo Bayesiano, dado um conjunto de classes de modelos propostas para a modelagem do sistema, as expectativas iniciais em relação a cada uma das classes de modelos são representadas na forma de plausibilidades *a priori* e a solução do problema inverso é a obtenção das plausibilidades *a posteriori*, sendo estas o conhecimento atualizado sobre as plausibilidades das classes de modelos, após terem sido considerados os dados experimentais pelas evidências das classes de modelos. Obtidas as plausibilidades *a posteriori* de todas as classes de modelos, o ranqueamento delas é realizado, podendo ser selecionada a mais plausível. Por fim, quando da existência de mais de uma classe de modelos plausível, pode-se proceder a média Bayesiana dos modelos (BECK; YUEN, 2004; CHEUNG; BECK, 2010; YUEN, 2010). Por esse processo, os valores esperados das predições investigadas são obtidos condicionados aos dados experimentais e ponderados considerando todas as classes de modelos propostas, de acordo com as respectivas plausibilidades *a posteriori*.

No âmbito dos objetivos desta tese, tem-se a análise de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana, sendo considerados modelos não-locais viscoelásticos de nanoestruturas. A metodologia se justifica diante das inevitáveis incertezas em modelagem e experimentação de qualquer sistema dinâmico real (KAPIO; SOMERSALO, 2006; FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; YUEN, 2010; BURNHAM; ANDERSON, 1998; MUTO; BECK, 2008; LECOMTE et al., 2012). Neste contexto, destaca-se um acréscimo no nível de complexidade do processo inferência quando se trabalha em nanoescala, uma vez que existem as dificuldades em experimentação de alta precisão e a complexidade em modelagem dos efeitos de escala e de amortecimento quando se lida com nanoestruturas (LEI et al., 2013; KARLIČIĆ et al., 2016). Para a obtenção de amostras da PDF *a posteriori* dos parâmetros e das evidências das classes de modelos é adotado o *Transitional Markov Chain Monte Carlo*, proposto originalmente por Ching e Chen (2007).

2.1 Estimação de parâmetros

Considerando uma particular classe de modelos \mathcal{M} para a descrição de um sistema, sendo $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{N_\theta}$ o vetor de N_θ parâmetros desconhecidos a serem estimados e $\mathbf{y}_E \in \mathbb{R}^{N_y}$ o vetor de N_y observações experimentais, de acordo com o Teorema de Bayes, a PDF *a posteriori* $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M})$ é dada por

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}) = \frac{\pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})}{\pi(\mathbf{y}_E|\mathcal{M})} \quad (119)$$

onde $\pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})$ é a função de *verossimilhança*, $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ é a função densidade de probabilidade *a priori*, que descreve o nível de informação em relação aos parâmetros antes de serem considerados os dados experimentais, e $\pi(\mathbf{y}_E, \mathcal{M})$ é a *verossimilhança* marginal, também denominada evidência da classe de modelos \mathcal{M} , definida como

$$\pi(\mathbf{y}_E|\mathcal{M}) = \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} \pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})d\boldsymbol{\theta} \quad (120)$$

onde \mathbb{R}^{N_θ} representa o domínio do vetor de parâmetros incertos $\boldsymbol{\theta}$ (KAPIO; SOMERSALO, 2006; FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; CHEUNG; BECK, 2010; BECK, 2010). A evidência de uma classe de modelos representa um elemento fundamental nos problemas de seleção de classes de modelos e média de modelos por inferência Bayesiana (CHEUNG; BECK, 2010; BECK, 2010; YUEN, 2010). No entanto, ao nível dos problemas inversos de estimação de parâmetros, ela ocorre apenas como um fator de escala, de forma que a PDF *a posteriori* seja normalizada a uma unidade (YUEN, 2010; RUSSEL et al., 2019; HERNÁNDEZ; CASTELLO; MATT, 2018).

No que se refere à PDF *a priori* dos parâmetros do modelo, tem-se que, comumente, o que existe é um conhecimento qualitativo e, segundo Kaipio e Somersalo (2006), a questão é tratar quantitativamente a informação de forma que se possa expressá-la adequadamente por meio de uma PDF. Este passo da formulação do problema inverso pode ser consideravelmente crítico quando se dispõe de dados experimentais limitados ou pouco informativos, cenário em que os impactos das escolhas das PDFs *a priori* tendem a ser mais significativos na solução de um problema inverso (SIMOEN; PAPADIMITRIOU; LOMBAERT, 2013; MADIREDDY; SISTA; VEMAGANTI, 2015; RAPPEL et al., 2016). Ademais, a escolha da PDF *a priori* $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ pode permitir a regularização de problemas inversos mal-postos (BECK, 2010).

Acerca da função de *verossimilhança*, considerações podem ser realizadas em relação ao modelo e ao ruído inerente à medição experimental. Em aplicações reais, a física que governa o sistema pode não ser totalmente bem compreendida e o que se propõe é uma classe de modelos \mathcal{M} para uma representação aproximada do sistema real em investigação (BECK, 2010). Portanto, define-se um operador problema direto $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) : \mathbb{R}^{N_\theta} \mapsto \mathbb{R}^{N_y}$, em função do vetor de parâmetros desconhecidos $\boldsymbol{\theta}$ e, adicionalmente, um operador problema direto acurado $\bar{\mathbf{A}}(\bar{\boldsymbol{\theta}})$, capaz da descrição de todos os mecanismos físicos do sistema analisado, em função de seus próprios parâmetros $\bar{\boldsymbol{\theta}}$ (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Pode-se definir o modelo de observação, relacionando as predições teóricas $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})$ aos dados experimentais \mathbf{y}_E , por (KOLEHMAINEN et al., 2011)

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_E &= \bar{\mathbf{A}}(\bar{\boldsymbol{\theta}}) + \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\epsilon} + [\bar{\mathbf{A}}(\bar{\boldsymbol{\theta}}) - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})] = \\ &= \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\psi}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}) = \\ &= \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}) + \tilde{\boldsymbol{\epsilon}} \end{aligned} \quad (121)$$

onde $\boldsymbol{\epsilon} \in \mathbb{R}^{N_y}$ é o vetor aleatório que representa os erros de medição experimental, $\boldsymbol{\psi}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}) \in \mathbb{R}^{N_y}$ representa as discrepâncias de modelagem, dadas por $\boldsymbol{\psi} = [\bar{\mathbf{A}}(\bar{\boldsymbol{\theta}}) - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta})]$, e $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ é a variável de erro global, que representa tanto o ruído aditivo por erros de medição experimental, $\boldsymbol{\epsilon}$, quanto os erros de modelagem representados por $\boldsymbol{\psi}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta})$ (KOLEHMAINEN et al., 2011; FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Destaca-se que as discrepâncias entre os dados experimentais \mathbf{y}_E e as previsões acuradas pelo operador $\bar{\mathbf{A}}(\bar{\boldsymbol{\theta}})$ poderiam ser completamente descritas pelo ruído aditivo experimental $\boldsymbol{\epsilon}$ (KOLEHMAINEN et al., 2011; FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Por outro lado, tem-se que, ao se adotar um modelo com menor acurácia, além dos erros de previsão experimental, deverão ser levados em conta os erros de modelagem $\boldsymbol{\psi}$ (KENNEDY; O'HAGAN, 2001; BRYNJARSDÓTTIR; O'HAGAN, 2014; KOLEHMAINEN et al., 2011; FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Segundo Brynjarsdóttir e O'Hagan (2014), negligenciar as discrepâncias de modelagem pode levar a estimativas tendenciosas e com curtos intervalos de credibilidade para os parâmetros estimados.

Para a construção da função de *verossimilhança*, adota-se uma hipótese *ad-hoc* em relação aos erros de modelagem, tal que é assumido que o erro global $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$ pode ser descrito de acordo com uma distribuição normal Gaussiana com média nula e uma matriz de covariância $\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}$ desconhecida, tal que essa pode ser recuperada junto aos parâmetros estimados no problema inverso (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Por esta hipótese, tem-se que a função de *verossimilhança* é dada por

$$\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_y}} \sqrt{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}\tilde{\boldsymbol{\epsilon}})}}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}))^T \boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}^{-1} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M})) \right] \quad (122)$$

onde o operador problema direto $\mathbf{A}(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M})$ é definido para representar a obtenção de previsões pela classe de modelos \mathcal{M} . Neste caso, ao se estimar a matriz de covariância do erro aditivo global $\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}$, são levados em conta, conjuntamente, a covariância do ruído experimental, $\boldsymbol{\epsilon}$, e as discrepâncias de modelo, $\boldsymbol{\psi}(\bar{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta})$. Se classes de modelos que recuperam previsões menos acuradas forem adotadas na construção do problema inverso, covariâncias de maiores magnitudes tenderão a ter ocorrência nas estimativas da matriz $\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}}$, impactando em maiores intervalos de credibilidade para as estimativas paramétricas e previsões quando solucionado o problema inverso.

Por fim, cabe destacar que outras metodologias para modelagem da discrepância de modelos em problemas inversos de estimação de parâmetros, inclusive mais sofisticadas, são apresentadas na literatura, podendo citar os autores Kennedy e O'Hagan (2001), Kolehmainen et al. (2011) e Brynjarsdóttir e O'Hagan (2014) como referências. Nesta tese, as hipóteses adotadas para os erros de modelagem, apesar de simplistas, foram verificadas como razoáveis para os problemas inversos abordados.

2.1.1 Propriedades estatísticas dos parâmetros a partir da PDF a *posteriori*

Diversas propriedades estatísticas podem ser extraídas a partir da PDF a *posteriori* dos parâmetros. Algumas dessas propriedades são destacadas conforme segue.

O estimador máximo a *posteriori* (MAP), de forma semelhante ao estimador máxima *verossimilhança*, é um estimador pontual, ou seja, fornece apenas um valor pontual para o vetor de parâmetros e é geralmente obtido a partir da definição de um problema de otimização. Como resultado, tem-se as configurações paramétricas ótimas que recuperam o valor máximo da PDF a *posteriori*. Segundo Muto e Beck (2008), através desse estimador são possíveis compreensões importantes sobre a topologia da PDF a *posteriori*. Pode haver unicidade de solução e apenas um vetor de parâmetros ótimos ser obtido, podem haver múltiplas soluções discretas, verificando-se mais de uma combinação de valores paramétricos ótimos, e, quando a *priori* não é informativa a ponto da identificação da MAP ser um problema bem-condicionado, infinitas combinações paramétricas ótimas no domínio de solução podem haver entre dois ou mais parâmetros (MUTO; BECK, 2008; BECK, 2010).

Outras propriedades estatísticas são integrações no espaço paramétrico \mathbb{R}^{N_θ} . Para uma variável $f(\boldsymbol{\theta})$ em função de $\boldsymbol{\theta}$, tem-se

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E} [f(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}] = \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} f(\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M})d\boldsymbol{\theta} \quad (123)$$

onde $\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E}$ representa a expectativa probabilística do valor da função $f(\boldsymbol{\theta})$ ponderada pela PDF a *posteriori* $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M})$ (KAPIO; SOMERSALO, 2006; YUEN, 2010; EHLERS, 2011). Por exemplo, com $f(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{\theta}$ determina-se a média dos parâmetros e, com $f(\boldsymbol{\theta}) = (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu})(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu})^T$, determina-se a covariância entre os parâmetros, ambas condicionadas ao vetor de dados experimentais, \mathbf{y}_E , e à classe de modelos \mathcal{M} (KAPIO; SOMERSALO, 2006; YUEN, 2010; EHLERS, 2011).

A determinação de uma função densidade de probabilidade marginal para um k -ésimo parâmetro θ_k é realizada por (KAPIO; SOMERSALO, 2006)

$$\pi(\theta_k|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}) = \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} \pi(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{N_\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M})d\theta_1d\theta_2\dots d\theta_{k-1}d\theta_{k+1}\dots d\theta_{N_\theta} \quad (124)$$

Intervalos de credibilidade para um k -ésimo parâmetro, I_k , podem ser determinados estabelecendo um percentual de confiança P para o qual $I_k(P) = [a_k, b_k]$, onde a_k e b_k são os limites inferior e superior do parâmetro em questão, através da equação (KAPIO; SOMERSALO, 2006)

$$\int_{-\infty}^{a_k} \pi(\theta_k)dx_k = \int_{b_k}^{\infty} \pi(\theta_k)d\theta_k = \frac{P}{200} \quad (125)$$

2.1.2 Métodos de Monte Carlo com Cadeias de Markov

Para a solução de problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana, depende-se da escolha de uma metodologia conveniente de exploração da distribuição a *posteriori* dos parâmetros (KAPIO; SOMERSALO, 2006). Conforme abordado na Subseção 2.1.1, propriedades estatísticas importantes em relação aos parâmetros são extraídas a partir da PDF paramétrica conjunta a *posteriori*, com a realização de integrais no espaço paramétrico \mathbb{R}^{N_θ} (KAPIO; SOMERSALO, 2006). Pelas complexidades da função de *verossimilhança*, que pode ser não-linear e definida em um espaço paramétrico \mathbb{R}^{N_θ} altamente dimensional, soluções analíticas são dificilmente possíveis e técnicas baseadas em amostragem para exploração da PDF a *posteriori* são amplamente empregadas, principalmente métodos de Monte Carlo com Cadeias de Markov (MCMC) (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006; YUEN, 2010; RAPPEL et al., 2016).

Métodos MCMC consistem de uma família de métodos para a geração de uma Cadeia de Markov $\{\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \dots, \boldsymbol{\theta}^{N_s}\}$ ergodicamente distribuída de acordo com uma PDF alvo (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006). O termo Cadeia de Markov, associado ao método de integração de Monte Carlo, diz respeito a uma sequência de variáveis aleatórias; $\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \dots$; em que o estado atual t da cadeia, $\boldsymbol{\theta}^t$, foi gerado dependendo somente do estado anterior, $\boldsymbol{\theta}^{t-1}$ (FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006; EHLERS, 2011). Se uma quantidade suficiente de amostras N_s é gerada, por integração de Monte Carlo, as propriedades estatísticas da cadeia de Markov, como a média e a variância, serão aproximações numéricas acuradas em relação às respectivas propriedades estatísticas da PDF alvo (METROPOLIS; ULAM, 1949; KAPIO; SOMERSALO, 2006; EHLERS, 2011; FOX; NICHOLLS; TAN, 2010; KAPIO; SOMERSALO, 2006). A Equação (123), por integração de Monte Carlo, é aproximada por

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E} [f(\boldsymbol{\theta})|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}] = \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} f(\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M})d\boldsymbol{\theta} \simeq \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} f(\boldsymbol{\theta}^i) \quad (126)$$

Um método MCMC clássico é o algoritmo de Metropolis-Hastings (METROPOLIS; ULAM, 1949; METROPOLIS et al., 1953; HASTINGS, 1970). Definindo um estado inicial para a cadeia como $\boldsymbol{\theta}^1 \in \mathbb{R}^{N_\theta}$ e $t = 1$ como um contador de iterações, o método consiste na condução iterativa de duas operações até que a quantidade desejada de amostras seja obtida (LIANG; LIU; CARROLL, 2010).

- 1- Proposição:** Um estado candidato para a cadeia, $\boldsymbol{\theta}^*$, é proposto aleatoriamente com o uso de uma distribuição de transição, $q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^t)$, com média no estado atual, $\boldsymbol{\theta}^t$.
- 2- Decisão:** O novo estado é aceito ou não, com probabilidade de aceite dada por um

fator de aceitação α_c , dado por

$$\alpha_c(\boldsymbol{\theta}^t | \boldsymbol{\theta}^t) = \min \left[1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^* | \mathbf{y}_E, \mathcal{M}) q(\boldsymbol{\theta}^t | \boldsymbol{\theta}^*)}{\pi(\boldsymbol{\theta}^t | \mathbf{y}_E, \mathcal{M}) q(\boldsymbol{\theta}^* | \boldsymbol{\theta}^t)} \right] \quad (127)$$

Se aceito, $\boldsymbol{\theta}^{t+1} = \boldsymbol{\theta}^*$ será o estado atual da cadeia, se não, $\boldsymbol{\theta}^{t+1} = \boldsymbol{\theta}^t$. O contador de iterações é atualizado, $t = t + 1$.

Apesar do clássico algoritmo MH poder ser eficiente em diversas aplicações, ele tende a não ser adequado para problemas inversos cuja a PDF alvo é, por exemplo, multidimensional ou multimodal. Métodos MCMC diversos são propostos na literatura para se otimizar a geração de cadeias de Markov em casos de PDFs alvo de difícil explorabilidade, tais como aquelas definidas em um espaço altamente dimensional e com suporte com formato complexo no espaço paramétrico \mathbb{R}^{N_θ} . Nesse sentido, as contribuições na literatura são diversas, deixando-se referenciados os trabalhos dos autores Altekar et al. (2004), Haario et al. (2006), Andrieu e Thoms (2008), Trias, Vecchio e Veitch (2009), Liang, Liu e Carroll (2010), Nichols, Moore e Murphy (2011) e Farr, Kalogera e Luijten (2014) como materiais dedicados às proposições de métodos MCMC.

Nesta tese, o algoritmo TMCMC proposto por Ching e Chen (2007) é adotado, sendo este apresentado na Seção 2.4.

2.2 Seleção de classes de modelos

A quantificação de quão bom é um determinado modelo está associada ao equilíbrio entre a sua qualidade de ajuste aos dados experimentais e a sua complexidade (YUEN, 2010). Logo, a questão é o uso de um critério que quantifique o Princípio da Navalha de Occam (MACKAY, 2005) e o Princípio do Modelo Parcimonioso (BURNHAM; ANDERSON, 1998), que regram pela preferência do modelo mais simples quando aqueles mais complexos apresentam melhorias pouco significativas em relação às discrepâncias entre a predição teórica e os dados experimentais (BURNHAM; ANDERSON, 1998; MUTO; BECK, 2008).

Em inferência Bayesiana, o critério pelo qual se realizam as comparações entre as diferentes classes de modelos consideradas são as evidências das classes de modelos (YUEN, 2010). De acordo com Muto e Beck (2008), a evidência de uma classe de modelos é naturalmente a realização do Princípio da Navalha de Occam e do Princípio do Modelo Parcimonioso, pois quantifica-se tanto a capacidade de recuperar os dados experimentais, quanto também é realizada a penalização das classes de modelos de maior complexidade (BECK; YUEN, 2004; CHEUNG; BECK, 2010).

Considerando um conjunto finito de N_{class} classes de modelos para inferência, $\mathcal{M} =$

$[\mathcal{M}_1, \mathcal{M}_2, \dots, \mathcal{M}_{N_{class}}]$, o Teorema de Bayes aplicado ao nível de problemas inversos de seleção de classes de modelos é estabelecido como (MUTO; BECK, 2008)

$$P(\mathcal{M}_i | \mathbf{y}_E, \mathcal{M}) = \frac{\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_i) P(\mathcal{M}_i | \mathcal{M})}{\sum_{i=1}^{N_{class}} \pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_i) P(\mathcal{M}_i | \mathcal{M})} \quad (128)$$

onde $P(\mathcal{M}_i | \mathcal{M})$ e $P(\mathcal{M}_i | \mathbf{y}_E, \mathcal{M})$ são, respectivamente, as plausibilidades *a priori* e a *posteriori* da i -ésima classe de modelos \mathcal{M}_i , tal que a sua respectiva evidência é dada por

$$\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_i) = \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} \pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}_i) \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta} \quad (129)$$

Considerando duas classes de modelos quaisquer em \mathcal{M} , representadas por \mathcal{M}_j e \mathcal{M}_k , a comparação Bayesiana entre elas pode ser interpretada de acordo as razões entre as respectivas plausibilidades *a posteriori*, obtidas através da Equação (128), por

$$\frac{P(\mathcal{M}_j | \mathbf{y}_E, \mathcal{M})}{P(\mathcal{M}_k | \mathbf{y}_E, \mathcal{M})} = \frac{\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_j) P(\mathcal{M}_j | \mathcal{M})}{\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_k) P(\mathcal{M}_k | \mathcal{M})} \quad (130)$$

Pela Equação (130), tem-se o quão relativamente mais provável é a classe de modelos \mathcal{M}_j em relação à concorrente \mathcal{M}_k . A primeira razão após a igualdade é definida como o fator de Bayes $BF_{\mathcal{M}_j, \mathcal{M}_k}$ (BF- *Bayes Factor*) (KASS; RAFTERY, 1995), dado por

$$BF_{\mathcal{M}_j, \mathcal{M}_k} = \frac{\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_j)}{\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}_k)} \quad (131)$$

O fator de Bayes mensura a evidência em favor da classe de modelos \mathcal{M}_j em relação à classe de modelos \mathcal{M}_k (KASS; RAFTERY, 1995). Ele pode ser interpretado considerando a escala de evidências proposta por Jeffreys (1948), resumida na Tabela 1, conforme os autores Kass e Raftery (1995).

Tabela 1 - Escala de evidências proposta por Jeffreys (1948)

$BF_{\mathcal{M}_j, \mathcal{M}_k}$	Evidência em favor da classe de modelos \mathcal{M}_j
1 a 3,2	Não é significativa
3,2 a 10	Substancial
10 a 100	Forte
>100	Decisiva

Fonte: Adaptado de Kass e Raftery (1995, Página 777)

Cabem ser destacadas algumas das propriedades mensuradas em relação às classes

de modelos quando quantificadas as suas respectivas evidências. De acordo com os autores Muto e Beck (2008), Cheung e Beck (2010) e Yuen (2010), o logaritmo natural da evidência de uma classe de modelos pode ser expresso da seguinte forma

$$\begin{aligned} \ln [\pi(\mathbf{y}_E|\mathcal{M}_i)] = & \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} \ln [\pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}_i)] \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta} + \\ & - \int_{\mathbb{R}^{N_\theta}} \ln \left[\frac{\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i)}{\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}_i)} \right] \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta} \end{aligned} \quad (132)$$

onde a evidência do modelo é representada pela diferença entre dois termos. Comparando as Equações (132) e (123), verifica-se que o primeiro termo após a igualdade em (132) trata-se do logaritmo natural da média da função de *verossimilhança* ponderada de acordo com a PDF a *posteriori* dos parâmetros, sendo uma quantificação da qualidade preditiva da classe de modelos \mathcal{M} em relação aos dados experimentais (CHEUNG; BECK, 2010; MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010). De semelhante modo, interpreta-se o segundo termo após a igualdade em (132) como a média do logaritmo natural da razão entre as PDFs a *posteriori* e a *priori* dos parâmetros, ponderada de acordo com a PDF a *posteriori* dos parâmetros (CHEUNG; BECK, 2010; MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010), sendo reconhecido como o ganho de informação a partir dos dados experimentais \mathbf{y}_E , denominado também como o termo de informação de Kullback-Leibler ou, ainda, como Fator de Occam (KULLBACK; LEIBLER, 1951; MACKAY, 2005; BURNHAM; ANDERSON, 1998). O primeiro termo penaliza a baixa qualidade em recuperação dos dados experimentais e o segundo termo, a complexidade da classe de modelos (CHEUNG; BECK, 2010; MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010). Portanto, de acordo com a interpretação da Equação (132), tem-se que a seleção de modelos Bayesiana contempla o critério da navalha de Occam (MACKAY, 2005; CHEUNG; BECK, 2010; MUTO; BECK, 2008; YUEN, 2010)

Ainda sobre a Equação (132), alguns detalhes cabem ser destacados em relação às influências das informações a *priori* no problema inverso de seleção de classes de modelos. Deve-se destacar que a PDF a *priori* dos parâmetros pode ter impacto significativo na PDF a *posteriori*, sobretudo quando os dados experimentais são limitados ou pouco informativos (TROTТА, 2008; MADIREDDY; SISTA; VEMAGANTI, 2015). Esse aspecto é importante pelo fato de que a PDF a *posteriori* dos parâmetros é a distribuição que pondera os dois termos que definem o logaritmo natural da evidência, conforme a Equação (132). Em relação ao primeiro termo após a igualdade na Equação (2.1.2), notadamente, se a regiões paramétricas de alta densidade de probabilidade são distintas entre a função de *verossimilhança* e a PDF a *priori* dos parâmetros, a tendência é a obtenção de valores reduzidos de qualidade de ajuste aos dados experimentais. Em relação ao segundo termo após a igualdade na Equação (132), quanto maior o ganho de informação a partir dos dados experimentais, menor o valor do logaritmo natural da evidência. Se a PDF a *priori* dos parâmetros é muito pouco informativa ou não-informativa, o ganho de informação

tende a ser muito alto, portanto haverá maior impacto nos valores das evidências pelo efeito de penalização por maior complexidade. Considerando o extremo oposto, se a informação *a priori* é muito informativa, ou seja $\pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathcal{M}_i) \simeq \pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i)$; o segundo termo tende a ser anulado e, portanto, reduz-se a penalização de classes de modelos mais complexas. Neste extremo, a evidência tenderá a mensurar apenas a qualidade de ajuste aos dados experimentais e, nesse aspecto, tendenciosa-se que modelos mais complexos sejam preferidos.

De forma similar à questão da determinação da PDF *a posteriori* dos parâmetros, por conta das complexidades da função de *verossimilhança*, com esta podendo ser altamente dimensional e não linear, soluções analíticas para a determinação das evidências das classes de modelos são tipicamente não tratáveis e metodologias numéricas diversas são propostas na literatura, conforme extensivamente revisado por Llorente et al. (2020). Entre elas, existem opções de algoritmos para a amostragem da PDF *a posteriori* dos parâmetros que realizam, paralelamente, a obtenção das evidências das classes de modelos. Tal como abordado por Llorente et al. (2020), tem-se, por exemplo, métodos baseados na verticalização da função de *verossimilhança*, como o algoritmo *Nested Sampling*, proposto por Skilling (2006), métodos baseados em algoritmos de Amostragem Sequencial por Importância (*Importance Sampling*) (NEAL, 2001; TOKDAR; KASS, 2010) e os métodos que combinam algoritmos de Amostragem Sequencial por Importância e métodos MCMC (LIU; LIANG; WONG, 2000; MARTINO et al., 2017).

Nesta tese, adota-se o algoritmo TMCMC, sendo este descrito sucintamente na Seção (2.4). Segundo Ching e Wang (2016), o método é uma combinação do método de Amostragem Sequencial por Importância (NEAL, 2001) com o algoritmo *Metropolis-Hastings* (METROPOLIS; ULAM, 1949; HASTINGS, 1970).

2.3 Média Bayesiana de modelos

Determinadas as plausibilidades *a posteriori* de todas as classes de modelos consideradas no problema inverso de seleção de classes de modelos, uma aplicação dos resultados obtidos consiste na realização da média Bayesiana de modelos. Nesse processo, é realizada a combinação das predições de todas as classes de modelos avaliadas. Definindo \mathbf{y} como o vetor que representa generalizadamente as predições de interesse avaliadas pelos modelos teóricos propostos, para uma i -ésima classe de modelos \mathcal{M}_i , a respectiva PDF das predições é dada, segundo Cheung e Beck (2010), por

$$\pi(\mathbf{y}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i) = \int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} \pi(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i)\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i)d\boldsymbol{\theta} \quad (133)$$

Pelo processo de média Bayesiana de modelos, a PDF das predições \mathbf{y} , considerando

todas as classes de modelos avaliadas no problema inverso de seleção de classes de modelos, é dada, segundo Cheung e Beck (2010), por

$$\pi(\mathbf{y}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}) = \sum_{i=1}^{N_{class}} \pi(\mathbf{y}|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}_i)P(\mathcal{M}_i|\mathbf{y}_E, \mathcal{M}) \quad (134)$$

2.4 Transitional Markov Chain Monte Carlo

O algoritmo TMCMC foi proposto por Ching e Chen (2007) como uma estratégia eficiente para amostragem de PDFs alvo de difícil explorabilidade: multidimensionais, multimodais, com picos acentuados e suportes estreitos ou apresentando regiões planas, quando um ou mais parâmetros não são identificáveis (MUTO; BECK, 2008). Ao invés da amostragem de uma PDF de difícil explorabilidade, se amostram PDFs intermediárias, tal que, a medida com que se avançam os estágios do algoritmo, as PDFs amostradas convergem para a PDF alvo. Além de gerar amostras da densidade de probabilidade a *posteriori* dos parâmetros de um dado modelo, o TMCMC fornece ainda uma estimativa da evidência da classe de modelos em questão. Nesta seção, é apresentado o algoritmo TMCMC de forma sucinta. Para uma leitura adicional sobre o método, recomendam-se os trabalhos dos autores Ching e Chen (2007) , Ching e Wang (2016), Muto e Beck (2008), Zhang e Yang (2014), Betz, Papaioannou e Straub (2016) e Safta et al. (2020).

O TMCMC inicia com N_s amostras independentes da densidade de probabilidade a *priori*. Nos estágios intermediários, as densidades de probabilidade amostradas são gradualmente modificadas de modo que, no último estágio do método, a densidade amostrada é a densidade de probabilidade alvo, a PDF a *posteriori*.

Em um dado estágio j , a densidade de probabilidade amostrada é dada por

$$\pi_j(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}, \mathbf{y}_E) \propto \pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_j} \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) \quad (135)$$

onde $p_j \in [0, 1]$ é tal que $p_0 = 0 < p_1 < p_2 < \dots < p_{m-1} < p_m = 1$, onde m é a quantidade total de estágios até a necessária convergência. Sendo assim, é fácil verificar, da Equação (135), que, para $j = 0$, tem-se $\pi_0(\boldsymbol{\theta})$ igual a densidade de probabilidade a *priori*, $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$, e, para $j = m$, tem-se $\pi_m(\boldsymbol{\theta})$ igual a densidade de probabilidade a *posteriori*, $\pi(\mathbf{y}_E|\mathcal{M}, \boldsymbol{\theta})$.

Do primeiro estágio de amostragem, $j = 0$, um conjunto de N_s amostras é obtido a partir da PDF a *priori*, $\{\boldsymbol{\theta}_{0,1}, \boldsymbol{\theta}_{0,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{0,N_s}\}$. Em cada j -ésimo estágio do algoritmo, tem-se as amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{j,1}, \boldsymbol{\theta}_{j,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j,N_s}\}$ respectivas à j -ésima PDF intermediária, $\pi_j(\boldsymbol{\theta})$, e amostras da PDF intermediária seguinte, $\{\boldsymbol{\theta}_{j+1,1}, \boldsymbol{\theta}_{j+1,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j+1,N_s}\}$, são obtidas por re-amostragem (CHING; CHEN, 2007; CHING; WANG, 2016).

Pelas definições de Ching e Chen (2007) e Ching e Wang (2016), o processo de re-amostragem a partir de um estágio $j > 0$ é conduzido considerando pesos de plausibilidade

normalizados $\bar{w}_{j,k}$ para cada k -ésima amostra por

$$\bar{w}_{j,k} = \frac{w_{j,k}}{\sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k}} \quad (136)$$

onde $w_{j,k}$ é o k -ésimo peso de plausibilidade associado à k -ésima amostra no j -ésimo estágio do TMCMC, dado por

$$w_{j,k} = \frac{\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}_{j,k}, \mathcal{M})^{p_{j+1}} \pi(\boldsymbol{\theta}_{j,k} | \mathcal{M})}{\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}_{j,k}, \mathcal{M})^{p_j} \pi(\boldsymbol{\theta}_{j,k} | \mathcal{M})} = \pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}_{j,k}, \mathcal{M})^{(p_{j+1}-p_j)} \quad (137)$$

Por Ching e Wang (2016), os pesos de plausibilidade são também referidos como pesos de importância.

Definindo \mathbf{w}_j como o vetor contendo todos os pesos de plausibilidade em um j -ésimo estágio, uma transição suave ao próximo estágio do TMCMC é alcançada pela escolha apropriada do expoente p_{j+1} , para a definição da próxima PDF intermediária $\pi_{j+1}(\theta)$. Ching e Chen (2007) propuseram a determinação de p_{j+1} tal que, para o vetor \mathbf{w}_j , o coeficiente de variação (COV) dos valores dos pesos de plausibilidade seja aproximadamente igual a um valor prescrito desejado. Sendo assim, o coeficiente p_{j+1} pode ser determinado por

$$p_{j+1} = \arg \min (|\text{COV}_{\mathbf{w}_j} - \text{COV}_p|) \quad (138)$$

onde $\text{COV}_{\mathbf{w}_j}$ é o coeficiente de variação do j -ésimo vetor de pesos de plausibilidade, \mathbf{w}_j , e COV_p é o valor prescrito. O coeficiente de variação dos pesos de plausibilidade é definido por

$$\text{COV}_{\mathbf{w}_j} = \frac{\sigma_{\mathbf{w}_j}}{\mu_{\mathbf{w}_j}} \quad (139)$$

onde $\mu_{\mathbf{w}_j}$ e $\sigma_{\mathbf{w}_j}$ são, respectivamente, a média e o desvio padrão do vetor \mathbf{w}_j . Ching e Chen (2007) recomendaram um coeficiente de variação prescrito igual a uma unidade, ou seja, que o desvio padrão dos pesos de plausibilidade seja aproximadamente igual à média. Quanto menor o coeficiente de variação prescrito, mais suave é a transição da PDF de um estágio para a PDF do estágio seguinte e, conseqüentemente, maior será a quantidade de estágios necessária para se atingir a densidade de probabilidade a *posteriori*, a partir da densidade a *priori*.

Para se evitar que a quantidade de amostras distintas seja reduzida com a evolução dos estágios no TMCMC, para cada estado re-amostrado é realizado um passo de MH (METROPOLIS et al., 1953; HASTINGS, 1970). A distribuição proposta utilizada para a geração aleatória de um estado candidato pelo algoritmo MH é uma PDF Gaussiana,

com média no estado re-amostrado e com matriz de covariância dada por

$$\sum_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}} = \alpha^2 \sum_{k=1}^{N_s} \left[\boldsymbol{\theta}_{j,k} - \sum_{l=1}^{N_s} \bar{w}_{j,l} \boldsymbol{\theta}_{j,l} \right] \left[\boldsymbol{\theta}_{j,k} - \sum_{l=1}^{N_s} \bar{w}_{j,l} \boldsymbol{\theta}_{j,l} \right]^T \quad (140)$$

onde α é o fator de escala da matriz de covariância (CHING; CHEN, 2007). Ching e Chen (2007) recomendaram $\alpha = 0.2$ e Ching e Wang (2016) utilizaram $\alpha = 1$.

Ao final do m -ésimo estágio do TMCMC, amostrada a PDF alvo, a evidência do modelo é obtida considerando as médias dos pesos de plausibilidade registrados em cada estágio por (CHING; CHEN, 2007)

$$S_j = \frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k} \quad (141)$$

e executando o seguinte produtório

$$\pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}) = \prod_{j=1}^m S_j \quad (142)$$

O produtório de S_j como estimador da evidência de uma classe de modelos pode ser demonstrado conforme segue. O desenvolvimento aqui realizado é similar ao apresentado pelos autores Ching e Chen (2007), Yuen (2010) e Ching e Wang (2016). O somatório na Equação (141) é associado a uma integração de Monte Carlo, fornecendo a seguinte aproximação

$$S_j = \frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k} \simeq \frac{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} [\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})]^{p_{j+1}} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}}{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} [\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})]^{p_j} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}} \quad (143)$$

Com base na Equação (142), chega-se à seguinte expressão

$$\prod_{j=1}^m S_j \simeq \frac{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} [\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})]^{p_m} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}}{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} [\pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})]^{p_0} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}} = \frac{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} \pi(\mathbf{y}_E | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}}{\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta}} \quad (144)$$

Por fim, como $\int_{\mathbb{R}^{N_{\boldsymbol{\theta}}}} \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} = 1$, segue que

$$\prod_{j=1}^m S_j \simeq \int_{\mathcal{R}(\boldsymbol{\theta})} \pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}, \boldsymbol{\theta}) \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} = \pi(\mathbf{y}_E | \mathcal{M}) \quad (145)$$

Algumas observações devem ser destacadas. O desempenho do método tende a ser satisfatório em PDFs de difícil explorabilidade, segundo Ching e Wang (2016), porque, quando amostrada uma PDF com picos acentuados ou múltiplos modos, esses evoluem de forma gradativa a medida com que se avançam os estágios do TMCMC. Além disso,

conforme abordado por Ching e Wang (2016), o uso da Equação (140) dispensa a necessidade que se teria, quando do uso do MH convencional, de uma calibração manual da distribuição auxiliar, uma vez que se considera a covariância amostral dos estados em cada estágio do TMCMC. Nesse sentido, tem-se apenas o fator de escala α que deve ser escolhido de forma que se mantenha uma taxa de aceitação razoável nos passos de MH para que a cadeia de Markov evolua satisfatoriamente, evitando-se a redução de estados distintos com o avanço dos estágios do TMCMC. Cabe considerar ainda algumas observações realizadas pelos autores Safta et al. (2020), de que as estimativas pelo TMCMC tendem a ser mais precisas com maior quantidade de amostras N_s por estágio e menor coeficiente de variação prescrito COV_p .

Na Subseção 2.4.1 é apresentado o algoritmo resumido do TMCMC.

2.4.1 Algoritmo TMCMC

Segue a descrição passo a passo do algoritmo TMCMC, conforme a versão clássica por Ching e Chen (2007) e por Ching e Wang (2016). A estrutura de apresentação do algoritmo ocorre, em similaridade, aos apresentados, também, pelos autores Muto e Beck (2008), Zhang e Yang (2014) e Betz, Papaioannou e Straub (2016).

- 1: Obtenção do conjunto de amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{0,1}, \boldsymbol{\theta}_{0,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{0,N_s}\}$, que são obtidas da PDF a *priori*. Inicia-se com o expoente $p_0 = 0$ e com o contador de estágios $j = 0$. O algoritmo segue repetindo os passos 2 e 3 até que p_{j+1} seja igual ou maior que 1. Se maior, considera-se $p_{j+1} = 1$ e termina-se o algoritmo executando, pela última vez, o passo 3.
- 2: Cálculo de p_{j+1} resolvendo a Equação (139). Caso $p_{j+1} > 1$, redefine-se como $p_{j+1} = 1$. Deve-se calcular o vetor de pesos de plausibilidade absolutos \boldsymbol{w}_j pela Equação (137), os respectivos normalizados $\bar{\boldsymbol{w}}_j$ pela Equação (136) e o parâmetro S_j pela Equação (141).
- 3: Construção de um conjunto de amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{j+1,1}, \boldsymbol{\theta}_{j+1,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j+1,N_s}\}$ por re-amostragem a partir do conjunto de amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{j,1}, \boldsymbol{\theta}_{j,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j,N_s}\}$ e execuções do algoritmo MH. Esse passo é repetido N_s vezes com $k = 1$ até $k = N_s$. Em cada k -ésima iteração, determina-se um novo componente $\boldsymbol{\theta}_{j+1,k}$. Iniciando com $k = 1$ e definindo $\boldsymbol{\theta}^c = \boldsymbol{\theta}$, seguem os passos 3.1 e 3.2, 3.3 e 3.4.

3.1 Realização da re-amostragem. Executa-se a amostragem aleatória de um índice l em $[1, 2, \dots, N_s]$ de acordo com a distribuição de probabilidades representada pelo vetor de pesos de plausibilidade normalizados $\bar{\boldsymbol{w}}_j$, com $\bar{w}_{j,l} =$

$$\frac{w_{j,l}}{\sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k}}.$$

- 3.2 Execução de um passo de MH. O estado candidato $\boldsymbol{\theta}^*$ é gerado a partir de uma distribuição auxiliar Gaussiana centrada em $\boldsymbol{\theta}_{j,l}^c$, com a matriz de covariância calculada dada pela Equação (140), portanto $\boldsymbol{\theta}^* \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\theta}_{j,l}^c, \boldsymbol{\Sigma}_j)$. Caso ocorra aceitação, $\boldsymbol{\theta}_{j+1,k} = \boldsymbol{\theta}_{j,l}^*$ e $\boldsymbol{\theta}_{j,l}^c = \boldsymbol{\theta}_{j,l}^*$, e, caso ocorra rejeição, $\boldsymbol{\theta}_{j+1,k} = \boldsymbol{\theta}_{j,l}^c$.
- 3.3 Se $k < N$, atualiza-se o valor de k operando $k = k + 1$. Se $k = N_s$, retorna-se ao passo 2. Se $p_j = 1$, encerra-se o algoritmo.

3 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, resultados numéricos de solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos são apresentados e discutidos. Como exemplos de aplicação, duas nanoestruturas são simuladas por conta da importância que elas possuem em Nanociência e Nanotecnologia (RAMSDEN, 2011), um nanotubo de carbono de parede única (SWCNT - *Single Walled Carbon Nanotube*) (LIJIMA; ICHIHASHI, 1993) e uma lâmina de grafeno de camada única (SLGS - *Single Layer Graphene Sheet*) (NOVOSELOV et al., 2004). Dado que as dimensões destes sistemas são da ordem de nanômetro, a modelagem dos mesmos é feita a partir da Teoria Não-Local de Eringen (1983), como apresentado no Capítulo 1. Adicionalmente, adota-se a hipótese de que o comportamento dinâmico destes sistemas está sujeito a efeitos de dissipação. O problema direto fornece, como resultados, os parâmetros modais, constituindo-se das frequências naturais e das razões de amortecimento dos sistemas considerados. Os problemas inversos de estimação de parâmetros são construídos considerando que os parâmetros desconhecidos, e de interesse primário, são os parâmetros dos modelos constitutivos utilizados para a descrição do amortecimento estrutural, assim como o parâmetro de escala não-local. A descrição detalhada dos sistemas e os resultados simulados são apresentados nas subseções dedicadas desse capítulo. Para os problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, premissas centrais são assumidas, cenários diferentes para a construção dos problemas inversos são propostos e são avaliados os respectivos impactos na determinação dos parâmetros e na seleção das classes de modelos.

3.1 Construção e solução dos problemas inversos: Metodologia adotada e investigações objetivadas por inferência Bayesiana

Como escopo geral das análises dos problemas inversos de estimação de parâmetros e de seleção de classes de modelos, as premissas e as diferentes hipóteses gerais adotadas na construção dos problemas inversos são resumidas nas subseções que seguem, sendo elas comuns a ambos os sistemas considerados, nanotubo de carbono como nanoviga e lâmina de grafeno como nanoplaca.

3.1.1 Geração de dados experimentais sintéticos

O problema direto consiste na determinação dos parâmetros modais do sistema. Dessa forma, para n_v modos de vibração, o vetor de resposta generalizado é dado por

$$\mathbf{y} = [\omega_1 \ \omega_2 \ \dots \ \omega_{n_v} \ \zeta_1 \ \zeta_2 \ \dots \ \zeta_{n_v}]^T \quad (146)$$

onde ω_n e ζ_n são, respectivamente, as frequências naturais e as razões de amortecimento do n -ésimo modo de vibração.

Dados experimentais são gerados sinteticamente por

$$\mathbf{y}_E = \mathbf{y}_r + \boldsymbol{\epsilon} \quad (147)$$

onde \mathbf{y}_r é vetor contendo os parâmetros modais preditos por um modelo de referência e $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}; \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}})$ é o vetor de ruído aditivo Gaussiano de média nula e matriz de covariância dada por

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{\omega\omega} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Sigma}_{\zeta\zeta} \end{bmatrix} \quad (148)$$

onde $\boldsymbol{\Sigma}_{\omega\omega}$ e $\boldsymbol{\Sigma}_{\zeta\zeta}$ são $n_v \times n_v$ matrizes de variância diagonais que descrevem as variâncias dos ruídos aditivos Gaussianos para as frequências naturais e para as razões de amortecimento, respectivamente. De acordo com dados experimentais dispostos na literatura (MELLINGER; DÖHLER; MEVEL, 2016; SOUZA et al., 2019), associa-se um desvio padrão relativo à média de 0,3% para a variância dos erros experimentais correspondentes às frequências naturais, enquanto que um desvio padrão relativo à média de 3% para os erros de medição experimental associados às razões de amortecimento (FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020).

3.1.2 Os modelos de referência e as classes de modelo propostas nos problemas inversos

Nos modelos de referência, utilizados para a geração dos dados experimentais sintéticos, as propriedades viscoelásticas são consideradas com variabilidade espacial. Por outro lado, no processo de construção dos problemas inversos, são propostos modelos simplificados em que todas as propriedades são homogêneas espacialmente. Dessa forma, a expectativa é que nenhuma das classes de modelos consideradas nos problemas inversos seja capaz da perfeita representação do modelo de referência.

Nos modelos de referência, a variabilidade espacial das propriedades viscoelásticas é introduzida modelando-se os parâmetros viscoelásticos $E_\infty(\mathbf{x})$, $E_i(\mathbf{x})$ e $\Omega_i(\mathbf{x})$ como

campos aleatórios Gaussianos, representados a partir de decomposições espectrais por meio da expansão de Karhunen-Loève (SPANOS; GHANEM, 1989). A decomposição espectral de Karhunen-Loève (KL), para os modelos de viga (unidimensional) e de placa (bidimensional), é descrito no Apêndice A desta tese.

Como classes de modelos propostas para inferência em problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, de uma forma geral, as seguintes opções são abordadas.

Classe de modelos \mathcal{M}_0 : Classe de modelos em que, de forma *ad-hoc*, os mecanismos de dissipação do sistema são representados unicamente a partir do modelo de amortecimento proporcional, comumente utilizado em análises de dinâmica estrutural. Portanto, adota-se a hipótese que os amortecimentos viscosos são proporcionais às matrizes de massa e rigidez dos modelos de elementos finitos (MEF) dos sistemas analisados.

Classes de modelos \mathcal{M}_{NI} , com $NI \geq 1$: Classes de modelos com NI variáveis internas (VI) no modelo viscoelástico proposto no Capítulo 1. Nessas classes de modelos, o amortecimento viscoso proporcional à velocidade é adotado como nulo. Portanto, nas classes de modelos \mathcal{M}_{NI} , considera-se que os mecanismos de dissipação de energia podem ser representados a partir do modelo constitutivo viscoelástico não-local dado pela Equação (30), considerando que os parâmetros viscoelásticos são todos homogêneos espacialmente.

Em suma, as classes de modelos propostas nos problemas inversos são diferenciadas pela quantidade de variáveis internas ou com a adoção da hipótese de amortecimento viscoso proporcional. Dessa forma, além do fato dessas classes de modelos não considerarem a variabilidades espaciais dos parâmetros, tem-se as diferenças em suas capacidades preditivas. Apesar da variabilidade espacial, que somente é levada em conta no modelo de referência, espera-se, pela solução do problema inverso de seleção de classes de modelos, que a classe de modelos mais adequada para a representação do modelo de referência seja selecionada.

3.1.3 Hipóteses para a função de *verossimilhança*

Dentre as análises pretendidas de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, consideram-se duas hipóteses para a construção da função de *verossimilhança*, identificadas como as hipóteses A e B a seguir.

Hipótese A: A estrutura da variância $\Sigma_{\epsilon\epsilon}$ dos dados experimentais é adotada como perfeitamente conhecida e as discrepâncias de modelagem, entre o modelo de referência e as classes de modelos consideradas na construção do problema inverso, são negligenciadas.

Com essa hipótese, a formulação para a função de *verossimilhança* é dada por

$$\pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_y} \det(\boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon})}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}))^T \boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon}^{-1} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})) \right] \quad (149)$$

Hipótese B: A estrutura da variância dos dados experimentais $\boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon}$ é adotada como perfeitamente conhecida, mas são consideradas as discrepâncias de modelagem entre o modelo de referência e as classes de modelos propostas. Com essa hipótese, adota-se a formulação para a função de *verossimilhança* conforme a Equação (122), onde a matriz de variância do erro global, $\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\epsilon}\tilde{\epsilon}}$, é assumida como desconhecida. A Equação (122) é rerepresentada a seguir.

$$\pi(\mathbf{y}_E|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_y} \det(\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\epsilon}\tilde{\epsilon}})}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}))^T \boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\epsilon}\tilde{\epsilon}}^{-1} (\mathbf{y}_E - \mathbf{A}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})) \right] \quad (150)$$

Com a hipótese da estrutura da variância dos dados experimentais $\boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon}$ ser conhecida, adota-se a seguinte parametrização.

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\tilde{\epsilon}\tilde{\epsilon}} = \beta^2 \boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon} \quad (151)$$

onde β é um fator de escala aplicado à covariância do ruído experimental, considerado como variável a ser estimada, com a respectiva PDF a *priori* dada por $\pi(\beta^2) = \mathcal{IG}(\beta^2|\kappa, \lambda)$, onde \mathcal{IG} é a distribuição Gama inversa dada por

$$\mathcal{IG}(\beta^2|\kappa, \lambda) = \frac{\lambda^\kappa}{\Gamma(\kappa)} (\beta^2)^{-(\kappa+1)} \exp \left(\frac{-\lambda}{\beta^2} \right) \quad (152)$$

onde Γ é a função Gama, κ é o parâmetro de forma e λ é o parâmetro de escala (EHLERS, 2011). A escolha da distribuição Gama inversa é inspirada nos trabalhos dos autores Brynjarsdóttir e O'Hagan (2014) e Lecomte et al. (2012). As distribuições Gama e Gama inversa são comumente adotadas com a finalidade de tratabilidade analítica (EHLERS, 2011; LECOMTE et al., 2012). Entretanto, essa propriedade não é explorada nesta tese.

A Equação (151) representa uma tentativa de se aproximar a soma do erro experimental e do erro de modelagem por uma variável aleatória Gaussiana com média nula e variância $\beta^2 \boldsymbol{\Sigma}_{\epsilon\epsilon}$. Apesar desta hipótese ser, de certa forma, simplista, esta se mostrou bastante útil nas aplicações que serão apresentadas neste trabalho.

3.1.4 Metodologia de solução dos problemas inversos e análise do impacto da escolha da PDF a *priori* dos parâmetros

Sobre os conhecimentos a *priori*, em relação às classes de modelos e às propriedades dos sistemas modelados, o cenário mais geral é aquele em que poucas informações existem sobre os parâmetros incertos e sobre as plausibilidades relativas entre as classes de modelos propostas. Por exemplo, para o parâmetro não-local, o intervalo entre 0 nm e 2 nm é comumente indicado para nanotubos de carbono e lâminas de grafeno (KARLIČIĆ et al., 2016), sendo razoável uma PDF a *priori* marginal com distribuição uniforme $\pi(e_0a) = \mathcal{U}[0; 2]$ nm para ambos os casos de aplicação, SWCNT e SLGS. Sobre os parâmetros viscoelásticos, com relação aos dados experimentais, o nível de amortecimento maior em determinados modos de vibração pode indicar uma vaga noção sobre regiões de maior densidade de probabilidade para os recíprocos das constantes de tempo de relaxação, Ω_i , por exemplo. Contudo, apesar da possibilidade de alguma inferência a *priori* de certas propriedades viscoelásticas do sistema, no geral, quando propostas múltiplas variáveis internas em uma classe de modelos, tende a ser muito complicado distinguir bandas de frequência específicas a cada um dos i -ésimos inversos das constantes de tempo de relaxação, Ω_i . Face a possibilidade de PDFs a *priori* pouco informativas e PDFs a *posteriori* com suportes relativamente estreitos, uma estratégia Bayesiana específica é adotada para se solucionar adequadamente os problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos, conforme é abordado a seguir.

Na construção dos problemas de estimação de parâmetros, para os parâmetros das classes de modelos, são adotadas distribuições uniformes e Gaussianas, enquanto que distribuições Gama inversas são adotadas para o parâmetro de escala β . Adota-se a notação $\mathcal{U}[x_1; x_2]$ para representar a distribuição uniforme no intervalo real $[x_1; x_2]$, com $x_1 < x_2$, e a notação $\mathcal{N}(\mu; \sigma^2)$ para a PDF Gaussiana com média μ e variância σ^2 .

Para a amostragem da PDF a *posteriori* dos parâmetros, o algoritmo TMCMC proposto por Ching e Chen (2007) é adotado. Em análises preliminares, verificou-se que, de fato, o suporte das PDFs a *posteriori* tendem a ser consideravelmente reduzidos em relação ao suporte das PDFs a *priori* adotadas inicialmente, pois o nível de informação a *priori* inicial é consideravelmente limitado. Mais ainda, por conta da pouca informação a *priori*, sobretudo em relação aos parâmetros viscoelásticos das classes de modelos propostas, PDFs a *posteriori* multimodais e planas foram obtidas quando consideradas as classes de modelos com duas ou mais variáveis internas. Nestes casos, verificou-se que, adotando o algoritmo TMCMC clássico, há uma tendência de baixa qualidade de amostragem da PDF a *posteriori* do parâmetros, principalmente nas classes de modelos que conferem um problema inverso de maior complexidade.

Uma vez que otimizações do algoritmo TMCMC clássico estão fora do escopo das análises propostas, é realizada a condução de uma segunda solução dos problemas

inversos de estimação de parâmetros, adotando-se PDFs a *priori* redimensionadas com base nos resultados obtidos da primeira solução. A partir dessa metodologia, resultados mais acurados para os problemas inversos de estimação de parâmetros são obtidos, uma vez que se torna possível inferir suportes mais estreitos para as PDFs a *priori*, incluindo a distinção de diferentes bandas de frequência para os inversos das constantes de tempo de relaxação. Ademais, pelo formalismo Bayesiano ao nível do problema inverso de seleção de classes de modelos, considera-se que as plausibilidades das classes de modelos são atualizadas com a primeira solução do problema inverso de seleção de modelos e utilizadas como expectativas a *priori* na segunda solução, retornando, portanto, a atualização em dois estágios das plausibilidades das classes de modelos.

A partir da metodologia proposta, considera-se avaliar o impacto, nos resultados de seleção de classes de modelos, de diferentes níveis informativos de conhecimento a *priori* em relação aos parâmetros estimados. Mais especificamente, em seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana, ao se introduzir diferentes níveis de informações a *priori* sobre os parâmetros, as evidências dos modelos podem ter seus valores alterados de forma significativa, sobretudo em relação ao termo de ganho de informação, identificado na Equação (132). Naturalmente, propõem-se níveis de conhecimento a *priori* diferentes nas duas execuções do algoritmo TMCMC, que serão capturados pelo termo de ganho de informação. As duas execuções do algoritmo TMCMC são nomeadas por Solução-1 e Solução-2, com as características brevemente resumidas a seguir.

Solução-1: É a solução obtida da primeira execução do TMCMC, onde o conhecimento a *priori* em relação aos parâmetros é mais vago. As PDFs a *priori* são escolhidas a partir de dados na literatura, informando, para a maioria dos parâmetros, apenas a expectativa de ordem de grandeza. Dessa forma, o suporte da PDF a *posteriori* tende a ser, de uma forma geral, relativamente muito estreito em relação ao da PDF a *priori* e, nas classes de modelos com mais de uma variável interna, as PDFs a *posteriori* tendem a possuir suportes com formatos mais complexos, tendendo-se à ocorrência de multimodalidade ou de regiões planas na PDF a *posteriori*.

Solução-2: É a segunda execução do TMCMC, onde são estabelecidos suportes mais estreitos para as PDFs a *priori* dos parâmetros, incluindo distinguir diferentes bandas de frequência para os inversos das constantes de tempo de relaxação. Essas PDFs são obtidas a partir da primeira solução do problema inverso de estimação de parâmetros, considerando os valores mínimos e máximos dos estados amostrados. Nessas condições, um melhor desempenho do algoritmo de amostragem é esperado pelo fato das PDFs a *priori* serem mais informativas, conferindo um problema inverso de menor complexidade para a exploração da PDF a *posteriori*. Mais especificamente, o suporte da PDF a *priori* é mais próximo ao da PDF a *posteriori* e a distinção de bandas de frequências específicas

aos inversos das constantes de tempo de relaxação tende a reduzir a ocorrência de multimodalidade e de regiões planas na PDF a *posteriori* dos parâmetros.

3.1.5 Plausibilidades a *priori* das classes de modelos

A sensibilidade do ranqueamento das classes de modelos em relação às plausibilidades a *priori* associadas às classes de modelos, antes da primeira execução do TMCMC (Solução-1), é avaliada considerando dois cenários. No primeiro, as classes de modelos são igualmente plausíveis a *priori*. Ou seja, considerando um conjunto de classes de modelos $\mathcal{M} = \{\mathcal{M}_0, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_{N_{class}}\}$, todas classes são consideradas equiprováveis, $P(\mathcal{M}_0|\mathcal{M}) = \dots = P(\mathcal{M}_{N_{class}}|\mathcal{M}) = 1/N_{class}$. No segundo, plausibilidades a *priori* iniciais diferentes são atribuídas. Em resumo, são consideradas diferentes possibilidades para as probabilidades a *priori* das classes de modelos, com intuito de se avaliar a robustez da estratégia com relação ao estado inicial de conhecimento acerca das classes de modelos, as expectativas existentes antes de serem considerados os dados experimentais.

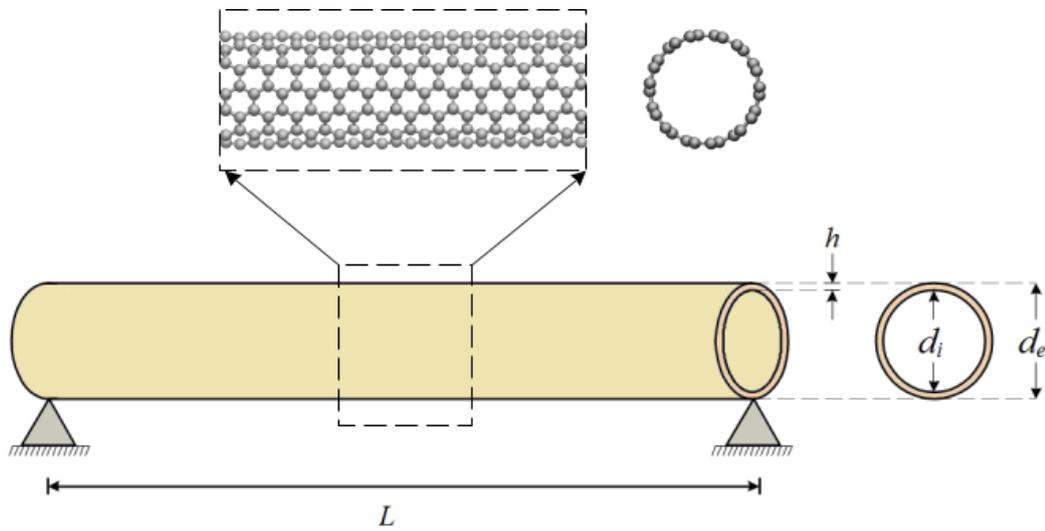
3.2 Resultados Numéricos: Nanotubo de carbono

Esta seção é dedicada ao caso de aplicação de um nanotubo de carbono de parede única como viga viscoelástica não-local em vibração transversal. É realizada uma divisão lógica de subseções para o melhor entendimento das análises propostas envolvendo o modelo viscoelástico não-local de viga de Euler-Bernoulli apresentado no Capítulo 1. Na Subseção 3.2.1 é definido e discutido o modelo de referência. Na Subseção 3.2.2 apresenta-se a geração dos dados experimentais. Na Subseção 3.2.3 apresentam-se as classes de modelos propostas para inferência, as PDFs a *priori* iniciais adotadas para os parâmetros e os problemas inversos propostos para serem solucionados. Por fim, nas Subseções 3.2.4 e 3.2.5 são apresentados e discutidos os resultados de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos.

3.2.1 Descrição geral do sistema e do modelo de referência: SWCNT

Ao se adotar um modelo teórico contínuo, o nanotubo de carbono é concebido como um tubo contínuo ao invés de um sistema discreto de átomos de carbono, conforme ilustrado na Figura 1. O SWCNT é apresentado como viga em condição de contorno de simples apoio em ambas as extremidades. Por essas condições de contorno nas extremidades, tem-se $w = 0$ e $M = 0$ em $x = 0$ e em $x = L$.

Figura 1 - Sistema: SWCNT como nanoviga simplesmente apoiada. Modelo contínuo não-local idealizado



Fonte: O autor, 2021.

A área de seção transversal A e o segundo momento de inércia de área da seção transversal I são calculados, respectivamente, por

$$A = \frac{\pi (d_e^2 - d_i^2)}{4} \quad (153)$$

$$I = \frac{\pi (d_e^4 - d_i^4)}{64} \quad (154)$$

onde d_e e d_i são os diâmetros externo e interno, dados, respectivamente, por $d_e = d + h$ e $d_i = d - h$, onde d é o diâmetro médio e h é a espessura. As propriedades geométricas do sistema estão ilustradas na Figura 1.

Tabela 2 - Propriedades geométricas, de amortecimento viscoso, massa e não-localidade no modelo de referência: SWCNT

Propriedade	Unidade	Símbolo	Valor
Parâmetro não-local	nm	$e_0 a$	1,5
Comprimento	nm	L	10
Espessura efetiva	nm	h	0,342
Diâmetro médio	nm	d	1
Massa Específica	kg/m ³	ρ	2240
Coefficiente de amortecimento viscoso	Ns/m ²	C'_w	0

Fonte: O autor, 2021.

Para o modelo de referência, o amortecimento viscoso proporcional à velocidade e as propriedades geométricas, de massa e não-localidade ocorrem conforme a Tabela 2. Todos os valores paramétricos estão em concordância com os valores comumente adotados na literatura não-local para nanotubos de carbono de parede única (WANG; LI, 2012; ARASH; WANG, 2012). Por exemplo, os valores para o diâmetro e para o comprimento do nanotubo, apresentados na Tabela 2, foram adotados também por Wang e Varadan (2006) e Wang, Zhang e He (2007). A espessura efetiva e a massa específica foram adotadas por Lei et al. (2013) e Lei, Adhikari e Friswell (2013).

Tabela 3 - Propriedades estatísticas nominais dos parâmetros viscoelásticos: SWCNT

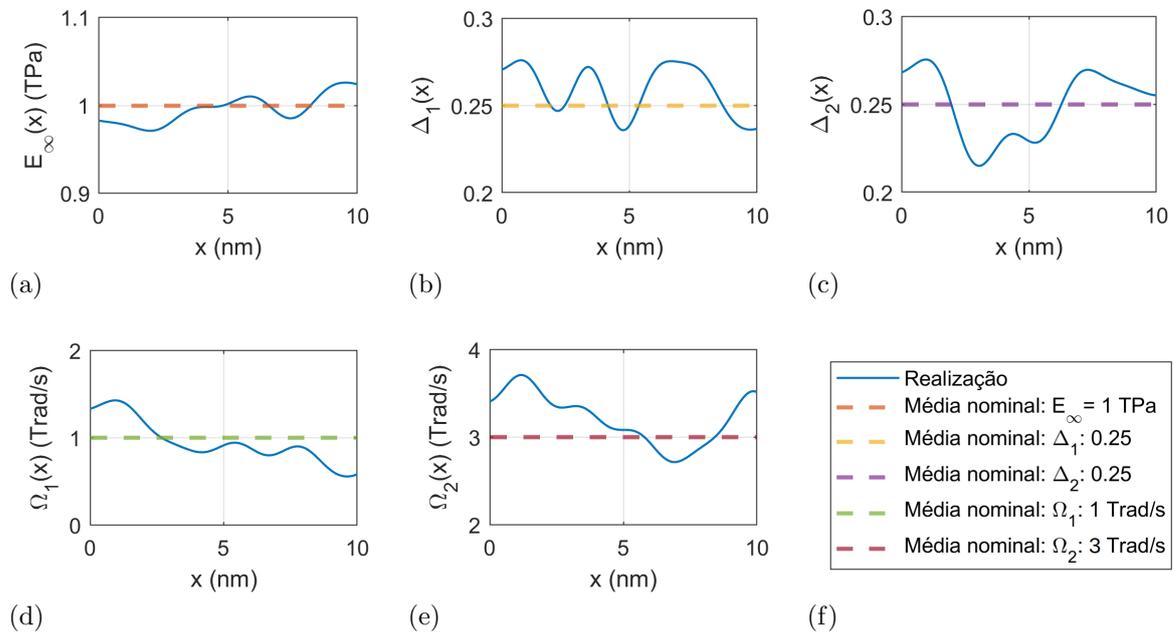
Propriedade	Unidade	Símbolo	Média Nominal	Desvio Padrão Nominal
Módulo de baixa frequência	TPa	$E_\infty(x)$	1	0,025
Amplitude de relaxação 1	-	$\Delta_1(x)$	0,25	0,025
Amplitude de relaxação 2	-	$\Delta_2(x)$	0,25	0,025
Inverso do tempo de relaxação 1	Trad/s	$\Omega_1(x)$	1	0,3
Inverso do tempo de relaxação 2	Trad/s	$\Omega_2(x)$	3	0,3

Fonte: O autor, 2021.

Em relação ao comportamento viscoelástico do sistema, pelo modelo de referência, este é descrito por um módulo viscoelástico com duas variáveis internas, sendo as propriedades viscoelásticas possuidoras de variabilidade espacial ao longo da coordenada espacial x da viga. Dessa forma, os parâmetros viscoelásticos $E_\infty(x)$, $\Delta_1(x)$, $\Delta_2(x)$, $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$ são modelados como campos aleatórios Gaussianos, com as médias e os desvios padrão nominais apresentados na Tabela 3. A variabilidade espacial aleatória é simulada utilizando a técnica da decomposição espectral pela expansão de Karhunen–Loève (KL) (SPANOS; GHANEM, 1989), brevemente descrita na Seção A.1 do Apêndice A para domínios unidimensionais. Com esta metodologia, um modelo de elementos finitos estocástico, não apresentado explicitamente nessa tese, é obtido a partir da integração das expansões de Karhunen–Loève para os parâmetros $E_\infty(x)$, $E_i(x)$ e $\Omega_i(x)$ junto às funções de forma que definem as matrizes elementares \mathbf{K}_∞^e , \mathbf{K}_i^e e $\mathbf{K}_{\Omega_i}^e$ do modelo de viga, as Equações (63), (64) e (65), respectivamente, apresentadas na Seção 1.4.3. No modelo de referência, todos os campos aleatórios são gerados com comprimento de correlação $b_x = L/3$ e 10 termos na expansão KL.

A realização dos campos aleatórios que definem os parâmetros viscoelásticos é apresentada na Figura 2. As propriedades viscoelásticas do módulo complexo local, em função da coordenada espacial x e da frequência ω , são apresentadas na Figura 3. É válido destacar que as propriedades viscoelásticas apresentadas na Figura 3 são referentes ao módulo complexo do modelo local.

Figura 2 - Realizações de campos aleatórios. Parâmetros: $E_\infty(x)$, $\Delta_i(x)$ e $\Omega_i(x)$: SWCNT

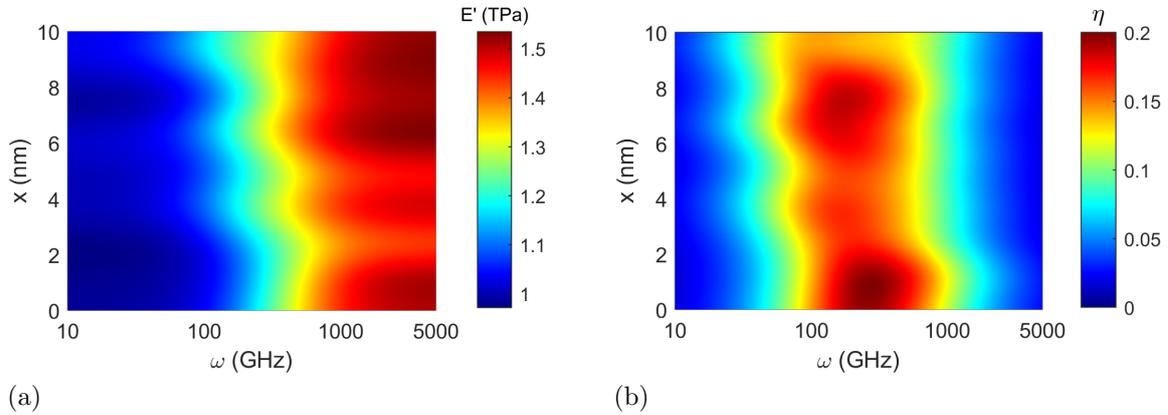


- Legenda: (a) Módulo de baixa frequência: $E_\infty(x)$
 (b) Amplitude de relaxação proporcional 1: $\Delta_1(x)$
 (c) Amplitude de relaxação proporcional 2: $\Delta_2(x)$
 (d) Inverso da constante de tempo de relaxação 1: $\Omega_1(x)$
 (e) Inverso da constante de tempo de relaxação 2: $\Omega_2(x)$
 (f) Legenda da codificação por cores

Fonte: O autor, 2021.

Algumas observações devem ser realizadas com relação às propriedades viscoelásticas definidas na Tabela 3 e nas Figuras 2 e 3. Na literatura, o módulo de elasticidade para SWCNTs é comumente inferido por $E \simeq 1$ TPa quando é adotada a espessura efetiva do nanotubo em torno de 0,34 nm (WENXING; CHANGCHUN; WANZHAO, 2004; HUANG; WU; HWANG, 2006; SHOKRIEH; RAFIEE, 2010). No presente caso, o mesmo valor foi considerado como média nominal para o módulo de relaxação de baixa frequência. Ademais, as propriedades viscoelásticas apresentadas na Tabela 3 ocorrem em concordância de ordem grandeza com os valores utilizados por Lei et al. (2013). Sobre a expansão KL, o comprimento de correlação $b_x = L/3$ foi adotado com base no artigo dos autores Adhikari e Friswell (2010) e a quantidade de termos da expansão KL de forma que o aspecto das curvas fossem relativamente suaves ao longo do domínio, conforme visualmente se verifica na Figura 2. Neste ponto, destaca-se que uma maior quantidade de termos tenderia a variações espaciais de maiores frequências nas curvas geradas, com oscilações mais abruptas nos valores dos parâmetros. A partir dos campos aleatórios gerados, tal como se verifica na Figura 3, tem-se o módulo de armazenamento com consi-

Figura 3 - Propriedades viscoelásticas do modelo de referência em função do domínio espacial da viga. Módulo complexo local - Módulo de armazenamento $E'(x, \omega)$ e fator de perda $\eta(x, \omega)$: SWCNT



Legenda: (a) Módulo de armazenamento $E'(x, \omega)$ em TPa.

(b) Fator de perda $\eta(x, \omega)$.

Fonte: O autor, 2021.

derável variabilidade em todo o domínio da viga e em todas as frequências, enquanto que um fator de perda com variabilidade bastante expressiva na região entre 50 GHz e 2000 GHz.

Tabela 4 - Análise de convergência de malha pelo MEF: SWCNT

Parâmetro	Quantidade de Elementos Finitos						
	5	10	15	20	50	100	200
ω_1 (GHz)	119,00	118,99	118,99	118,99	118,99	118,99	118,99
ω_2 (GHz)	419,01	418,39	418,35	418,34	418,34	418,34	418,34
ω_3 (GHz)	775,72	770,09	769,75	769,69	769,67	769,67	769,67
ω_4 (GHz)	1151,85	1129,68	1128,20	1127,94	1127,82	1127,82	1127,82
ω_5 (GHz)	1627,79	1478,58	1474,10	1473,30	1472,92	1472,91	1472,91
ω_6 (GHz)	2006,29	1829,07	1817,77	1815,78	1814,84	1814,82	1814,81
ζ_1	0,0865	0,0865	0,0865	0,0865	0,0865	0,0865	0,0865
ζ_2	0,0818	0,0818	0,0818	0,0818	0,0818	0,0818	0,0818
ζ_3	0,0599	0,0603	0,0603	0,0603	0,0603	0,0603	0,0603
ζ_4	0,0437	0,0449	0,0450	0,0450	0,0450	0,0450	0,0450
ζ_5	0,0325	0,0354	0,0355	0,0355	0,0355	0,0355	0,0355
ζ_6	0,0270	0,0292	0,0294	0,0294	0,0294	0,0294	0,0294

Fonte: O autor, 2021.

Para o modelo de elementos finitos de viga, analisa-se a convergência de malha pelos parâmetros modais até o sexto modo de vibração, conforme apresentado na Tabela 4. A partir dos parâmetros modais obtidos, foi considerado que, para a banda de frequências analisadas, 20 elementos finitos é uma quantidade satisfatória para as análises a serem conduzidas utilizando o MEF de viga. O maior erro relativo percentual com essa configuração de malha ocorre em torno de 0,053% para a frequência natural no sexto modo de vibração, comparando-se com os resultados obtidos com a malha de 200 elementos finitos, que também constam na Tabela 4.

Tabela 5 - Parâmetros modais. Modelo de referência: SWCNT

Modo de vibração	ω_r^b (GHz)	ζ_r^b
1	118,99	0,0865
2	418,34	0,0818
3	769,69	0,0603
4	1127,94	0,0450
5	1473,30	0,0355
6	1815,78	0,0294

Fonte: O autor, 2021.

Os valores de referência para os parâmetros modais do sistema, as frequências naturais e as razões de amortecimento dos seis primeiros modos de vibração, são apresentadas na Tabela 5. Nota-se que as frequências naturais ocorrem aproximadamente entre 120 GHz e 1815 GHz, na região de frequências que confere as respostas mais amortecidas pelo sistema viscoelástico realizado, tendo em vista o fator de perda do sistema, Figura 3. Pode-se considerar o fato de que, pelo módulo viscoelástico de relaxação adotado, o comportamento do sistema para um particular i -ésimo modo de vibração é mais amortecido quando os j -ésimos inversos das constantes de tempo de relaxação existem com valores próximos à i -ésima frequência natural do sistema, $\Omega_j \simeq \omega_i$ (LEI et al., 2013; FARIA, 2017; FARIA; STUTZ; CASTELLO, 2020). Nesse sentido, as maiores razões de amortecimento ocorrem nos modos de vibração mais baixos, em concordância com os campos aleatórios gerados para os parâmetros viscoelásticos $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$. Convertendo de GHz para Trad/s, os três primeiros modos de vibração ocorrem entre 0,75 Trad/s e 4,84 Trad/s, enquanto que, conforme a Figura 2, os campos $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$ percorrem intervalos de valores aproximadamente em $[0,5;1,5]$ Trad/s e $[2,5;4]$ Trad/s, respectivamente. Logo, os campos aleatórios para $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$ aconteceram em valores próximos aos que ocorrem as frequências naturais nos três primeiros modos de vibração, justificando o maior amortecimento nesses modos.

Tabela 6 - Propriedades estatísticas dos parâmetros modais, obtidas a partir de 10^4 realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x)$, $E_1(x)$, $E_2(x)$, $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$: SWCNT

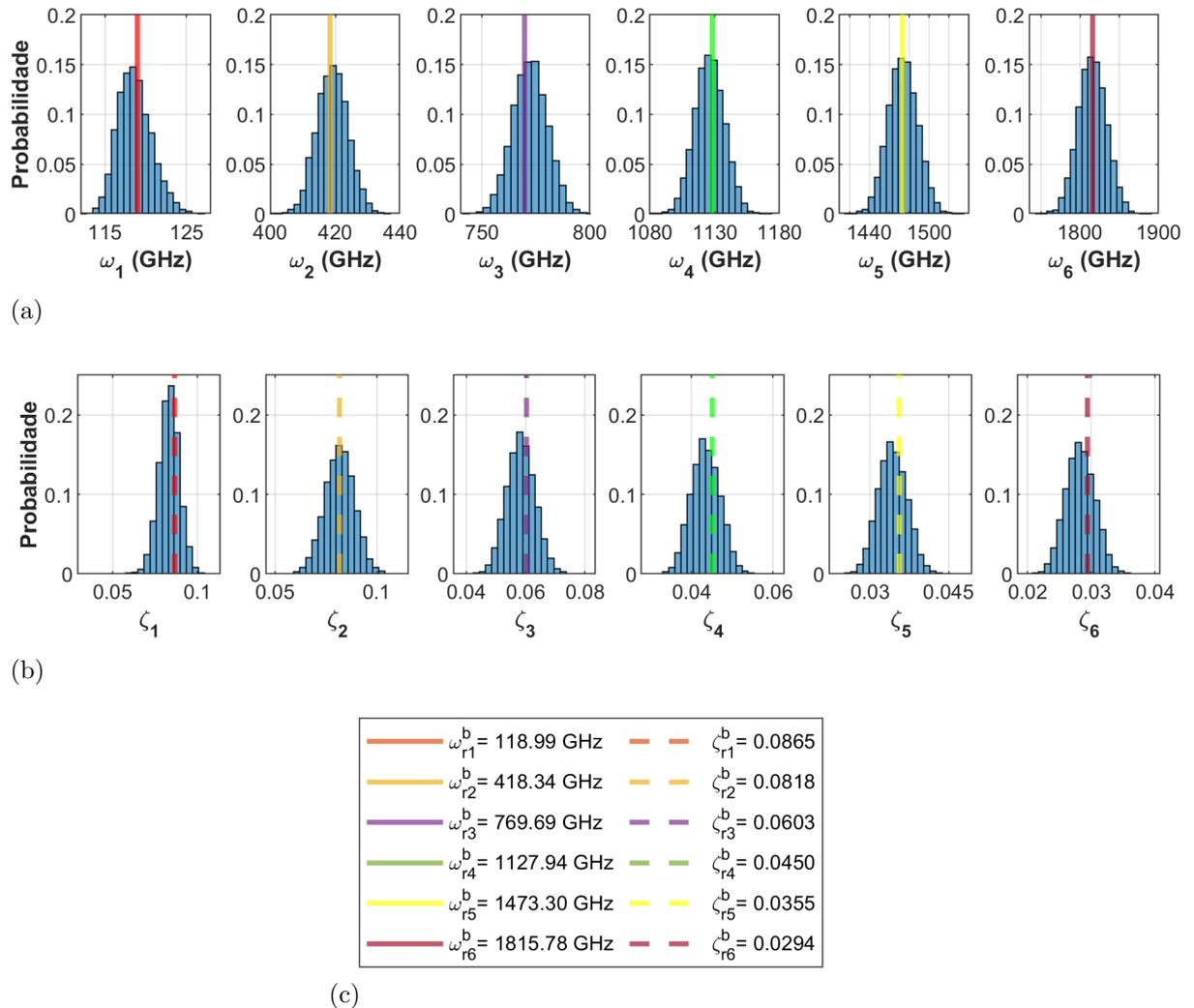
Parâmetro Modal	μ	σ	σ/μ %	IC 95%	Valores de Referência	$100x \left(\frac{y_{ri}^b - \mu_i}{\mu_i} \right)$
ω_1 (GHz)	118,69	2,08	1,75	[115,07;123,26]	118,99	0,25
ω_2 (GHz)	419,18	4,79	1,14	[410,00;428,63]	418,34	-0,20
ω_3 (GHz)	772,22	8,08	1,05	[756,49;788,05]	769,69	-0,33
ω_4 (GHz)	1126,04	11,43	1,02	[1103,8;1148,5]	1127,94	0,17
ω_5 (GHz)	1473,50	14,76	1,00	[1445,0;1502,4]	1473,30	-0,01
ω_6 (GHz)	1815,52	18,11	1,00	[1780,3;1851,1]	1815,78	0,01
ζ_1	0,0833	0,0061	7,32	[0,071;0,095]	0,0865	3,84
ζ_2	0,0816	0,0073	8,94	[0,067;0,096]	0,0818	0,20
ζ_3	0,0584	0,0047	8,05	[0,049;0,068]	0,0603	3,24
ζ_4	0,0434	0,0035	8,06	[0,037;0,050]	0,0450	3,62
ζ_5	0,0343	0,0027	7,87	[0,029;0,040]	0,0355	3,60
ζ_6	0,0283	0,0023	8,13	[0,024;0,033]	0,0294	3,87

Fonte: O autor, 2021.

Por fim, com a finalidade de elucidar os efeitos causados pela variabilidade espacial, foram geradas 10^4 realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x)$, $E_1(x)$, $E_2(x)$, $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$ e foram determinados os correspondentes parâmetros modais para cada realização. A Tabela 6 apresenta as propriedades estatísticas dos parâmetros modais das 10^4 realizações, por integração de Monte Carlo. Além da média (μ), do desvio padrão (σ) e do coeficiente de variação (σ/μ), apresenta-se o intervalo de credibilidade (IC) de 95% dos parâmetros modais. Além disso, apresenta-se, para fins de comparação, os valores de referência dos parâmetros modais, assim como os desvios relativos desses em relação às respectivas médias amostrais, conforme indicado na Tabela 6. Os correspondentes histogramas dos parâmetros modais, obtidos a partir das 10^4 realizações dos campos aleatórios, são apresentados na Figura 4.

Considerando a Figura 4 e a Tabela 6, verifica-se que as propriedades modais podem ser afetadas significativamente com as diferentes realizações dos campos aleatórios Gaussianos para os parâmetros viscoelásticos $E_\infty(x)$, $E_1(x)$, $E_2(x)$, $\Omega_1(x)$ e $\Omega_2(x)$, conforme as propriedades definidas de média e variância na Tabela 3. Registram-se, para as frequências naturais, coeficientes de variação aproximadamente entre 1% e 2%, e, para as razões de amortecimento, coeficientes de variação aproximadamente entre 7% e 9%.

Figura 4 - Histogramas dos parâmetros modais, obtidos a partir de 10^4 realizações dos campos aleatórios dos parâmetros $E_\infty(x)$, $\Delta_i(x)$ e $\Omega_i(x)$: SWCNT



Legenda: (a) Histogramas das frequências naturais

(b) Histogramas das razões de amortecimento

(c) Legenda de cores e linhas para os parâmetros modais do modelo de referência

Fonte: O autor, 2021.

Por fim, pela particular realização considerada para o modelo de referência, Figura 2, recupera-se uma predição de referência relativamente próxima às médias obtidas das predições por 10^4 realizações de campos aleatórios, conforme também pode ser observado na Tabela 6 e na Figura 4. Os desvios relativos percentuais dos valores de referência, em relação aos valores médios dos parâmetros modais nas 10^4 realizações, foram registrados com uma média em torno de 0,16% para as frequências naturais e 3,06% para as razões de amortecimento. A variabilidade espacial adotada foi mais significativa para as frequências naturais até o quarto modo de vibração. Por outro lado, a variabilidade espacial na re-

alização adotada foi relativamente bastante significativa para todas as razões de amortecimento computadas, exceto no segundo modo de vibração, quando registrou-se apenas 0,2% de desvio relativo percentual. Portanto, as previsões pelo modelo de referência foram impactadas em níveis relativamente consideráveis pela variabilidade espacial introduzida para os parâmetros viscoelásticos, em torno da mesma ordem de grandeza da variância do ruído Gaussiano de média nula adotado nesta tese para geração dos experimentais, descrita por desvios padrão proporcionais a média de 0,3% para as frequências naturais e 3% para as razões de amortecimento.

3.2.2 Geração de dados experimentais sintéticos: SWCNT

Conforme abordado na Subseção 3.1.1 sobre a metodologia de geração dos dados experimentais sintéticos, considera-se um desvio padrão relativo à média de 0,3% para os erros associados às frequências naturais, enquanto que um desvio padrão relativo à média de 3% para os erros de medição experimental em relação às razões de amortecimento. A partir desses desvios, considerando os valores de referência dos parâmetros modais do modelo de referência, Tabela 5, tem-se

$$\Sigma_{\omega\omega}^b = \begin{bmatrix} 0,1274 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1,5751 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5,3318 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 11,4502 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 19,5354 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 29,6735 \end{bmatrix} \text{GHz}^2 \quad (155)$$

$$\Sigma_{\zeta\zeta}^b = \begin{bmatrix} 0,6731 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,6022 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,3271 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,1823 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,1136 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0,0777 \end{bmatrix} \times 10^{-5} \quad (156)$$

Na Tabela 7 são apresentados os parâmetros modais experimentais sintéticos, obtidos a partir da Equação (147), considerando-se as variâncias apresentadas nas Equações 155 e 156.

Tabela 7 - Dados experimentais sintéticos:
SWCNT

Modo de vibração	ω_e^b (GHz)	ζ_e^b
1	118,44	0,0828
2	417,76	0,0794
3	767,55	0,0596
4	1123,06	0,0442
5	1479,03	0,0344
6	1820,76	0,0304

Fonte: O autor, 2021.

3.2.3 Classes de modelos, PDFs a priori iniciais e problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos: SWCNT

Quatro classes de modelos são consideradas nos problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos para o caso de um SWCNT como viga viscoelástica em vibração transversal. Adota-se a notação $(\bullet)^b$ para identificar as classes de modelos e os problemas inversos propostos envolvendo modelos não-locais viscoelásticos de viga.

Conforme o escopo previamente definido na Subseção 3.1.2, tem-se uma classe de modelos \mathcal{M}_0^b , onde os efeitos de dissipação de energia no sistema são modelados adotando a hipótese de amortecimento viscoso proporcional. Na classe de modelos \mathcal{M}_0^b , o MEF elementar é particularizado por

$$\mathbf{M}_e \ddot{\mathbf{q}}_e(t) + (\mathbf{D}_e + \mathbf{K}_{\eta_d}^e) \dot{\mathbf{q}}_e(t) + \mathbf{K}_E^e \mathbf{q}_e(t) = \mathbf{P}_e(t) \quad (157)$$

onde \mathbf{K}_E^e e $\mathbf{K}_{\eta_d}^e$ são, respectivamente, as matrizes elementares de rigidez elástica e de amortecimento viscoso associado à matriz de rigidez, dadas por

$$\mathbf{K}_E^e = \int_0^{l_e} EI \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (158)$$

$$\mathbf{K}_{\eta_d}^e = \int_0^{l_e} \eta_d I \frac{d^2 \mathbf{N}(\bar{x})}{d\bar{x}^2} \frac{d^2 \mathbf{N}^T(\bar{x})}{d\bar{x}^2} d\bar{x} \quad (159)$$

onde η_d é o coeficiente de amortecimento viscoso proporcional associado à matriz de rigidez. As demais matrizes e vetores elementares apresentados na Equação (157) se encontram definidos na Subseção 1.4.3.

As classes de modelos \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b são aquelas onde os efeitos dissipativos do sistema são descritos por um modelo viscoelástico com parâmetros homogêneos. Elas se diferem pelo número de variáveis internas utilizadas na descrição do comportamento viscoelástico. As classes de modelos \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b possuem, respectivamente, uma, duas e três variáveis internas (VI). Além disso, nessas classes são consideradas nulas quaisquer ações de amortecimento viscoso.

Tabela 8 - Parâmetros a serem estimados em cada caso de estudo: SWCNT

Caso de Estudo	Classe de Modelos	Modelo de Amortecimento	Vetor de Parâmetros Desconhecidos θ
$1A^b$	\mathcal{M}_0^b	Viscoso	$[e_0a, C'_w, \eta_d, E]^T$
$2A^b$	\mathcal{M}_1^b	Viscoelástico: 1 VI	$[e_0a, \Delta_1, \Omega_1, E_\infty]^T$
$3A^b$	\mathcal{M}_2^b	Viscoelástico: 2 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Omega_1, \Omega_2, E_\infty]^T$
$4A^b$	\mathcal{M}_3^b	Viscoelástico: 3 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, E_\infty]^T$
$1B^b$	\mathcal{M}_0^b	Viscoso	$[e_0a, C'_w, \eta_d, E, \beta]^T$
$2B^b$	\mathcal{M}_1^b	Viscoelástico: 1 VI	$[e_0a, \Delta_1, \Omega_1, E_\infty, \beta]^T$
$3B^b$	\mathcal{M}_2^b	Viscoelástico: 2 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Omega_1, \Omega_2, E_\infty, \beta]^T$
$4B^b$	\mathcal{M}_3^b	Viscoelástico: 3 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3, E_\infty, \beta]^T$

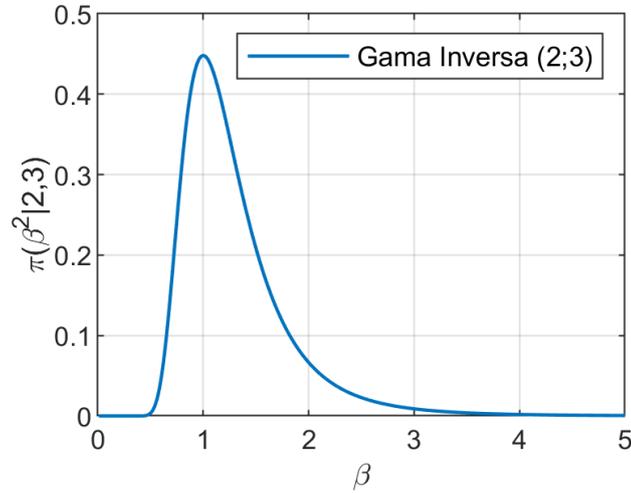
Fonte: O autor, 2021.

Considerando as hipóteses A e B para a função de *verossimilhança*, Subseção 3.1.3, e as quatro classes de modelos propostas para a construção dos problemas inversos, tem-se organizados todos os casos de estudo na Tabela 8, sendo cada caso um problema inverso de estimação de parâmetros a ser solucionado. Os vetores contendo os parâmetros incertos de cada problema inverso (caso de estudo) são apresentados na Tabela 8.

Deve ser percebido que, estruturalmente, das quatro classes de modelos propostas para os problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos, a mais próxima do modelo de referência é a classe \mathcal{M}_2^b , por quanto que existem duas variáveis internas na sua construção. Adiciona-se a observação de que as classes de modelos \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b são encaixadas de forma hierárquica. Com essa propriedade, uma classe de modelos mais complexa pode recuperar a mesma capacidade preditiva de uma menos complexa. Por exemplo, a classe de modelos \mathcal{M}_3^b pode recuperar a classe de modelos \mathcal{M}_1^b zerando dois dos três parâmetros de amplitude relaxação, o que faria restar apenas uma única variável interna efetiva. Ademais, nos casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$, estima-se, junto aos parâmetros constitutivos próprios das classes de modelos \mathcal{M}_0^b , \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , o parâmetro β de escala da matriz de covariância do erro aditivo global, de acordo com a hipótese B para a função de *verossimilhança*.

As PDFs *a priori* dos parâmetros foram definidas como segue. Para os parâmetros E e E_∞ , a PDF *a priori* é uma distribuição normal Gaussiana dada por $E \sim \mathcal{N}(1; 0, 05^2)$

Figura 5 - PDF a *priori* inicial para o fator de escala β associado à variância do ruído: SWCNT



Fonte: O autor, 2021.

e $E_\infty \sim \mathcal{N}(1; 0,05^2)$ em TPa, respectivamente. Portanto, a variância foi determinada com um desvio padrão proporcional de 5% em relação à média desses parâmetros. Para o parâmetro não-local, adota-se $e_0a \sim \mathcal{U}[0; 2]$, em conformidade com o comumente adotado na literatura para modelos não-locais de nanocomponentes concebidos por nanotubos de carbono (ADHIKARI et al., 2015). Para as amplitudes de relaxação, admite-se que um valor máximo $\Delta_i = 1$, quando o E_i recupera uma amplitude de relaxação igual ao módulo de baixa frequência, E_∞ (LEI et al., 2013). Para os i -ésimos inversos das constantes de tempo, uma vez que o amortecimento é maior nos modos de vibração mais baixos, optou-se por um limite superior em 10 Trad/s, próximo do valor experimental da frequência natural no quinto modo de vibração, impondo um intervalo razoável como PDF a *priori*, sem a distinção de bandas específicas de frequência para cada i -ésima variável interna. Para os coeficientes de amortecimento viscoso interno e externo da classe de modelos \mathcal{M}_0^b , C'_w e η_d , respectivamente; optou-se por intervalos que conferissem razões de amortecimento subcríticas com base em análises paramétricas prévias. Para o parâmetro de escala da covariância dos dados experimentais, β , adotou-se a distribuição Gama inversa $\mathcal{IG}(2; 3)$ para todas as classes de modelos, considerando uma expectativa a *priori* de $\beta \simeq 1$, ou seja, de que as classes de modelos são capazes da razoável recuperação dos dados experimentais. A PDF a *priori* para o fator de escala β é apresentada na Figura 5. Todas as PDFs a *priori* iniciais adotadas constam resumidamente na Tabela 9.

Como problemas inversos de seleção de classes de modelos, considera-se comparar e selecionar classes de modelos dentre as classes \mathcal{M}_0^b , \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , conforme as hipóteses para a função de *verossimilhança* A e B. Dessa forma, a partir dos casos de estudo $1A^b$,

Tabela 9 - PDFs a priori iniciais para os parâmetros: SWCNT

Parâmetro	Notação PDF	Classes de Modelos			
		\mathcal{M}_0^b	\mathcal{M}_1^b	\mathcal{M}_2^b	\mathcal{M}_3^b
e_0a (nm)	$\pi(e_0a \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$
E (TPa)	$\pi(E \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	-	-	-
E_∞ (TPa)	$\pi(E_\infty \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$
C'_w (Ns/m ²)	$\pi(C'_w \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[0; 0, 005]$	-	-	-
η_d (Pa.s)	$\pi(\eta_d \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[0; 0, 1]$	-	-	-
Δ_1	$\pi(\Delta_1 \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{U}[0; 1]$	$\mathcal{U}[0; 1]$	$\mathcal{U}[0; 1]$
Δ_2	$\pi(\Delta_2 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 1]$	$\mathcal{U}[0; 1]$
Δ_3	$\pi(\Delta_3 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	-	$\mathcal{U}[0; 1]$
Ω_1 (Trad/s)	$\pi(\Omega_1 \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{U}[0; 10]$	$\mathcal{U}[0; 10]$	$\mathcal{U}[0; 10]$
Ω_2 (Trad/s)	$\pi(\Omega_2 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 10]$	$\mathcal{U}[0; 10]$
Ω_3 (Trad/s)	$\pi(\Omega_3 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	-	$\mathcal{U}[0; 10]$
β^2	$\pi(\beta^2 \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$

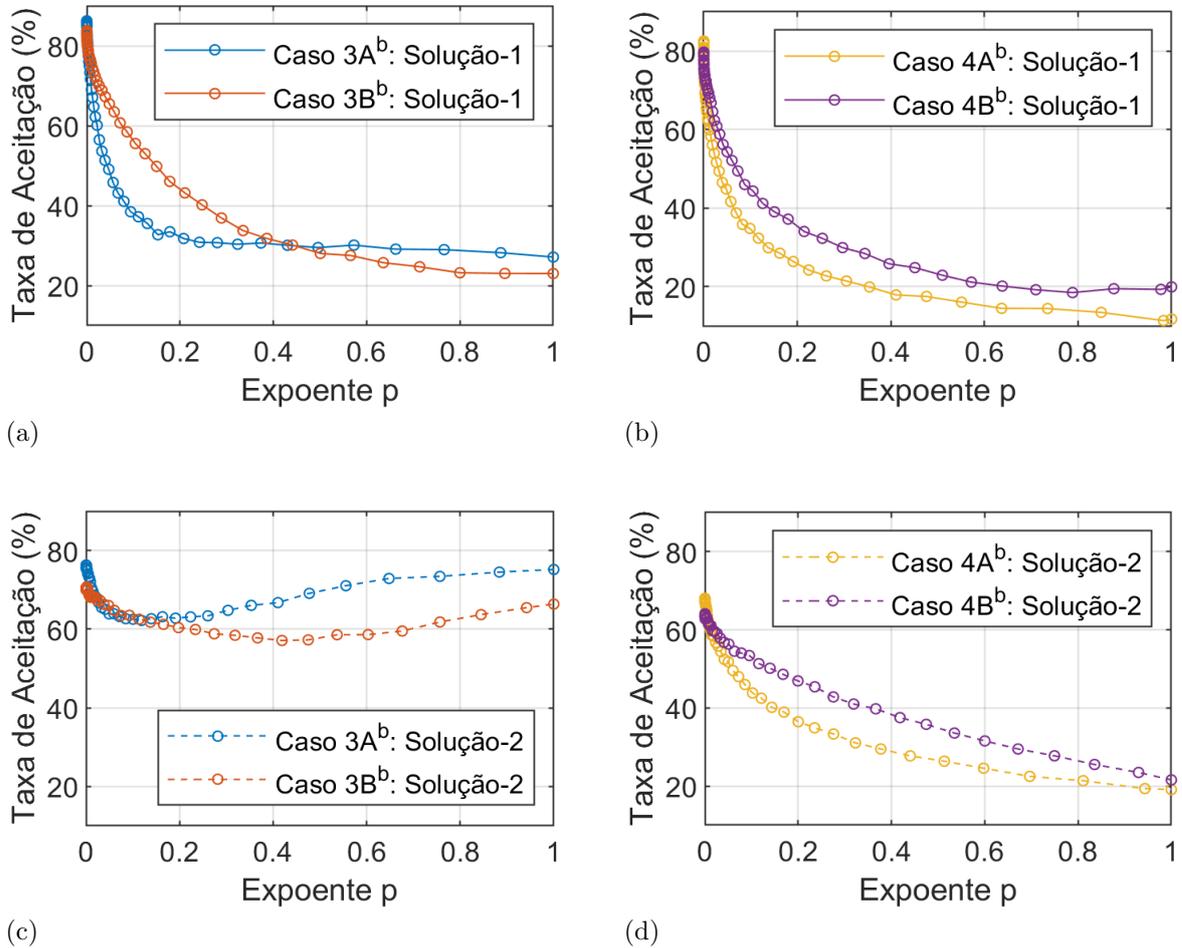
Fonte: O autor, 2021.

$2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$, tem-se o problema de seleção de classes de modelos onde a variância do erro global não é estimada nos problemas inversos de estimação de parâmetros e, a partir dos casos de estudo $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$, tem-se o problema de seleção de classes de modelos que, diferentemente, a variância do erro global é estimada nos problemas inversos de estimação de parâmetros. Cumpre destacar que, nesses casos, a estimação do parâmetro β reflete o interesse de se obter informações sobre uma variável aleatória Gaussiana multivariada, com média nula e que represente os efeitos combinados dos erros experimentais e dos erros de modelo.

3.2.4 Resultados numéricos: Problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana

Como metodologia de solução, apresentada previamente na Subseção 3.1.4, para a obtenção de resultados de melhor acurácia em estimação de parâmetros, os problemas inversos são solucionados em dois estágios. Para cada caso de estudo, os resultados de uma primeira solução do problema inverso de estimação de parâmetros são utilizados para proverem uma PDF a priori redimensionada com maior nível informativo, conferindo um problema inverso de menor complexidade, em que as estimativas são obtidas de forma mais satisfatória. No presente caso de aplicação, o primeiro estágio é a solução de todos os problemas inversos apresentados na Tabela 8, considerando as PDFs a priori apresentadas na Tabela 9, com a realização de uma primeira execução do algoritmo TMCMC.

Figura 6 - Taxas de aceitação nos estágios do TMCMC nos casos $3A^b$, $3B^b$, $4A^b$ e $4B^b$:
SWCNT



Legenda: (a) Casos $3A^b$ e $3B^b$ com a 1ª solução do problema inverso e $\alpha = 0,1$
 (b) Casos $4A^b$ e $4B^b$ com a 1ª solução do problema inverso e $\alpha = 0,1$
 (c) Casos $3A^b$ e $3B^b$ com a 2ª solução do problema inverso e $\alpha = 0,2$
 (d) Casos $4A^b$ e $4B^b$ com a 2ª solução do problema inverso e $\alpha = 0,2$

Fonte: O autor, 2021.

Adota-se o algoritmo TMCMC com 20 mil amostras por estágio e com coeficiente de variação prescrito $COV_P = 0,25$. O parâmetro de escala do algoritmo é adotado majoritariamente por $\alpha = 0,2$; com a exceção dos casos de estudo $3A^b$, $4A^b$, $3B^b$ e $4B^b$, em que foi adotado $\alpha = 0,1$. Nessas exceções, as classes de modelos investigadas são as classes \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , que possuem duas e três variáveis internas no modelo constitutivo viscoelástico, respectivamente. Os problemas inversos com essas classes de modelos ocorreram com elevado grau de dificuldade em amostragem. Verificou-se, por exemplo, uma queda gradual da taxa de aceitação nos passos de Metropolis-Hastings com o avanço dos estágios do TMCMC, de acordo com o expoente p aplicado à função de *verossimilhança*,

conforme apresentado na Figura 6. Cabe destacar que o parâmetro α é aplicado à matriz de covariância dos estados amostrados, utilizada na distribuição auxiliar para os passos de Metropolis-Hastings (MH), definida na Equação (140). Esses passos de MH são conduzidos nos estágios do TMCMC com o intuito da não redução de amostras distintas com a evolução dos estágios de reamostragem do algoritmo TMCMC (CHING; CHEN, 2007). Portanto, o valor de α foi reduzido para aumentar a taxa de aceitação nos passos de MH e, dessa forma, reduzir os efeitos negativos dessa queda verificada nas taxas de aceitação, que podem comprometer por quantidades expressivas de estados repetidos com o avanço dos estágios do TMCMC. Uma vez que, com o parâmetro α muito reduzido, amostras também tendem a ser mais correlacionadas, buscou-se uma configuração que equilibrasse esses dois extremos. Para um melhor desempenho do algoritmo, transições mais suaves entre os estágios de reamostragem do TMCMC foram obtidas com o coeficiente de variação prescrito dado por $COV_P = 0,25$.

Com respeito ao custo computacional inerente às execuções do algoritmo, verificou-se que adotar $COV_P = 0,25$ ao invés de $COV_P = 1$, valor proposto por Ching e Chen (2007), implica em uma quantidade de estágios no TMCMC em torno de quatro vezes maior. Com relação à quantidade de amostras por estágio, pôde-se escolher uma quantidade considerável para realização das integrações de Monte Carlo, 20 mil amostras, por conta que o tempo de execução dos problemas diretos foi relativamente baixo com o *hardware* utilizado, processador Intel[®] Core[™] modelo I7-8565U em um computador de 8 GB de memória RAM DDR4. Para a classe de modelos com três variáveis internas, \mathcal{M}_3^b , que é a de maior custo computacional; tem-se um tempo médio de execução do problema direto em torno de 0,025 segundos, tempo em torno de três vezes maior que o registrado considerando a classe de modelos \mathcal{M}_0^b , de amortecimento apenas viscoso, que é a classe de modelos de menor custo computacional. A maior quantidade de estágios ocorreu com a primeira solução dos problemas inversos (Solução-1), quando a informação *a priori* foi menos informativa. Por fim, registra-se, a título de exemplo, o tempo de execução do TMCMC no caso de estudo $4B^b$, Solução-1, com um total de 8,5 h; com 57 estágios, aproximadamente 9 minutos por estágio no TMCMC.

Na primeira solução do problema inverso, embora bem justificadas as PDFs *a priori* apresentadas na Tabela 9, verificou-se que as PDFs *a posteriori* foram obtidas com suporte relativamente estreito, indicando um considerável ganho de informação a partir dos dados experimentais. Adiciona-se ainda o fato de que as PDFs *a priori* $\Omega_i \sim \mathcal{U}[0; 10]$ Trad/s são iguais nas i -ésimas variáveis internas. Dessa forma, tornam-se plausíveis os estados com $\Omega_{i+1} < \Omega_i$, existindo soluções igualmente ótimas quando apenas trocados os pares de valores Δ_i e Ω_i entre as i -ésimas variáveis internas. Entretanto, esses estados tratam-se da mesma solução para o problema inverso, uma vez que a troca desses pares retornam o mesmo resultado pelo modelo constitutivo viscoelástico adotado. Logo, como estratégia de pós processamento, ao final das execuções do TMCMC para os casos $3A^b$, $3B^b$, $4A^b$ e

$4B^b$, ordenam-se os pares de parâmetros viscoelásticos Δ_i e Ω_i entre as i -ésimas variáveis internas, de forma que $\Omega_i < \Omega_{i+1}$ em todos os estados amostrados da PDF a *posteriori* dos parâmetros. Ordenados os parâmetros viscoelásticos que descrevem as variáveis internas nos estados amostrados na primeira solução do problema inverso, consideram-se os valores máximos e mínimos registrados nos estados amostrados nas cadeias de Markov obtidas da primeira execução do TMCMC, apresentados na Tabela 10. A partir desses valores máximos e mínimos, são definidas as PDFs a *priori* mais informativas apresentadas na Tabela 11, que serão utilizadas para a execução da Solução-2 dos problemas inversos.

Tabela 10 - Valores mínimos e máximos dos parâmetros na primeira solução do problema inverso: SWCNT

Caso de Estudo	Classe de Modelos	Parâmetro	Valor Mínimo Amostrado	Valor Máximo Amostrado
$1B^b$	\mathcal{M}_0^b	e_0a (nm)	1,073	1,317
		C'_w (Ns/m ²)	$1,71 \times 10^{-4}$	$6,52 \times 10^{-4}$
		η_d (Pa.s)	$2,05 \times 10^{-2}$	$9,60 \times 10^{-2}$
		E (TPa)	0,93	1,15
		β	4,50	10,30
$2B^b$	\mathcal{M}_1^b	e_0a (nm)	1,39	1,62
		Δ_1	0,33	0,59
		Ω_1 (Trad/s)	1,46	2,68
		E_∞ (TPa)	0,95	1,13
		β	1,36	6,45
$3B^b$	\mathcal{M}_2^b	e_0a (nm)	1,44	1,55
		Δ_1	0,12	0,44
		Δ_2	0,04	0,42
		Ω_1 (Trad/s)	0,21	1,77
		Ω_2 (Trad/s)	2,35	9,87
		E_∞ (TPa)	0,86	1,08
		β	0,59	3,35
$4B^b$	\mathcal{M}_3^b	e_0a (nm)	1,43	1,53
		Δ_1	0,00	0,43
		Δ_2	0,00	0,44
		Δ_3	0,00	0,38
		Ω_1 (Trad/s)	0,01	1,79
		Ω_2 (Trad/s)	0,70	5,79
		Ω_3 (Trad/s)	2,62	9,97
		E_∞ (TPa)	0,90	1,06
β	0,58	3,88		

Fonte: O autor, 2021.

Alguns detalhes podem ser destacados da Tabela 11. Verifica-se que apenas as PDFs Gama inversas e as definidas por distribuições uniformes foram alteradas em relação

às PDFs *a priori* inicialmente propostas, Tabela 9. Em relação ao parâmetro de escala β , as distribuições Gama inversas redimensionadas estão apresentadas na Figura 7. Essas PDFs, em particular, foram alteradas por conta das classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , que são as classes de modelos com capacidades preditivas mais restritas e, desta forma, demandam o aumento do suporte do parâmetro β , de forma a compatibilizar as discrepâncias entre as medições e predições.

Tabela 11 - PDFs *a priori* redimensionadas após a primeira solução dos problemas inversos: SWCNT

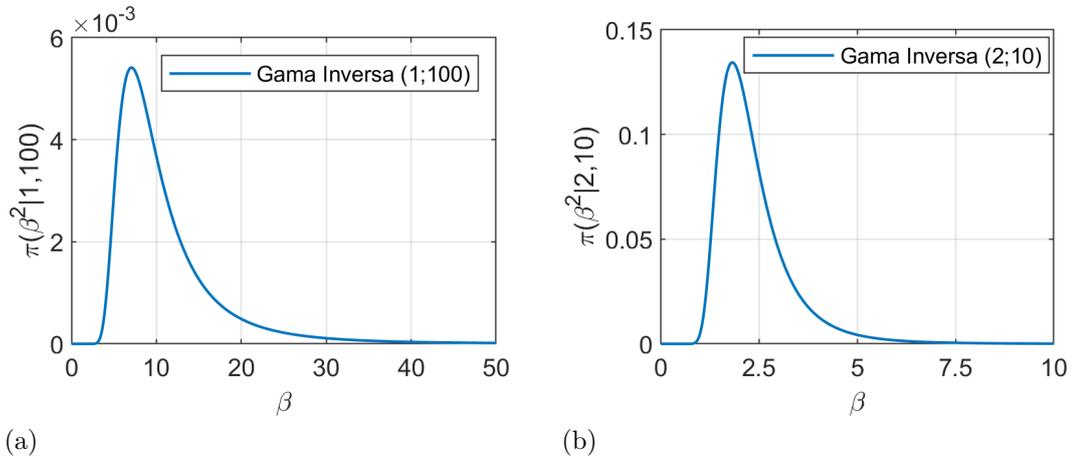
Parâmetro	Notação PDF	Classes de Modelos			
		\mathcal{M}_0^b	\mathcal{M}_1^b	\mathcal{M}_2^b	\mathcal{M}_3^b
e_0a (nm)	$\pi(e_0a \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[1; 1, 4]$	$\mathcal{U}[1, 3; 1, 7]$	$\mathcal{U}[1, 3; 1, 7]$	$\mathcal{U}[1, 3; 1, 7]$
E (TPa)	$\pi(E \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	-	-	-
E_∞ (TPa)	$\pi(E_\infty \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$	$\mathcal{N}(1; 0, 025)$
C'_w (Ns/m ²)	$\pi(C'_w \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[0; 0, 001]$	-	-	-
η_d (Pa.s)	$\pi(\eta_d \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{U}[0; 0, 02]$	-	-	-
Δ_1	$\pi(\Delta_1 \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{U}[0, 3; 0, 6]$	$\mathcal{U}[0; 0, 5]$	$\mathcal{U}[0; 0, 5]$
Δ_2	$\pi(\Delta_2 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 0, 5]$	$\mathcal{U}[0; 0, 5]$
Δ_3	$\pi(\Delta_3 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	-	$\mathcal{U}[0; 0, 5]$
Ω_1 (Trad/s)	$\pi(\Omega_1 \mathcal{M}_i^b)$	-	$\mathcal{U}[1; 3]$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$
Ω_2 (Trad/s)	$\pi(\Omega_2 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	$\mathcal{U}[2; 10]$	$\mathcal{U}[0, 5; 6, 0]$
Ω_3 (Trad/s)	$\pi(\Omega_3 \mathcal{M}_i^b)$	-	-	-	$\mathcal{U}[2; 10]$
β	$\pi(\beta^2 \mathcal{M}_i^b)$	$\mathcal{IG}(1; 100)$	$\mathcal{IG}(2; 10)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$

Fonte: O autor, 2021.

Para a obtenção da Solução-2 dos problemas inversos, considerando-se as PDFs *a priori* redimensionadas apresentadas na Tabela 11, em relação à reposta do algoritmo TMCMC nos casos de estudo $3A^b$, $3B^b$, $4A^b$ e $4B^b$, tem-se que o comportamento de queda na taxa de aceitação dos passos de Metropolis-Hastings foi consideravelmente reduzido em relação à primeira solução do problema inverso e, por isso, optou-se por utilizar $\alpha = 0,2$ em todos os casos de estudo investigados nessa segunda execução do algoritmo, conforme também apresentado na Figura 6.

No restante dessa subseção, como resultado da solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros, são apresentados somente os resultados obtidos da segunda execução do TMCMC, que são aqueles identificados como de maior acurácia. Neste sentido, apenas como um exemplo, apresenta-se as PDFs marginais *a posteriori* dos parâmetros do caso 3B, classe de modelos \mathcal{M}_2^b (duas variáveis internas) e ajustando o parâmetro de escala β , na Figura 8, considerando a Solução-1 e a Solução-2. Pode-se observar na Figura 8 que as duas soluções para o caso 3B são próximas, com uma notável

Figura 7 - PDFs *a priori* redimensionadas para o fator de escala β : SWCNT

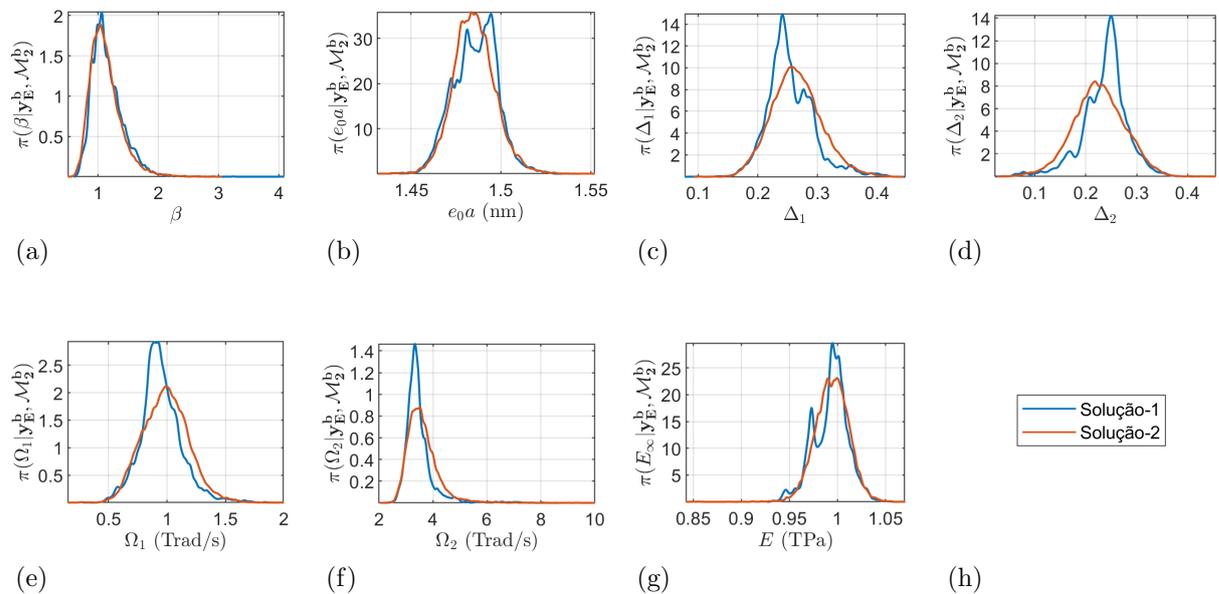


Legenda: (a) PDF *a priori* do parâmetro β na classe de modelos \mathcal{M}_0^b : $IG(2;10)$ (Caso $1B^b$).

(a) PDF *a priori* do parâmetro β na classe de modelos \mathcal{M}_1^b : $IG(1;100)$ (Caso $2B^b$).

Fonte: O autor, 2021.

Figura 8 - Comparação entre as PDFs marginais *a posteriori* obtidas considerando os dois níveis de informação *a priori* sobre os parâmetros, Solução-1 e Solução-2, no caso 3B: SWCNT



Legenda: PDFs *a posteriori* marginais: (a) $\pi(\beta|y_E, \mathcal{M}_2)$, (b) $\pi(e_0a|y_E, \mathcal{M}_2)$,

(c) $\pi(\Delta_1|y_E, \mathcal{M}_2)$, (d) $\pi(\Delta_2|y_E, \mathcal{M}_2)$, (e) $\pi(\Omega_1|y_E, \mathcal{M}_2)$, (f) $\pi(\Omega_2|y_E, \mathcal{M}_2)$ e

(g) $\pi(E_\infty|y_E, \mathcal{M}_2)$.

Fonte: O autor, 2021.

melhor definição das densidades de probabilidade com a segunda execução do problema inverso, indicando, visualmente, uma melhor qualidade de amostragem. As diferenças nos resultados obtidos, em grande parte, é apenas devido ao desempenho diferente do algoritmo de amostragem nas duas execuções, uma vez que as PDFs *a priori* com suporte mais estreito e a própria distinção de bandas de frequência às i -ésimas variáveis internas conferem um problema inverso de considerável menor complexidade. Cabe destacar que, nas classes de modelos menos complexas, as classes \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , para os casos de estudo $1B^b$ e $2B^b$, quando a variância do erro global é estimada nos problemas inversos, os resultados são impactados, além da questão do desempenho do algoritmo, pela escolha das diferentes PDFs *a priori* para o parâmetro β , que estão apresentadas graficamente na Figura 7.

Tabela 12 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados. Solução-2. Casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ (Casos sem estimar a variância do erro): SWCNT

Caso	Parâmetro	μ	σ	σ/μ %	IC 95%	MAP
$1A^b$	e_0a (nm)	1,236	$5,99 \times 10^{-3}$	0,48	[1,224;1,248]	1,236
	C'_w (Ns/m ²)	$3,85 \times 10^{-4}$	$9,09 \times 10^{-6}$	2,36	$[3,6;7;4,02] \times 10^{-4}$	$3,85 \times 10^{-4}$
	η_d (Pa.s)	$5,91 \times 10^{-3}$	$1,42 \times 10^{-4}$	2,41	$[5,63;6,19] \times 10^{-3}$	$5,91 \times 10^{-3}$
	E (TPa)	1,090	$6,62 \times 10^{-3}$	0,61	[1,077;1,103]	1,090
$2A^b$	e_0a (nm)	1,520	0,0084	0,55	[1,504;1,537]	1,521
	Δ_1	0,450	0,0094	2,01	[0,432;0,468]	0,450
	Ω_1 (Trad/s)	2,052	0,0437	2,13	[1,969;2,141]	2,050
	E_∞ (TPa)	1,050	0,0082	0,78	[1,034;1,066]	1,050
$3A^b$	e_0a (nm)	1,486	0,010	0,65	[1,467;1,505]	1,485
	Δ_1	0,267	0,037	13,92	[0,197;0,342]	0,257
	Δ_2	0,223	0,045	20,19	[0,136;0,309]	0,233
	Ω_1 (Trad/s)	0,998	0,174	17,39	[0,655;1,332]	0,959
	Ω_2 (Trad/s)	3,604	0,485	13,46	[2,886;4,763]	3,456
	E_∞ (TPa)	0,996	0,016	1,59	[0,960;1,023]	0,995
$4A^b$	e_0a (nm)	1,485	0,010	0,67	[1,465;1,504]	1,482
	Δ_1	0,210	0,068	32,49	[0,039;0,314]	0,175
	Δ_2	0,169	0,086	50,93	[0,011;0,315]	0,202
	Δ_3	0,117	0,079	67,20	[0,005;0,273]	0,126
	Ω_1 (Trad/s)	0,857	0,228	26,66	[0,346;1,238]	0,715
	Ω_2 (Trad/s)	2,465	0,831	33,69	[0,990;3,928]	2,009
	Ω_3 (Trad/s)	4,532	1,335	29,47	[3,043;8,724]	4,312
	E_∞ (TPa)	0,990	0,018	1,87	[0,945;1,020]	0,982

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 13 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados. Solução-2. Casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$ (Casos estimando a variância do erro): SWCNT

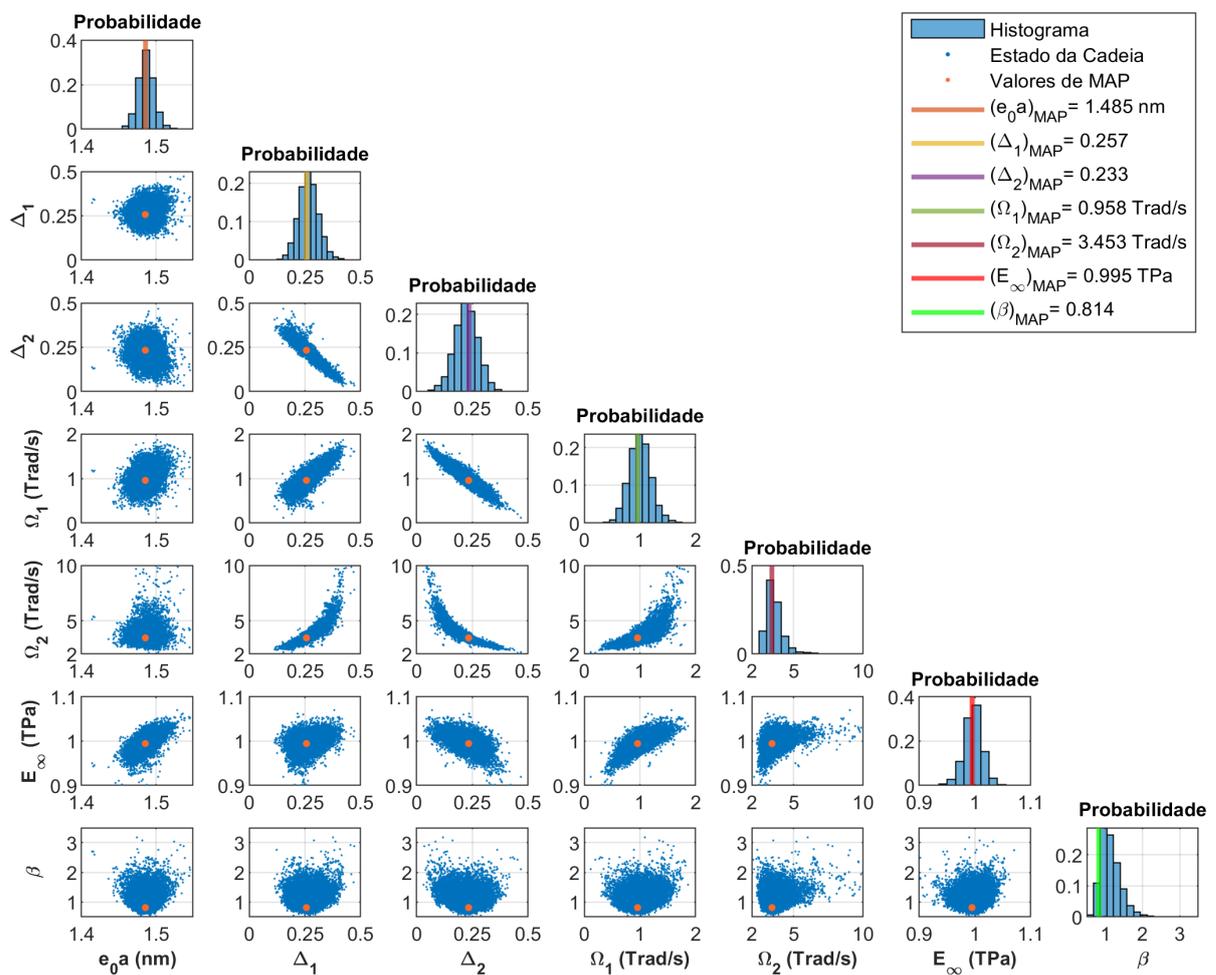
Caso	Parâmetro	μ	σ	σ/μ %	IC 95%	MAP
$1B^b$	e_0a (nm)	1,194	0,043	3,64	[1,059;1,314]	1,195
	C_w (Ns/m ²)	3,83 x10 ⁻⁴	1,01 x10 ⁻⁴	26,27	[1,79;5,77]x10 ⁻⁴	3,78 x10 ⁻⁴
	η_d (Pa.s)	5,63 x10 ⁻³	1,49 x10 ⁻³	26,41	[2,57;8,60]x10 ⁻³	5,65 x10 ⁻³
	E (TPa)	1,038	0,041	3,93	[0,911;1,182]	1,041
	β	10,979	2,584	23,53	[7,226;17,247]	8,678
$2B^b$	e_0a (nm)	1,515	0,025	1,64	[1,465;1,564]	1,517
	Δ_1	0,454	0,028	6,26	[0,401;0,512]	0,453
	Ω_1 (Trad/s)	2,038	0,127	6,24	[1,796;2,300]	2,035
	E_∞ (TPa)	1,041	0,022	2,09	[0,997;1,083]	1,045
	β	2,961	0,619	20,90	[2,017;4,440]	2,371
$3B^b$	e_0a (nm)	1,486	0,011	0,73	[1,465;1,508]	1,485
	Δ_1	0,267	0,044	16,58	[0,18;0,358]	0,257
	Δ_2	0,223	0,052	23,50	[0,117;0,324]	0,233
	Ω_1 (Trad/s)	1,002	0,198	19,80	[0,622;1,420]	0,958
	Ω_2 (Trad/s)	3,639	0,648	17,81	[2,784;5,186]	3,453
	E_∞ (TPa)	0,996	0,017	1,69	[0,961;1,027]	0,995
	β	1,143	0,270	23,62	[0,743;1,782]	0,814
$4B^b$	e_0a (nm)	1,484	0,011	0,758	[1,463;1,507]	1,481
	Δ_1	0,206	0,069	33,572	[0,034;0,319]	0,161
	Δ_2	0,173	0,087	50,237	[0,014;0,316]	0,217
	Δ_3	0,120	0,079	65,685	[0,008;0,266]	0,131
	Ω_1 (Trad/s)	0,849	0,249	29,395	[0,286;1,293]	0,652
	Ω_2 (Trad/s)	2,315	0,850	36,702	[0,948;3,938]	1,894
	Ω_3 (Trad/s)	4,755	1,351	28,421	[3,088;7,564]	4,296
	E_∞ (TPa)	0,988	0,020	2,053	[0,945;1,025]	0,978
	β	1,081	0,284	26,268	[0,652;1,737]	0,800

Fonte: O autor, 2021.

Definidos os parâmetros para o algoritmo TMCMC, a partir das amostras nas cadeias de Markov geradas, propriedades estatísticas marginais sobre as PDFs *a posteriori* dos parâmetros são obtidas, incluindo a média (μ), o desvio padrão (σ), coeficiente de variação (σ/μ) e o intervalo de credibilidade de 95% (IC 95%). De forma complementar, o vetor de parâmetros θ_{MAP} , que define o máximo *a posteriori* (MAP), é também apresentado nas análises. Os valores paramétricos de MAP foram obtidos empregando-se os algoritmos de otimização Evolução Diferencial (DE - *Differential Evolution*) (STORN; PRICE, 1997) e SIMPLEX de Nelder-Mead (NM) (NELDER; MEAD, 1965). Os resultados numéricos e gráficos são apresentados com o objetivo de investigar a identificabilidade

dos parâmetros e as propriedades preditivas das classes de modelos, de acordo com os casos de estudo propostos, apresentados na Tabela 8. Dessa forma, pelas Tabelas 12 e 13, são apresentadas, respectivamente, as propriedades estatísticas marginais sobre as PDFs *a posteriori* dos parâmetros nos casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$, quando a variância do ruído aditivo não é estimada, e nos casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$, quando a matriz de covariância do erro global é estimada. Para a visualização de correlações paramétricas importantes, nas Figuras 9 e 10 são apresentados gráficos de espalhamento dos estados amostrados nos casos $3B$ e $4B$, respectivamente.

Figura 9 - Gráficos de espalhamento. Caso $3B^b$. Classe de modelos \mathcal{M}_2^b : SWCNT

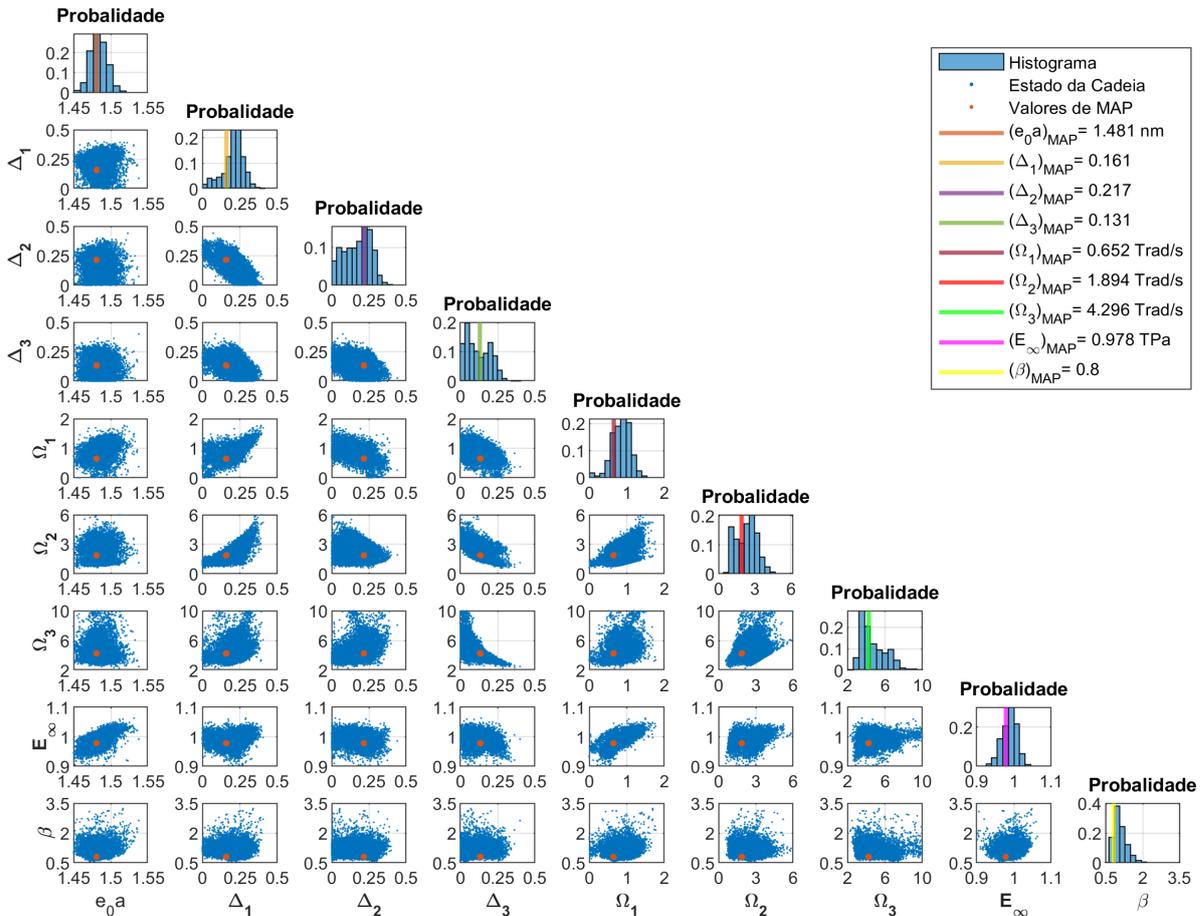


Fonte: O autor, 2021.

De acordo com as Tabelas 12 e 13, as classes \mathcal{M}_0^b , \mathcal{M}_1^b , \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b possuem unicidade de solução para a MAP e um único valor pontual para este estimador é verificado. Pode-se notar que, para as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , a média dos estados amostrados quase coincidem com os valores estimados de MAP. Para a classe de modelos \mathcal{M}_3^b , as estimativas para a MAP são três variáveis internas distintas e não nulas, pois são três inversos de

constante de tempo de relaxação diferentes e não há nenhuma amplitude de relaxação nula. Portanto, a MAP não ocorreu recuperando nenhuma das classes de modelos mais simples, pois nenhuma das variáveis internas foi anulada com $\Delta_i = 0$. Algumas questões adicionais sobre as compensações paramétricas ocorridas em relação à estimativas de MAP nas classes de modelos \mathcal{M}_1^b e \mathcal{M}_2^b são realizadas. Para tal, adota-se a notação $(\bullet)^c$ para identificar que uma dada estimativa é referente à solução de um dado problema inverso \mathcal{C} . Para simplificar a condução das análises, toma-se como exemplo os casos de estudo $2A^b$ e $3A^b$, sendo todas as observações igualmente válidas para os problemas inversos $2B^b$ e $3B^b$. Dessa forma, no caso $2A^b$, classe de modelos \mathcal{M}_1^b , a única variável interna é estimada por $\Delta_1^{2A^b} \simeq 0,45$ e $\Omega_1^{2A^b} \simeq 2$ Trad/s, sendo valores intermediários aos inversos dos tempos de relaxação estimados para as duas variáveis internas na classe de modelos \mathcal{M}_2^b , dados por $\Omega_1^{3A^b} \simeq 1$ Trad/s e $\Omega_2^{3A^b} \simeq 3,5$ Trad/s, ao passo que $\Delta_1^{2A^b} \simeq \Delta_1^{3A^b} + \Delta_2^{3A^b}$. Dessa forma, os parâmetros com maior densidade de probabilidade em \mathcal{M}_1 são aqueles que entregam melhor compensação à necessidade de duas variáveis internas, uma vez que o modelo de referência possui justamente duas variáveis internas.

Figura 10 - Gráficos de espalhamento. Caso $4B^b$. Classe de modelos \mathcal{M}_3^b : SWCNT

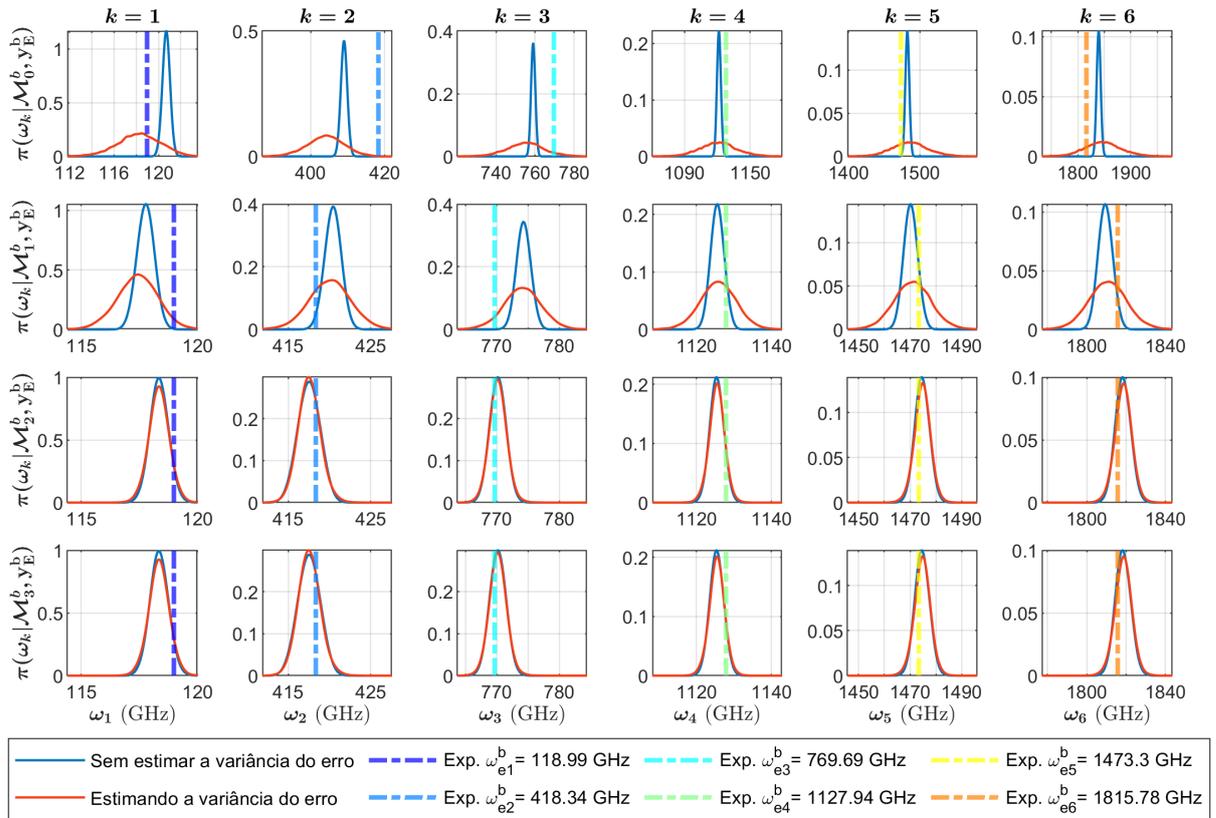


Fonte: O autor, 2021.

Sobre a inclusão da variância do erro aditivo no problema inverso, um efeito de alargamento das PDFs dos parâmetros das classes de modelos é esperado quando a covariância do erro aditivo é dada por $\beta > 1$, enquanto um encurtamento é previsto se $\beta < 1$, uma vez que se alteram os suportes da função de *verossimilhança*. Para as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , houve um alargamento dos suportes das PDFs a *posteriori* marginais dos parâmetros, podendo-se observar pelos resultados obtidos nos casos $1A^b$ e $2A^b$, Tabela 12, quando comparados aos respectivos pelos casos $1B^b$ e $2B^b$, Tabela 13. As classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b são as mais simples e os valores elevados para a variância do erro global aditivo, a partir do parâmetro β , indicam que ocorreram discrepâncias de modelo em relação aos dados experimentais. Diferentemente, para as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , obteve-se $\beta \simeq 1$, portanto quaisquer efeitos de se estimar a variância do erro foram menos perceptíveis. Ao mesmo tempo, $\beta \simeq 1$ indica que essas classes de modelos possuem uma melhor qualidade preditiva, comparadas às classes de modelos mais simples, \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b .

Pode-se caracterizar o suporte das PDFs a *posteriori* obtidas para os parâmetros das classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , pelos gráficos de espalhamento apresentados nas Figuras 9 e 10, respectivamente. Observa-se pela Figura 9 que, para a classe de modelos \mathcal{M}_2^b , a PDF a *posteriori* marginal de Ω_2 pode estar sendo limitada superiormente por $\pi(\Omega_2|\mathcal{M}_2^b) = \mathcal{U}[2; 10]$. Já segundo a Figura 10, para a classe de modelos \mathcal{M}_3 , os i -ésimos parâmetros viscoelásticos Δ_i são limitados inferiormente pelas respectivas PDFs marginais a *priori* $\pi(\Delta_i|\mathcal{M}_3) = \mathcal{U}[0; 0, 5]$, o inverso do tempo de relaxação Ω_1 é limitado inferiormente por $\pi(\Omega_1|\mathcal{M}_3^b) = \mathcal{U}[0; 2]$ e Ω_3 é limitado superiormente por $\pi(\Omega_3|\mathcal{M}_3^b) = \mathcal{U}[2; 10]$. Para esses parâmetros, percebe-se que houve a gradual perda de sensibilidade (identificabilidade) dos inversos dos tempos de relaxação Ω_i quando o respectivo Δ_i tendeu a zero. Sobre essa observação, tem-se que a sensibilidade de uma i -ésima variável interna tende a se anular quando $\Delta_i \rightarrow 0$, sendo perceptível o gradual maior espalhamento de valores para Ω_i , em especial quando $\Delta_i < 0,1$, conforme pode-se observar na Figura 10. Pode-se inferir que, no particular caso da classe de modelos \mathcal{M}_3^b , considerando a Figura 10, há uma tendência em se recuperar a classe de modelos \mathcal{M}_2^b , pois existem soluções estabelecidas justamente com Δ_1 , Δ_2 ou Δ_3 próximos de zero. Esse resultado seria esperado dado que \mathcal{M}_2^b é a classe de modelos mais próxima ao modelo de referência utilizado para a geração dos dados experimentais sintéticos, apesar das respectivas estimativas de MAP nas Tabelas 12 e 13 se apresentarem com unidade de solução, casos $4A^b$ e $4B^b$, respectivamente. Vale destacar que, considerando o gráfico de espalhamento apresentado na Figura 9, que é referente ao caso $3B^b$, verifica-se que as estimativas, para os parâmetros do modelo constitutivo relativo à classe de modelos \mathcal{M}_2^b , ocorre com proximidade aos valores simulados de variabilidade espacial para os parâmetros constitutivos do modelo de referência, apresentados na Figura 2.

Figura 11 - Predições de frequências naturais: SWCNT



Fonte: O autor, 2021.

Em relação às qualidades de ajuste aos dados experimentais pelas classes de modelos, nas Figuras 11 e 12 são apresentadas as densidades de probabilidade dos parâmetros modais com base nos estados amostrados da PDF *a posteriori*. De forma complementar, considerando os casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ e as respectivas estimativas de MAP na Tabela 12, as predições modais e os desvios relativos percentuais médios respectivos são apresentados na Tabela 14. Os desvios ou erros relativos percentuais médios, $EM(\%)$, foram calculados por

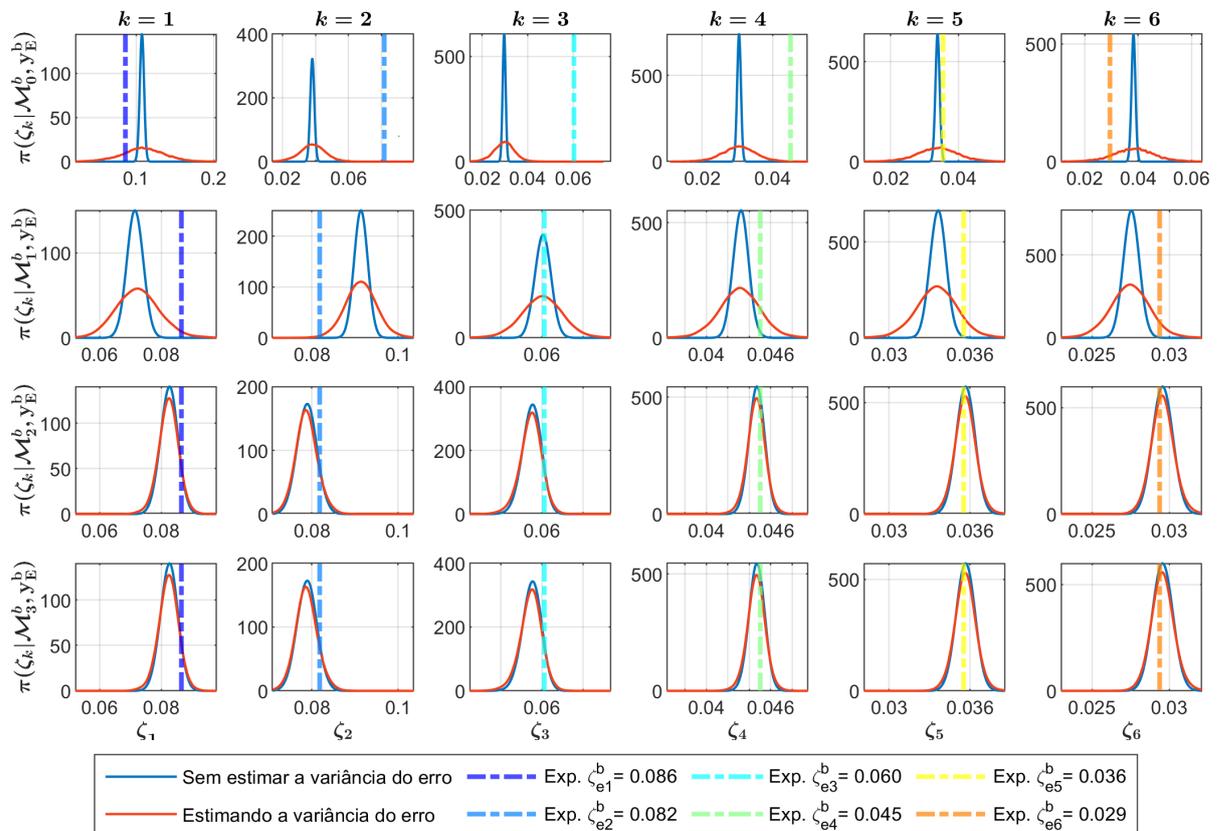
$$EM(\%) = \frac{1}{12} \left[\sum_{i=1}^6 \left(\frac{\omega_i^{\text{MAP}} - \omega_{ei}^b}{\omega_{ei}^b} \right) + \sum_{i=1}^6 \left(\frac{\zeta_i^{\text{MAP}} - \zeta_{ei}^b}{\zeta_{ei}^b} \right) \right] \times 100 \quad (160)$$

onde ω_{ei}^b e ζ_{ei}^b correspondem, respectivamente, à i -ésima frequência natural e à i -ésima razão de amortecimento e ω_{ei}^{MAP} e ζ_{ei}^{MAP} as respectivas estimativas de MAP da solução do problema inverso.

As discrepâncias de modelagem pelas classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1 implicam no maior suporte nas PDFs dos parâmetros modais quando estimada a variância do erro, conforme pode ser percebido pelas Figuras 11 e 12. Ademais, nota-se que este efeito foi mais

significativo na classe de modelos \mathcal{M}_0^b , que apresentou qualidade de ajuste relativamente ruim em relação aos dados experimentais, sobretudo para o segundo, terceiro e quarto modos de vibração. Nesses modos, os valores experimentais de razão de amortecimento apresentaram densidades de probabilidade quase nulas, conforme consta na Figura 12, mesmo quando estimada a variância do ruído. Estendendo a análise, pode-se investigar esse efeito pelas funções de resposta em frequência (FRFs) obtidas dos estados amostrados na solução dos problemas inversos casos 1A e 1B. Com a posição para o atuador em $0,45L$ e para o sensor em $0,85L$, tem-se as previsões de FRFs pela Figura 13. Observa-se que, quando estimada a variância do erro, maiores suportes implicam num alargamento dos intervalos de credibilidade. Dessa forma, tem-se um envelope estocástico que tende a englobar as características dinâmicas do modelo de referência na banda de frequências avaliada. Apesar dessa tendência, o envelope estocástico das FRFs não engloba totalmente a FRF do modelo de referência em torno das frequências naturais próximas ao segundo e terceiro modos de vibração, aproximadamente em 400 GHz e 770 GHz, respectivamente. Essas observações indicam que a classe de modelos \mathcal{M}_0^b não é adequada para representar o sistema de referência.

Figura 12 - Previsões de razões de amortecimento: SWCNT



Fonte: O autor, 2021.

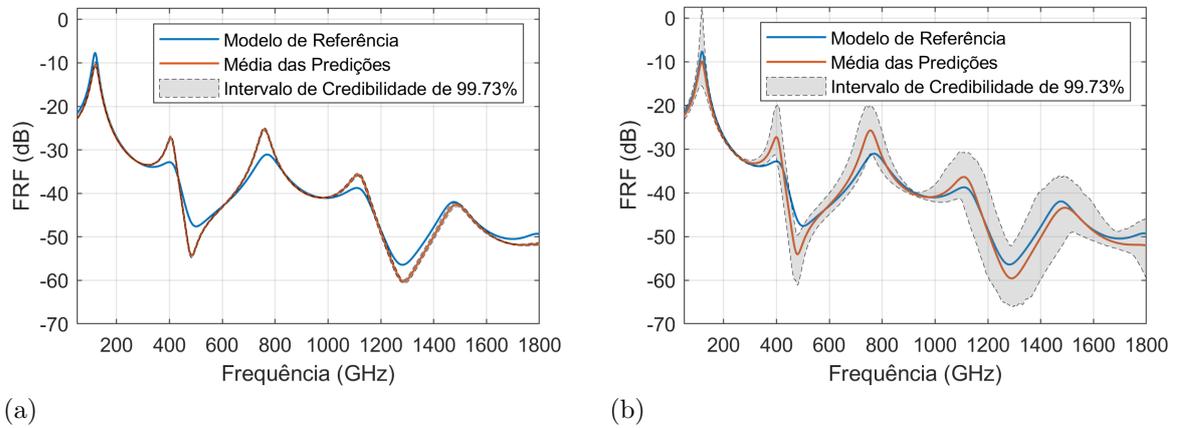
Tabela 14 - Predições modais considerando as estimativas de MAP segundo os casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ (Tabela 12): SWCNT

Parâmetro Modal	Valor Experimental	$A(\boldsymbol{\theta}_{\text{MAP}} \mathcal{M}_i^b)$			
		\mathcal{M}_0^b	\mathcal{M}_1^b	\mathcal{M}_2^b	\mathcal{M}_3^b
ω_1 (GHz)	118,44	120,69	117,75	118,39	118,41
ω_2 (GHz)	417,76	409,03	420,40	417,25	417,27
ω_3 (GHz)	767,55	759,02	774,30	770,05	769,95
ω_4 (GHz)	1123,06	1121,54	1125,62	1125,57	1125,38
ω_5 (GHz)	1479,03	1482,53	1470,27	1474,98	1475,01
ω_6 (GHz)	1820,76	1839,41	1809,58	1818,87	1819,23
ζ_1	0,0828	0,1076	0,0714	0,0829	0,0828
ζ_2	0,0794	0,0381	0,0914	0,0784	0,0789
ζ_3	0,0596	0,0297	0,0601	0,0589	0,0584
ζ_4	0,0442	0,0304	0,0432	0,0447	0,0446
ζ_5	0,0344	0,0338	0,0336	0,0357	0,0357
ζ_6	0,0304	0,0382	0,0275	0,0295	0,0297
Erro relativo médio percentual - EM(%):		16,40	3,92	0,98	0,94

Fonte: O autor, 2021.

Diferente das classes de modelos mais simples, \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b ; pelas classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , a estimativa da variância do erro global aditivo quase não altera as variâncias das predições modais. Nesse aspecto, é verificado que as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b possuem uma capacidade de ajuste aos dados experimentais muito limitada, enquanto que as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b recuperam melhor, e de forma similar, os dados experimentais, conforme se nota graficamente das Figuras 11 e 12. Pelas estimativas de MAP, de acordo com a Tabela 14, o melhor ajuste aos dados experimentais foi atingido pela classe de modelos \mathcal{M}_3^b , embora sendo apenas um pouco melhor que a classe de modelos \mathcal{M}_2^b , 0,04% a menos de erro relativo médio em relação aos dados experimentais. Pela estimativa da MAP, a configuração ótima na classe de modelos \mathcal{M}_0^b retorna um erro relativo médio consideravelmente alto, maior que 16%, sendo que as classes de modelos \mathcal{M}_1^b e \mathcal{M}_2^b recuperam relativamente melhor os dados experimentais, com um erro relativo percentual em torno de 4 e 16 vezes menor, respectivamente. Portanto, as capacidades preditivas são consideravelmente melhores com a evolução da complexidade das classes de modelos \mathcal{M}_0^b , \mathcal{M}_1^b e \mathcal{M}_2^b , enquanto apenas uma pequena melhora é registrada quando adotada a classe de modelos \mathcal{M}_3^b .

Figura 13 - Predições de FRFs. Casos $1A^b$ e $1B^b$: SWCNT



Legenda: FRFs obtidas considerando a posição do atuador em $0,45L$ e do sensor em $0,85L$.

(a) Caso $1A^b$ - Não estimada a variância do erro global aditivo.

(b) Caso $1B^b$ - Estimada a variância do erro global aditivo.

Fonte: O autor, 2021.

3.2.5 Resultados numéricos: Seleção de classes de modelos: SWCNT

Nesta subseção, resultados de seleção de classes de modelos são apresentados e discutidos. Os problemas inversos dados pelos casos de estudo apresentados na Tabela 8 foram solucionados em dois estágios, o primeiro com um cenário de conhecimento *a priori* sobre os parâmetros mais vago e o segundo, com a escolha de PDFs *a priori* mais informativas. O nível mais informativo para a segunda solução do problema inverso (Solução-2) foi obtido considerando os valores máximos e mínimos amostrados na primeira solução do problema inverso (Solução-1). As evidências das classes de modelos nas duas execuções do TMCMC, para cada problema inverso de estimação de parâmetros solucionado, estão respectivamente apresentadas nas Tabelas 15 e 16.

Em conformidade com o escopo de análises objetivadas e a metodologia previamente descrita na Subseção 3.1.4, considera-se, pelo formalismo Bayesiano ao nível do problema inverso de seleção de classes de modelos, que as plausibilidades das classes de modelos são atualizadas na primeira execução do TMCMC (Solução-1) e utilizadas na segunda execução do TMCMC, retornando avaliações das plausibilidades das classes de modelos em dois estágios. Além disso, distinguem-se duas configurações de análise para seleção de classes de modelos, uma com os casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$, quando a variância do erro não é estimada, e a outra com os casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$, quando a variância do erro é adotada como variável aleatória a ser estimada. Com a finalidade de avaliação da sensibilidade à escolha das plausibilidades *a priori* iniciais das classes de modelos, dois

Tabela 15 - Evidências das classes de modelos na 1ª execução do TMCMC
(Solução-1): SWCNT

Caso de Estudo	Classe de Modelo	Log-Valor Médio de <i>Verossimilhança</i>	Log-Ganho de Informação	Log-Evidência
1A ^b	\mathcal{M}_0^b	-450,74	18,79	-469,53
2A ^b	\mathcal{M}_1^b	-19,05	14,81	-33,86
3A ^b	\mathcal{M}_2^b	17,37	18,52	-1,15
4A ^b	\mathcal{M}_3^b	17,48	19,80	-2,32
1B ^b	\mathcal{M}_0^b	-11,83	18,12	-29,95
2B ^b	\mathcal{M}_1^b	3,36	13,35	-9,99
3B ^b	\mathcal{M}_2^b	16,40	17,47	-1,07
4B ^b	\mathcal{M}_3^b	16,97	19,56	-2,58

Fonte: O autor, 2021.

cenários adicionais são avaliados. O primeiro com plausibilidades a *priori* $P(\mathcal{M}_i^b)$ não informativas, para a não interferência de expectativas iniciais sobre as classes de modelos, e o segundo, estabelecendo preferências prévias entre as classes de modelos dispostas. Para o cenário em que todas as classes de modelos disponíveis possuem a mesma plausibilidade, tem-se

$$P(\mathcal{M}_0^b|\mathcal{M}^b) = P(\mathcal{M}_1^b|\mathcal{M}^b) = P(\mathcal{M}_2^b|\mathcal{M}^b) = P(\mathcal{M}_3^b|\mathcal{M}^b) = 0,25 \quad (161)$$

onde $\mathcal{M}^b = [\mathcal{M}_0^b, \mathcal{M}_1^b, \mathcal{M}_2^b, \mathcal{M}_3^b]$. Para o cenário com expectativas a *priori* informativas para as classes de modelos, tem-se

$$\begin{aligned} P(\mathcal{M}_0^b|\mathcal{M}^b) &= 0,1 \\ P(\mathcal{M}_1^b|\mathcal{M}^b) &= 0,2 \\ P(\mathcal{M}_2^b|\mathcal{M}^b) &= 0,2 \\ P(\mathcal{M}_3^b|\mathcal{M}^b) &= 0,5 \end{aligned} \quad (162)$$

Considerando todas as análises a serem executadas, todos os resultados de seleção de classes de modelos estão graficamente resumidos na Figura 14 e os resultados numéricos são apresentados nas Tabelas 17 e 18. Na Tabela 17 constam os resultados obtidos quando consideradas as classes de modelos como igualmente prováveis a *priori* e, na Tabela 18, aqueles adotando probabilidades distintas a *priori*, conforme a Equação (162). Na Figura 14 e nas Tabelas 17 e 18, os estágios de plausibilidades sobre as classes de modelos são apresentados considerando o estágio 0 como sendo o conhecimento a *priori* escolhido, o

Tabela 16 - Evidência das classes de modelos na 2ª execução do TMCMC
(Solução-2): SWCNT

Caso de Estudo	Classe de Modelo	Log-Valor Médio de <i>Verossimilhança</i>	Log-Ganho de Informação	Log-Evidência
1A ^b	\mathcal{M}_0^b	-450,80	14,06	-464,86
2A ^b	\mathcal{M}_1^b	-19,03	10,45	-29,48
3A ^b	\mathcal{M}_2^b	17,20	13,43	3,77
4A ^b	\mathcal{M}_3^b	17,45	13,48	3,96
1B ^b	\mathcal{M}_0^b	-11,70	4,49	-16,19
2B ^b	\mathcal{M}_1^b	3,32	6,89	-3,57
3B ^b	\mathcal{M}_2^b	16,45	13,29	3,16
4B ^b	\mathcal{M}_3^b	16,57	13,24	3,33

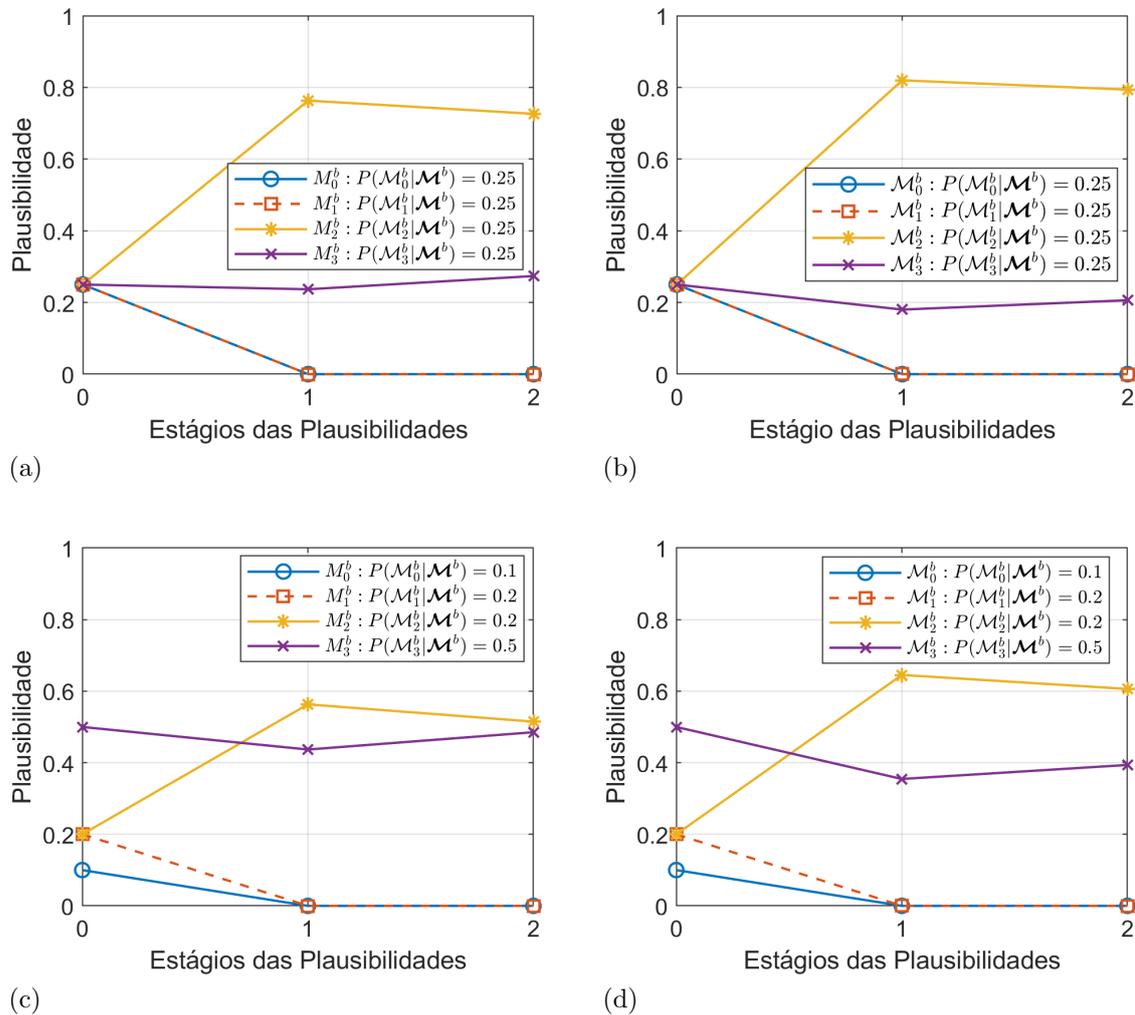
Fonte: O autor, 2021.

estágio 1 como o referente à solução do problema inverso de seleção de classes de modelos a partir das evidências obtidas da primeira solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros (Solução-1) e o estágio 2 é a atualização considerando as evidências obtidas da segunda solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros (Solução-2), sendo adotadas as plausibilidades das classes de modelos obtidas do estágio 1 como conhecimento *a priori*.

Tabela 17 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos igualmente prováveis *a priori*: SWCNT

Casos de Estudo	Classes de Modelo	$P(\mathcal{M}_i^b \mathcal{M}^b)$ (%)		
		Estágio 0	Estágio 1	Estágio 2
1A ^b	\mathcal{M}_0^b	25	$2,94 \times 10^{-202}$	0
2A ^b	\mathcal{M}_1^b	25	$4,77 \times 10^{-13}$	$1,65 \times 10^{-27}$
3A ^b	\mathcal{M}_2^b	25	76,32	72,62
4A ^b	\mathcal{M}_3^b	25	23,68	27,38
1B ^b	\mathcal{M}_0^b	25	$2,36 \times 10^{-11}$	$8,95 \times 10^{-20}$
2B ^b	\mathcal{M}_1^b	25	0,01	$1,27 \times 10^{-5}$
3B ^b	\mathcal{M}_2^b	25	81,97	79,37
4B ^b	\mathcal{M}_3^b	25	18,02	20,63

Fonte: O autor, 2021.

Figura 14 - Plausibilidades a *posteriori* das classes de modelos

Legenda: (a) Casos $1A^b, 2A^b, 3A^b$ e $4A^b$ (Sem estimar a variância do erro): Classes de modelos igualmente plausíveis a *priori*
 (b) Casos $1B^b, 2B^b, 3B^b$ e $4B^b$ (Estimando a variância do erro): Classes de modelos igualmente plausíveis a *priori*
 (c) Casos $1A^b, 2A^b, 3A^b$ e $4A^b$ (Sem estimar a variância do erro): Classes de modelos com plausibilidades distintas a *priori*.
 (d) Casos $1B^b, 2B^b, 3B^b$ e $4B^b$ (Estimando a variância do erro): Classes de modelos com plausibilidades distintas a *priori*.

Fonte: O autor, 2021.

A partir das Tabelas 15 e 16, pode-se inferir sobre o desempenho do algoritmo de amostragem. Primeiramente, pode-se considerar o logaritmo do valor médio da função de *verossimilhança*, que é a medida da qualidade de ajuste aos dados experimentais, que apenas depende dos estados amostrados da PDF a *posteriori* dos parâmetros. Uma vez que há uma boa correspondência dessa métrica entre as Tabelas 15 e 16, se verifica que as

propriedades inferidas sobre a *posteriori* dos parâmetros ocorreram com níveis razoáveis de acurácia. Inclusive, essa observação ocorre para os casos de estudo $1B^p$ e $2B^p$, nos quais as PDFs *a priori* do parâmetro de escala β são também distintas nos dois estágios de solução desses problemas inversos de estimação de parâmetros. Ademais, as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b possuem qualidades de ajuste similares em relação aos dados experimentais, com a classe de modelos \mathcal{M}_3^b sendo apenas um pouco melhor, por essa métrica, que a classe de modelos \mathcal{M}_2^b . Logo, pode-se inferir, de uma forma generalizada, que a configuração escolhida para o algoritmo TMCMC foi suficiente para estimativas acuradas ou, no mínimo, com um elevado nível de consistência na determinação do valor médio da função de *verossimilhança*, mesmo que maior precisão tenha sido observada quando adotadas PDFs *a priori* mais informativas para os parâmetros. Esse fato permite assumir que as diferenças nos valores das evidências das classes de modelos ocorrem, razoavelmente, apenas por conta das diferentes escolhas de PDFs *a priori* para os parâmetros e da inclusão da estimação da variância do erro como variável a ser estimada.

Tabela 18 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos distintamente prováveis *a priori*: SWCNT

Casos de Estudo	Classes de Modelo	$P(\mathcal{M}_i^b \mathcal{M}^b)$ (%)		
		Estágio 0	Estágio 1	Estágio 2
$1A^b$	\mathcal{M}_0^b	10	$1,08 \times 10^{-202}$	0
$2A^b$	\mathcal{M}_1^b	20	$3,52 \times 10^{-13}$	$1,17 \times 10^{-27}$
$3A^b$	\mathcal{M}_2^b	20	56,31	51,48
$4A^b$	\mathcal{M}_3^b	50	43,69	48,52
$1B^b$	\mathcal{M}_0^b	10	$9,27 \times 10^{-12}$	$3,42 \times 10^{-20}$
$2B^b$	\mathcal{M}_1^b	20	0,01	$9,69 \times 10^{-06}$
$3B^b$	\mathcal{M}_2^b	20	64,53	60,62
$4B^b$	\mathcal{M}_3^b	50	35,46	39,38

Fonte: O autor, 2021.

Pelos valores obtidos para as evidências das classes de modelos, pode-se avaliar a influência de se estimar a variância do erro aditivo global junto aos parâmetros das classes de modelos. Nos casos em que a variância do erro global é estimada, ou seja, nos casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$; há um enfraquecimento das penalizações que compõem as evidências. Podem ser comparados os logaritmos naturais das médias dos valores da *verossimilhança* e os logaritmos dos ganhos de informação registrados nas Tabelas 15 e 16, entre os obtidos dos casos $1A^b$, $2A^b$, $3A^b$ e $4A^b$ e os respectivos nos casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$, de acordo com as classes de modelos. Ao se incluir a variância do erro como variável incerta, observa-se que os logaritmos naturais das médias dos valores da *verossimilhança*

foram obtidos maiores para as classes de modelos que apresentaram baixa qualidade de recuperação aos dados experimentais, como as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , e menores para as classes de modelos com melhor ajuste aos dados experimentais, as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b . Em relação aos ganhos de informação, todos eles foram obtidos com tendência de redução quando estimada a variância do erro no problema inverso. Os impactos de se estimar conjuntamente o parâmetro β da variância do erro são maiores para as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b . Nessas classes de modelos, em particular, maiores valores foram obtidos para a variância do erro global. Diferentemente, esses impactos são pouco significativos para as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , quando $\beta \simeq 1$.

Sobre o impacto da escolha das PDFs *a priori* dos parâmetros, ao serem comparados os resultados das Tabelas 15 e 16, verifica-se que o uso de PDFs *a priori* mais informativas reduziu os ganhos de informação em todos os casos de estudo e, portanto, a penalização pela complexidade das classes de modelos. Tal fato impacta nos valores das evidências das classes de modelos no sentido que aquelas mais complexas tendem a ser preferidas no processo de seleção de modelos por inferência Bayesiana. De fato, segundo consta nas Tabelas 15 e 16, a maior evidência é obtida para a classe de modelos \mathcal{M}_2^b pela 1ª solução do problema inverso, ao passo que, da 2ª solução do problema inverso, a maior evidência é referente à classe de modelos \mathcal{M}_3^b . Apesar dessa observação, as evidências das classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b são relativamente próximas. Nesse sentido, da Tabela 15, o maior fator de Bayes $BF_{\mathcal{M}_2^b|\mathcal{M}_3^b}$ é aproximadamente igual a 4,55; considerando as evidências calculadas a partir dos casos 3B e 4B, e, da Tabela 16, o maior fator de Bayes $BF_{\mathcal{M}_3^b|\mathcal{M}_2^b}$ é aproximadamente igual a 1,21; considerando as evidências calculadas a partir dos casos 3A e 4A. Dessa forma, considerando a escala de evidências proposta por Jeffreys (1948), Tabela 1, há, no máximo, uma evidência substancial em favor da classe de modelos \mathcal{M}_2^b , com PDFs *a priori* menos informativas (Solução-1), e uma evidência não significativa em favor da classe de modelos \mathcal{M}_3^b , quando escolhidas PDFs *a priori* mais informativas (Solução-2).

Dos resultados de seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana, apresentados na Figura 14 e nas Tabelas 17 e 18, realizam-se as observações e conclusões listadas a seguir.

- Considerando as classes de modelos \mathcal{M}_0^b e \mathcal{M}_1^b , a partir da primeira solução do problema inverso de seleção das classes de modelos, detecta-se que estas possuem plausibilidades *a posteriori* quase nulas em todos os cenários analisados. O resultado está de acordo com os obtidos na Subseção 3.2.4, uma vez que essas são as classes de modelos que não recuperam adequadamente os dados experimentais.
- Como resultado do enfraquecimento das penalizações quando estimada a variância do erro aditivo, observados os valores das evidências nas Tabelas 15 e 16, tem-se que as plausibilidades *a posteriori* das classes de modelos foram obtidas em valores mais

distanciados quando realizada a seleção de classes de modelos considerando os casos $1B^b$, $2B^b$, $3B^b$ e $4B^b$. Os impactos nas plausibilidades das classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b foram, no máximo, em torno de 10% em favor da classe de modelos \mathcal{M}_2^b quando estimada a variância do erro. Portanto, não houve alteração no ranqueamento final obtido das classes de modelos.

- As plausibilidades a *posteriori* das classes de modelos foram também influenciadas pelas plausibilidades a *priori* em relação às classes de modelos, podendo ser comparados os resultados das Figuras 15a e 15b com os respectivos nas Figuras 15c e 15d. Por exemplo, as plausibilidades foram afetadas em torno de 20% para as classes de modelos \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b , em favor da classe de modelos \mathcal{M}_3^b . Entretanto, apesar das relativas alterações nos valores de plausibilidade a *posteriori* das classes de modelos, o ranqueamento delas foi indiferente às plausibilidades a *priori* impostas, o que demonstra uma considerável robustez dos resultados de seleção de classes de modelos.
- Em relação ao impacto do uso de PDFs a *priori* mais informativas sobre os parâmetros nos resultados de seleção de classes de modelos, verifica-se que, com a redução da penalização por complexidade das classes de modelos, a segunda execução do problema inverso não teve peso significativo em favor de nenhuma das classes de modelos de maior plausibilidade, \mathcal{M}_2^b e \mathcal{M}_3^b . Tal fato está de acordo com os fatores de Bayes pouco decisivos, obtidos na segunda solução dos problemas inversos. Tal como já comentado, na segunda solução do problema inverso, o maior fator de Bayes entre essas duas classes de modelos foi $BF_{\mathcal{M}_3^b|\mathcal{M}_2^b} = 1,21$; não sendo significativo segundo a escala proposta por Jeffreys (1948).

Por fim, a melhor classe de modelos por inferência Bayesiana, a partir dos resultados obtidos, Figura 14 e Tabelas 17 e 18, em concordância com todas as observações discutidas nos resultados de estimação de parâmetros na Subseção 3.2.4, é a classe de modelos \mathcal{M}_2^b , que justamente é aquela com maior similaridade ao modelo de referência utilizado para a geração dos dados experimentais. O ranqueamento das classes de modelos pelas plausibilidades a *posteriori* foi mantido em todos os cenários avaliados, demonstrando-se a relativa robustez nos resultados obtidos.

3.3 Resultados Numéricos: Lâmina de grafeno

Esta seção é dedicada aos resultados obtidos para o sistema lâmina de grafeno de camada única (SLGS), modelado como placa viscoelástica não-local com contornos simplesmente suportados. Na Subseção 3.3.1 é definido e discutido o modelo de referência. Na Subseção 3.3.2 apresenta-se a geração dos dados experimentais. Na Subseção 3.3.3 apresentam-se as classes de modelos propostas para inferência, as PDFs *a priori* iniciais adotadas para os parâmetros e os problemas inversos propostos para serem solucionados. Por fim, nas Subseções 3.3.4 e 3.3.5 são apresentados e discutidos os resultados de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos, respectivamente.

3.3.1 Descrição geral do sistema e do modelo de referência: SLGS

Considerando um modelo contínuo de uma lâmina de grafeno, a nanoestrutura passa a ser concebida como uma nanoplaca sólida ao invés de um sistema discreto em átomos de carbono. Em concordância com a definição apresentada na Subseção 1.5.2, a geometria do sistema é uma placa retangular de comprimento L_x , largura L_y e espessura h , definidos ao longo os eixos coordenados x , y e z , respetivamente, onde as coordenadas x e y ocorrem no plano médio da placa. A lâmina de grafeno é considerada em condição de contorno de simples apoio em todos os seus contornos, conforme segue.

- Para $x = 0$ e $x = L_x$, tem-se: $w = 0$, $\frac{\partial w}{\partial y} = 0$ e $M_{xx} = 0$.
- Para $y = 0$ e $y = L_y$, tem-se: $w = 0$, $\frac{\partial w}{\partial x} = 0$ e $M_{yy} = 0$.

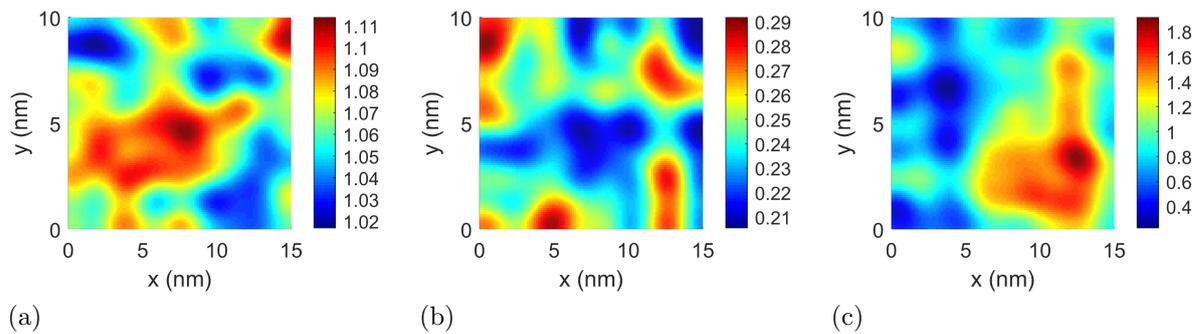
Tabela 19 - Propriedades mecânicas geométricas, de amortecimento viscoso, massa e não-localidade adotadas como homogêneas espacialmente no modelo de referência: SLGS

Propriedade	Unidade	Símbolo	Valor
Parâmetro não-local	nm	$e_0 a$	1,5
Comprimento	nm	L_x	15
Largura	nm	L_y	10
Espessura efetiva	nm	h	0,34
Massa Específica	kg/m ³	ρ	2250
Coefficiente de amortecimento viscoso	Ns/m ³	C_w''	0
Coefficiente de Poisson	-	ν	0.25

Fonte: O autor, 2021.

O amortecimento viscoso proporcional à velocidade (considerado nulo), a constante de Poisson e as propriedades geométricas, de massa e não-localidade do modelo de referência são apresentadas na Tabela 19. Todos os valores paramétricos estão em concordância com os comumente adotados na literatura não-local para análises numéricas de lâminas de grafeno (MURMU; PRADHAN, 2009; PRADHAN; PHADIKAR, 2009; ADHIKARI et al., 2015; WANG; LI, 2012; KARLIČIĆ et al., 2016; ARASH; WANG, 2012). Por exemplo, os valores para a massa específica e para espessura efetiva foram também adotados por Adhikari et al. (2015), a constante de Poisson foi adotada por Murmu e Pradhan (2009) e o valor do parâmetro não-local ocorre dentro do intervalo entre 0 nm e 2 nm, comumente considerado na literatura para nanotubos de carbono e lâminas de grafeno (WANG; LI, 2012; KARLIČIĆ et al., 2016; ARASH; WANG, 2012).

Figura 15 - Realizações de campos aleatórios. Parâmetros: $E_\infty(x, y)$, $\Delta_i(x, y)$ e $\Omega_i(x, y)$: SLGS



Legenda: (a) Módulo de baixa frequência: $E_\infty(x, y)$ (TPa)

(b) Amplitude de relaxação proporcional 1: $\Delta_1(x, y)$

(c) Inverso da constante de tempo de relaxação 1: $\Omega_1(x, y)$ (Trad/s)

Fonte: O autor, 2021.

O comportamento viscoelástico da lâmina de grafeno é descrito por um modelo viscoelástico de uma única variável interna. Os parâmetros viscoelásticos $E_\infty(x, y)$, $\Delta_1(x, y)$ e $\Omega_1(x, y)$ são modelados como campos aleatórios Gaussianos, com as médias e desvios padrão nominais apresentados na Tabela 20. Os valores adotados ocorrem em concordância de ordem de grandeza com os respectivos pelos autores (LEI et al., 2013), com $\Omega_1(x, y)$ percorrendo valores próximos às frequências naturais dos primeiros modos de vibração do sistema, como pode ser observado a seguir. A metodologia analítica de expansão KL para domínios bidimensionais, segundo Ghanem e Spanos (2003), é apresentada na Seção A.2 do Apêndice A desta tese. O modelo de elementos finitos estocástico, não apresentado explicitamente nesta tese, é obtido da integração das expansões de Karhunen–Loève para os parâmetros $E_\infty(x, y)$, $E_i(x, y)$ e $\Omega_i(x, y)$ junto às funções de forma que definem as matrizes elementares \mathbf{K}_∞^e , \mathbf{K}_i^e e $\mathbf{K}_{\Omega_i}^e$ do MEF para placa viscoelástica não-

local, as Equações (107), (108) e (109), respectivamente, apresentadas na Seção 1.5.3. Todos os campos aleatórios são simulados com comprimentos de correlação $b_x = L_x/3$ e $b_y = L_y/3$ (ADHIKARI; FRISWELL, 2010). Ao todo, a expansão KL é realizada com 100 termos, sendo 10 termos em cada expansão KL respectiva às coordenadas espaciais x e y da placa. A realização de campos aleatórios para os parâmetros viscoelásticos do modelo de referência constam na Figura 15. Como resultado, tem-se as propriedades do módulo viscoelástico complexo local apresentadas na Figura 16, consistindo dos módulos de armazenamento e perda, $E'(x, y)$ e $\eta(x, y)$, respectivamente; dados em função da frequência ω e das coordenadas espaciais x e y , para as frequências 50 GHz e 150 GHz.

Tabela 20 - Propriedades estatísticas nominais dos parâmetros viscoelásticos: SLGS

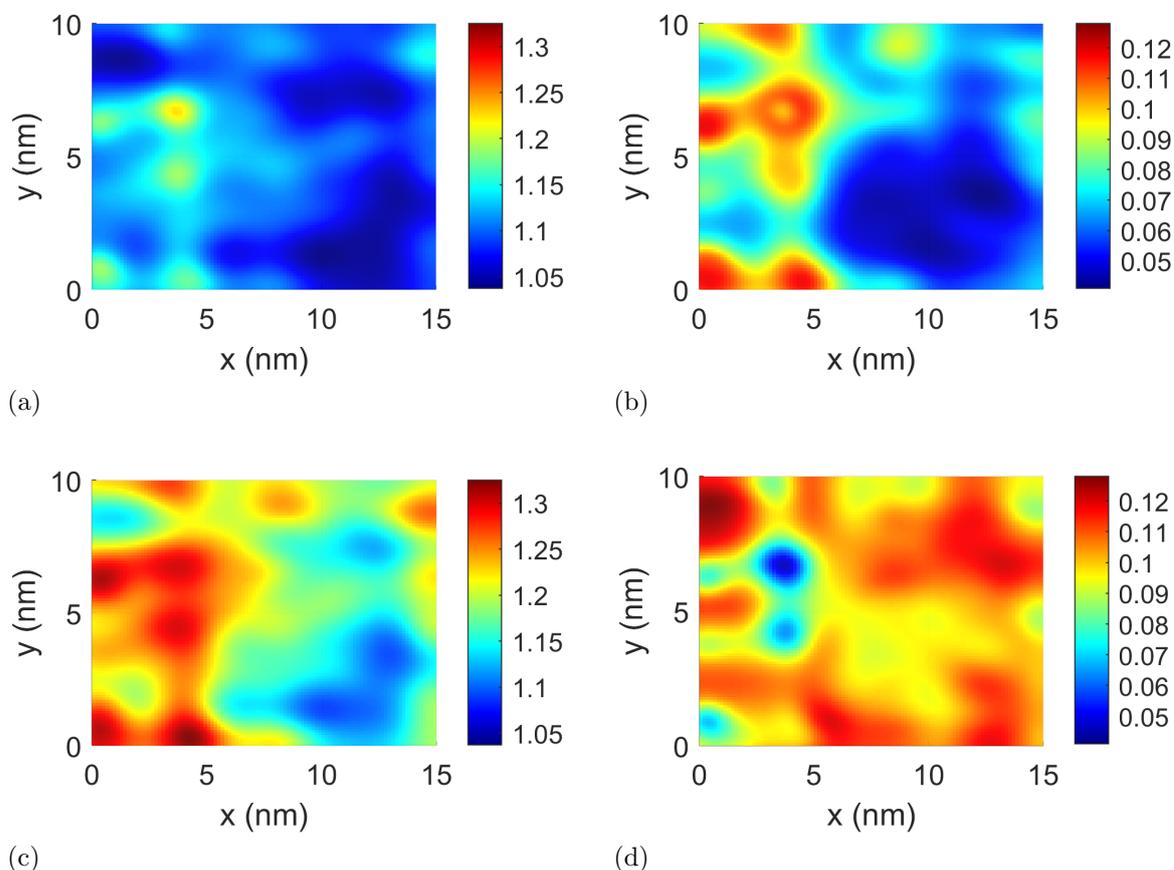
Propriedade	Unidade	Símbolo	Média Nominal	Desvio Padrão Nominal
Módulo de baixa frequência	TPa	$E_\infty(x, y)$	1,06	0,0265
Amplitude de relaxação 1	-	$\Delta_1(x, y)$	0,25	0,025
Inverso do tempo de relaxação 1	Trad/s	$\Omega_1(x, y)$	1	0,3

Fonte: O autor, 2021.

Cabe destacar que, na literatura, o módulo de elasticidade para lâminas de grafeno é comumente reportado ou assumido em torno de 1 TPa quando é adotada a espessura efetiva por volta de $h = 0,34$ nm (MURMU; PRADHAN, 2009; PRADHAN; PHADIKAR, 2009; ADHIKARI et al., 2015; HUANG; WU; HWANG, 2006; HARTMANN et al., 2013; SHI et al., 2014). De forma compatível, foi considerado o valor de 1,06 TPa como média nominal para o módulo de relaxação de baixa frequência (MURMU; PRADHAN, 2009; LEI et al., 2013).

Pela Figura 15, verificam-se as propriedades viscoelásticas da lâmina de grafeno em duas frequências de excitação distintas e nota-se que ambas as propriedades do módulo complexo local, módulo de armazenamento e fator de perda, possuem variabilidade espacial considerável ao longo do domínio. Tal fato é observado tanto em 50 GHz quanto em 150 GHz, distinguindo-se visualmente as regiões da placa de acordo com as respostas em frequência, apresentando diferentes níveis de rigidez e amortecimento. Por exemplo, das Figuras 17a e 17c, verificam-se diferenças de até 0,2 TPa, aproximadamente, entre os valores registrados espacialmente de módulo de armazenamento, em ambas as frequências avaliadas. Mais ainda, tem-se, pelas Figuras 17b e 17d, que as regiões da placa identificadas com menor e maior amortecimento na frequência de excitação de 50 GHz, em grande proporção, são distintas das identificadas com menor e maior amortecimento na frequência de excitação de 150GHz. Considerando o fator de perda, em relação à resposta obtida com a frequência de 50 GHz, calculou-se um aumento médio de 43% de amortecimento quando na frequência de 150 GHz.

Figura 16 - Propriedades viscoelásticas do modelo de referência em função do domínio espacial da placa. Módulo complexo local - Módulo de armazenamento $E'(x, y, \omega)$ e fator de perda $\eta(x, y, \omega)$: SLGS



Legenda: (a) Módulo de armazenamento $E'(x, y, \omega)$ em TPa: Com $\omega = 50$ GHz
 (b) Fator de perda $\eta(x, y, \omega)$: Com $\omega = 50$ GHz
 (c) Módulo de armazenamento $E'(x, y, \omega)$ em TPa: Com $\omega = 150$ GHz
 (d) Fator de perda $\eta(x, y, \omega)$: Com $\omega = 150$ GHz

Fonte: O autor, 2021.

Para o modelo de elementos finitos de placa, a convergência de malha é analisada considerando os parâmetros modais até o quinto modo de vibração, conforme apresentado na Tabela 21. Foi considerada uma evolução de refinamento de malha em que a quantidade de elementos finitos dividindo o domínio da placa ao longo da coordenada x é sempre $3/2$ da quantidade de elementos dividindo ao longo da coordenada y . Levando em consideração o custo computacional como fator preponderante, adota-se a configuração de malha 12×8 , que confere um erro relativo percentual de 0,94% na frequência natural obtida no 5º modo de vibração, em comparação à configuração de malha mais refinada avaliada, 45×30 . Como comparação, o maior erro relativo percentual pelo MEF com malha 18×12 é de 0,49% em relação à configuração de malha mais refinada avaliada, 45×30 ,

Tabela 21 - Análise de convergência de malha pelo MEF: SLGS

Parâmetro	Configurações de malha						
	6 × 4	9 × 6	12 × 8	18 × 12	21 × 14	30 × 20	45 × 30
Modal							
ω_1 (GHz)	43,49	43,84	43,98	44,06	44,10	44,13	44,14
ω_2 (GHz)	75,77	76,75	77,15	77,43	77,52	77,61	77,66
ω_3 (GHz)	113,66	114,03	114,30	114,47	114,57	114,64	114,68
ω_4 (GHz)	122,50	123,67	124,24	124,70	124,82	124,97	125,06
ω_5 (GHz)	135,92	137,66	138,59	139,22	139,52	139,77	139,91
ζ_1	0,0314	0,0315	0,0316	0,0316	0,0316	0,0317	0,0317
ζ_2	0,0454	0,0456	0,0457	0,0457	0,0458	0,0458	0,0458
ζ_3	0,0513	0,0513	0,0511	0,0511	0,0511	0,0511	0,0511
ζ_4	0,0533	0,0533	0,0532	0,0532	0,0532	0,0532	0,0532
ζ_5	0,0535	0,0536	0,0534	0,0534	0,0534	0,0534	0,0534

Fonte: O autor, 2021.

também no 5^o modo de vibração. Uma vez que argumenta-se o custo computacional como fator para escolha da malha, registra-se novamente o *hardware* utilizado, um processador Intel[®] Core[™] modelo I7-8565U em um computador de 8 GB de memória RAM DDR4. Para a determinação de parâmetros modais, pela a configuração de malha 12 × 8, 10000 execuções do modelo de referência levariam em torno de 16 horas, ao passo que, na malha 18 × 12, 60 horas. Considerando as propriedades viscoelásticas homogêneas espacialmente e mantendo apenas uma única variável interna, os respectivos tempos de execução seriam em torno de 1,2 h e 10,5 h e, com duas variáveis internas; 1,7 h e 22,9 h. Ao longo do restante desta seção, todas as análises são conduzidas com malha 12 × 8.

Tabela 22 - Parâmetros modais. Modelo de referência: SLGS

Modo de vibração	ω_r^p (GHz)	ζ_r^p
1	43,98	0,0316
2	77,15	0,0457
3	114,30	0,0511
4	124,24	0,0532
5	138,59	0,0534

Fonte: O autor, 2021.

Os valores de referência para os parâmetros modais do sistema constam das frequências naturais e razões de amortecimento apresentadas na Tabela 22, do primeiro ao quinto

modos de vibração. Deve ser notado que as frequências naturais ocorrem no intervalo entre 40 GHz e 140 GHz e os modos de vibração mais altos são os mais amortecidos. Os valores de razão de amortecimento estão em concordância com as propriedades do módulo complexo nas frequências de excitação de 50 GHz e 150 GHz, conforme apresentado nas Figuras 17b e 17d, em que o fator de perda é consideravelmente maior em 150 GHz. Além disso, o parâmetro $\Omega_1(x, y)$ possui variabilidade espacial entre os valores 0,3 Trad/s e 1,9 Trad/s, conforme se verifica na Figura 15. Convertendo as frequências naturais do modelo de referência de GHz para Trad/s, verifica-se que elas ocorrem dentro desse intervalo; com 0,2763 Trad/s e 0,8718 Trad/s para as frequências naturais no primeiro e quinto modos de vibração, respectivamente. Dessa forma, uma vez que a média do campo $\Omega_1(x, y)$ foi 0,986 TPa; boa parte de sua variabilidade espacial ocorre com valores mais altos que as frequências naturais do sistema. Verificou-se que os valores do campo $\Omega_1(x, y)$ são acima da frequência natural no quinto modo de vibração em torno de 59% da superfície da placa. Portanto, as razões de amortecimento maiores nos modos de vibração mais altos estão em concordância com os campos aleatórios realizados.

Tabela 23 - Propriedades estatísticas dos parâmetros modais, obtidas a partir de 5 mil realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x, y)$, $E_1(x, y)$, $E_2(x, y)$, $\Omega_1(x, y)$ e $\Omega_2(x, y)$: SLGS

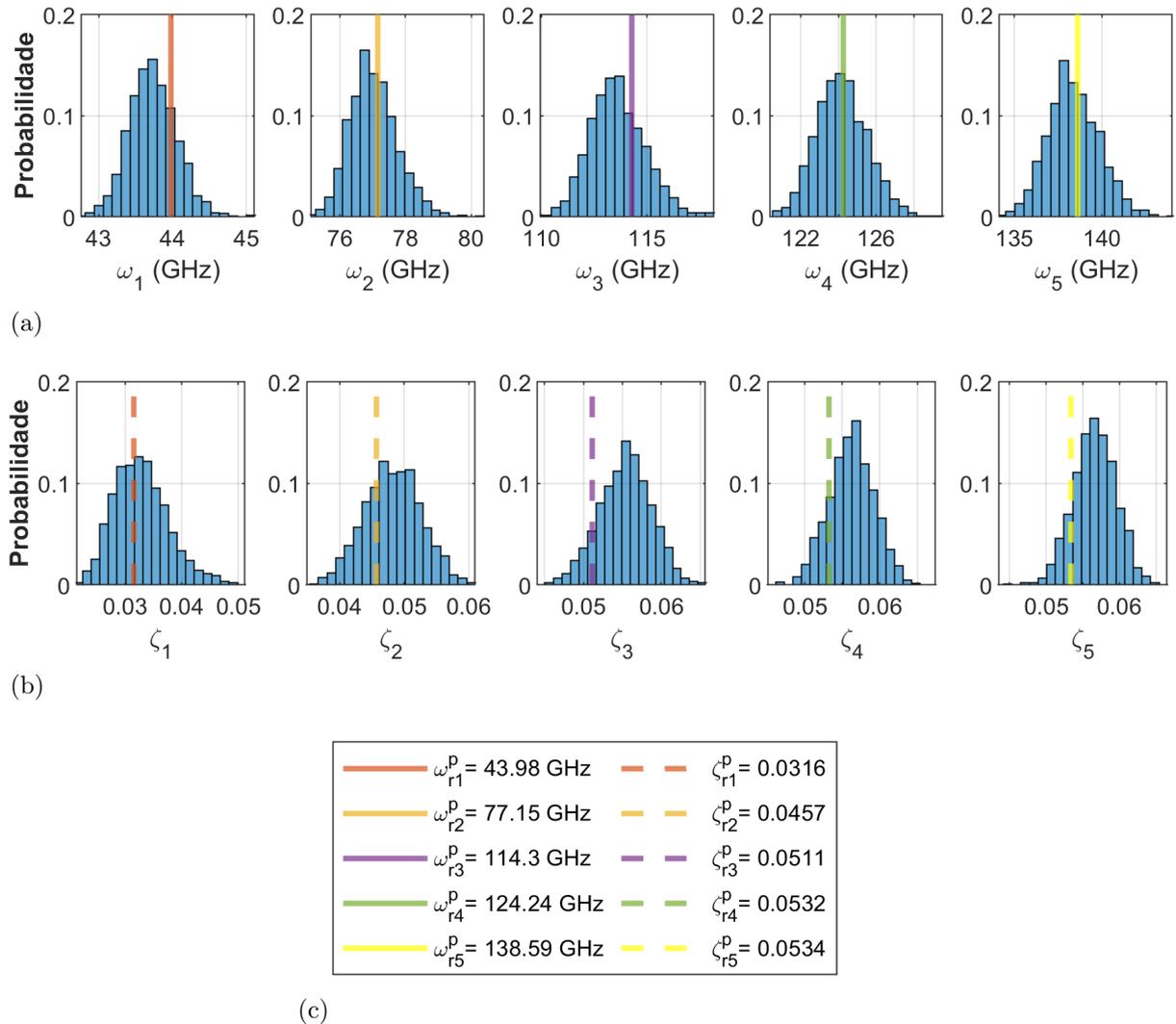
Parâmetro Modal	μ	σ	σ/μ %	CI 95%	Valores de Referência	$100 \times \frac{(y_{ri}^p - \mu_i)}{\mu_i}$
ω_1 (GHz)	43,73	0,32	0,74	[43,11;44,41]	43,98	0,56
ω_2 (GHz)	77,03	0,72	0,93	[75,74;78,59]	77,15	0,15
ω_3 (GHz)	113,61	1,30	1,15	[111,27;116,38]	114,30	0,61
ω_4 (GHz)	124,17	1,36	1,10	[121,68;126,96]	124,24	0,06
ω_5 (GHz)	138,37	1,47	1,06	[135,65;141,38]	138,59	0,16
ζ_1	0,0329	0,0048	14,67	[0,0247;0,0440]	0,0316	-3,95
ζ_2	0,0482	0,0044	9,04	[0,0396;0,0565]	0,0457	-5,19
ζ_3	0,0554	0,0033	6,03	[0,0485;0,0615]	0,0511	-7,76
ζ_4	0,0562	0,0030	5,34	[0,0503;0,0620]	0,0532	-5,34
ζ_5	0,0566	0,0029	5,15	[0,0508;0,0620]	0,0534	-5,65

Fonte: O autor, 2021.

Para serem avaliados os impactos causados pela variabilidade espacial nos resultados obtidos para o modelo de referência, foram geradas 5 mil realizações dos campos aleatórios para os parâmetros $E_\infty(x, y)$, $E_1(x, y)$ e $\Omega_1(x, y)$ e obtidas os correspondentes parâmetros modais. Na Tabela 6 constam as propriedades estatísticas dos parâmetros modais obtidos das 5 mil realizações. Adicionalmente, apresentam-se os valores de referência para os parâmetros modais do modelo referência para fins de comparação. Correspon-

dentemente, tem-se apresentados os respectivos desvios relativos percentuais dos valores de referência de parâmetros modais, com relação às respectivas médias amostrais de cada parâmetro modal, conforme Tabela 6. Os histogramas dos parâmetros modais, obtidos das 5 mil realizações dos campos aleatórios, são apresentados na Figura 17.

Figura 17 - Histogramas das predições de parâmetros modais em 5000 realizações dos campos aleatórios dos parâmetros $E_\infty(x, y)$, $\Delta_1(x, y)$ e $\Omega_2(x, y)$: SLGS



Legenda: (a) Histogramas de frequências naturais

(b) Histogramas de razões de amortecimento

(c) Legenda de cores e linhas para os parâmetros modais pelo modelo de referência

Fonte: O autor, 2021.

Considerando os resultados apresentados na Tabela 23 e na Figura 17, para as frequências naturais ocorreram coeficientes de variação com média em torno de 1% e, para as razões de amortecimento, em torno de 8,05%. Sobre os parâmetros modais do

modelo de referência, verifica-se que as as frequências naturais são todas obtidas com valores acima das respectivas médias amostrais, obtidas a partir das 5 mil realizações. Considerando apenas os desvios relativos obtidos nas frequências naturais, destaca-se que houve um desvio relativo médio de 0,3%. Por outro lado, considerando os desvios relativos calculados para as razões de amortecimento, verifica-se que todas as razões de amortecimento pelo modelo de referência foram abaixo dos respectivos valores de médias amostrais. O valor médio de desvios relativos foi -5,6% para as razões de amortecimento. O impacto da variabilidade espacial adotada foi menos significativo para a frequência natural no quarto modo de vibração, com apenas 0,06% de desvio relativo percentual em relação à respectiva média amostral. O ruído experimental Gaussiano adotado nesta tese é descrito como de média nula e variância por desvios padrão proporcionais de 0,3% para as frequências naturais e 3% para as razões de amortecimento. Portanto, impactos da mesma ordem de grandeza ocorreram com a realização escolhida para os parâmetros viscoelásticos e, por isso, a variabilidade espacial foi considerada significativa para as análises.

3.3.2 Geração de dados experimentais sintéticos: SLGS

Aplicando o procedimento descrito na Subseção 3.1.1 sobre a metodologia de geração dos dados experimentais sintéticos, considerando os valores exatos para os parâmetros modais pelo modelo de referência, Tabela 22, tem-se

$$\Sigma_{\omega\omega}^p = \begin{bmatrix} 0,0174 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,0536 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,1176 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,1389 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,1729 \end{bmatrix} \text{ GHz}^2 \quad (163)$$

$$\Sigma_{\zeta\zeta}^p = \begin{bmatrix} 0,0897 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,1878 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,2353 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0,2548 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0,2568 \end{bmatrix} \times 10^{-5} \quad (164)$$

Considerando os parâmetros modais de referência, Tabela 22, as matrizes de covariância nas Equações (163) e (164), os dados experimentais sintéticos foram obtidos, sendo apresentados na Tabela 24.

Tabela 24 - Dados experimentais sintéticos:
SLGS

Modo de vibração	ω_e^p (GHz)	ζ_e^p
1	44,15	0,0310
2	77,21	0,0459
3	114,21	0,0511
4	124,18	0,0501
5	139,30	0,0526

Fonte: O autor, 2021.

3.3.3 Classes de modelos, PDFs a priori iniciais e problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos: SLGS

Para o caso da lâmina de grafeno de camada única (SLGS) como placa em vibração transversal, três classes de modelos são propostas para problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos. Adota-se a notação $(\bullet)^p$ para identificar as classes de modelos e os problemas inversos propostos considerando modelos não-locais viscoelásticos de placa.

Considerando o escopo previamente definido na Subseção 3.1.2, tem-se uma classe de modelos \mathcal{M}_0^p , onde os efeitos dissipativos no sistema são modelados adotando a hipótese de amortecimento viscoso proporcional. Portanto, similarmente à classe de modelos \mathcal{M}_0^b , apresentada na Subseção 3.2.3 para o nanotubo de carbono, o MEF para a classe de modelos \mathcal{M}_0^p é particularizado por

$$\mathbf{M}_e \ddot{\mathbf{q}}_e(t) + (\mathbf{D}_e + \mathbf{K}_{\eta_d}^e) \dot{\mathbf{q}}_e(t) + \mathbf{K}_E^e \mathbf{q}_e(t) = \mathbf{P}_e(t) \quad (165)$$

onde \mathbf{K}_E^e e $\mathbf{K}_{\eta_d}^e$ são matrizes elementares dadas, respectivamente, por

$$\mathbf{K}_E^e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} E \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \nu \left(\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} \right) + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + 2(1 - \nu) \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \quad (166)$$

$$\mathbf{K}_{\eta_d}^e = \int_0^{l_y} \int_0^{l_x} \eta_d \bar{D} \left[\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} + \nu \left(\frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x}^2} \right) + \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{y}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{y}^2} + 2(1 - \nu) \frac{\partial^2 \mathbf{N}}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \frac{\partial^2 \mathbf{N}^T}{\partial \bar{x} \partial \bar{y}} \right] d\bar{x} d\bar{y} \quad (167)$$

onde η_d é o coeficiente de amortecimento viscoso proporcional associado à matriz de rigidez. Todas as demais matrizes e vetores elementares foram definidos na Subseção 1.5.3.

As classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p são aquelas onde os efeitos dissipativos do sistema são descritos por um modelo viscoelástico de parâmetros homogêneos, tal que elas se diferem pela quantidade de variáveis internas na descrição do comportamento viscoelástico. As classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p possuem, respectivamente, uma e duas variáveis internas. Efeitos de amortecimento viscoso são adotados como nulos nessas classes de modelos.

Tabela 25 - Parâmetros a serem estimados em cada caso de estudo: SLGS

Caso de Estudo	Classe de Modelos	Modelo de Amortecimento	Vetor de Parâmetros Desconhecidos θ
$1A^p$	\mathcal{M}_0^p	Viscoso	$[e_0a, C_w'', \eta_d, E]^T$
$2A^p$	\mathcal{M}_1^p	Viscoelástico: 1 VI	$[e_0a, \Delta_1, \Omega_1, E_\infty]^T$
$3A^p$	\mathcal{M}_2^p	Viscoelástico: 2 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Omega_1, \Omega_2, E_\infty]^T$
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	Viscoso	$[e_0a, C_w'', \eta_d, E, \beta]^T$
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	Viscoelástico: 1 VI	$[e_0a, \Delta_1, \Omega_1, E_\infty, \beta]^T$
$3B^p$	\mathcal{M}_2^p	Viscoelástico: 2 VIs	$[e_0a, \Delta_1, \Delta_2, \Omega_1, \Omega_2, E_\infty, \beta]^T$

Fonte: O autor, 2021.

Considerando as três classes de modelos propostas e, novamente, as hipóteses A e B para a função de *verossimilhança*, Subseção 3.1.3, tem-se organizados todos os casos de estudo na Tabela 25 para a lâmina de grafeno. Cada caso de estudo consiste em um problema inverso de estimação de parâmetros a ser solucionado. Os parâmetros de interesse, a serem estimados nos problemas inversos, são também correspondentemente apresentados na Tabela 25. Os casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$ correspondem às aplicações das classes de modelos \mathcal{M}_0^p , \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , sem estimar conjuntamente a variância do erro global aditivo, e os casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$, às aplicações, respectivamente, das mesmas classes de modelos, porém estimando a variância do erro global aditivo conjuntamente nos problemas inversos de estimação de parâmetros. Vale lembrar que a variância do erro global é parametrizada de acordo com o fator de escala β associado à matriz de covariância do ruído dos experimentais, sendo a hipótese B para a função de *verossimilhança*. De forma análoga ao caso de aplicação de um SWCNT como viga em vibração transversal amortecida, as classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p são encaixadas de forma hierárquica e a variabilidade espacial das propriedades viscoelásticas é única diferença entre a classe de modelos \mathcal{M}_1^p e o modelo de referência utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos.

As PDFs *a priori* dos parâmetros são definidas conforme consta na Tabela 26, para uma primeira solução dos problemas inversos. As interpretações e procedimentos

para escolha das PDFs *a priori* dos parâmetros são similares às realizadas para as classes de modelos de viga na Subseção 3.2.3. Destacam-se, portanto, apenas algumas das PDFs adotadas. Por exemplo, foram escolhidas PDFs Gaussianas para os parâmetros E e E_∞ com média em 1,06 TPa e com variância, proporcional à média, de 5%. Para os i -ésimos inversos das constantes de tempo, considera-se o fato de que o amortecimento foi maior nos modos de vibração mais altos pelo modelo de referência, conforme observado na Subseção 3.3.1. A partir dessa observação, optou-se por um limite superior consideravelmente acima das frequências naturais pelo modelo de referência, em 3 Trad/s, em torno de 3,45 vezes a frequência natural no quinto modo de vibração, $w_{r_5}^p = 0,8708$ Trad/s. Para o parâmetro de escala β , adotou-se novamente a distribuição Gama inversa $\mathcal{IG}(2; 3)$ para todas as classes de modelos na Solução-1 dos problemas inversos.

Tabela 26 - PDFs *a priori* iniciais para os parâmetros: SLGS

Parâmetro	Notação PDF	Classes de Modelos		
		\mathcal{M}_0^p	\mathcal{M}_1^p	\mathcal{M}_2^p
e_0a (nm)	$\pi(e_0a \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$	$\mathcal{U}[0; 2]$
E (TPa)	$\pi(E \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$	-	-
E_∞ (TPa)	$\pi(E_\infty \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$
C_w'' (Ns/m ³)	$\pi(C_w'' \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[0; 0, 005]$	-	-
η_d (Pa.s)	$\pi(\eta_d \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[0; 0, 1]$	-	-
Δ_1	$\pi(\Delta_1 \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{U}[0; 1]$	$\mathcal{U}[0; 1]$
Δ_2	$\pi(\Delta_2 \mathcal{M}_i^p)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 1]$
Ω_1 (Trad/s)	$\pi(\Omega_1 \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{U}[0; 10]$	$\mathcal{U}[0; 10]$
Ω_2 (Trad/s)	$\pi(\Omega_2 \mathcal{M}_i^p)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 10]$
β	$\pi(\beta^2 \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$

Fonte: O autor, 2021.

Como problemas inversos de seleção de classes de modelos, considera-se comparar e selecionar classes de modelos dentre as classes \mathcal{M}_0^p , \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , conforme as hipóteses para a função de *verossimilhança* A e B. A partir dos casos de estudo $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$, tem-se o problema de seleção de classes de modelos onde a variância do erro global não é estimada nos problemas inversos de estimação de parâmetros e, a partir dos casos de estudo $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$, tem-se o problema de seleção de classes de modelos que, diferentemente, a variância do erro global é estimada nos problemas inversos de estimação de parâmetros.

3.3.4 Resultados numéricos. Problemas inversos de estimação de parâmetros por inferência Bayesiana: SLGS

Para os problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos considerando uma lâmina de grafeno, o algoritmo TMCMC é configurado com 10000 amostras por estágio, coeficiente de variação prescrito $COV_P = 1$ e parâmetro de escala da distribuição proposta $\alpha = 0,2$. A configuração definida para o TMCMC é mais simples em comparação àquela adotada no caso do nanotubo como viga, com menos amostras por estágio, maior coeficiente de variação e parâmetro de escala único em todos os cenários. Em parte, essa configuração mais simples foi decidida levando em conta o custo computacional relativamente elevado na execução do problema direto, conforme já comentado na Subseção 3.3.1. A título de exemplo, o maior tempo de execução do algoritmo TMCMC ocorreu no caso $3B^p$, Solução-1, quando a PDF a *priori* foi menos informativa e tem-se a classe de modelos com duas variáveis internas, \mathcal{M}_2^p . Nesse caso, o tempo de execução foi de 33,04 h em um total de 11 estágios. Por outro lado, apesar do custo computacional, tem-se que a estrutura do modelo de referência é mais simples, com apenas uma única variável interna e, além disso, a classe de modelos de maior complexidade nos problemas inversos propostos possui, agora, apenas duas variáveis internas. Como resultado, verificou-se que o algoritmo de amostragem, mesmo na primeira solução do problema inverso, quando ocorrem PDFs a *priori* menos informativas; apresentou resultados consistentes, conforme verificado ao longo da subseção. Apesar do verificado bom desempenho do algoritmo, a estratégia de execução dos problemas inversos em dois estágios é mantida com a finalidade de serem avaliados os impactos de diferentes níveis de conhecimentos a *priori* nas soluções dos problemas inversos de estimação de parâmetros e de seleção de classes de modelos. Para os resultados de estimação de parâmetros, uma vez que as PDFs a *priori* mais informativas recuperam cenários que favorecem amostragens de maior qualidade, apresentam-se, basicamente, somente os resultados da segunda solução dos problemas inversos. Para a classe de modelos \mathcal{M}_2^p , ordenam-se os pares de parâmetros viscoelásticos Δ_i e Ω_i entre duas variáveis internas, de forma que $\Omega_1 < \Omega_2$ em todos estados amostrados.

Os resultados numéricos e gráficos das soluções dos problemas inversos de estimação de parâmetros são apresentados conforme segue. Dos resultados da primeira solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros (Solução-1), os valores máximos e mínimos amostrados para os parâmetros nos casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$ são apresentados na Tabela 27. Em conformidade, as PDFs a *priori* redimensionadas, a serem utilizadas nas segundas execuções dos problemas inversos, são apresentadas na Tabela 28. Apenas como um exemplo, apresentam-se as PDFs marginais a *posteriori* dos parâmetros do caso $2B^p$, classe de modelos \mathcal{M}_1^p (uma variável interna) e ajustando o parâmetro de escala β , na Figura 18, considerando os estágios de solução, Solução-1 e a Solução-2. Dos resultados da

Tabela 27 - Valores mínimos e máximos dos parâmetros, amostrados na primeira solução dos problemas inversos: SLGS

Caso de Estudo	Classe de Modelos	Parameter	Valor Mínimo Amostrado	Valor Máximo Amostrado
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	e_0a (nm)	1,17	1,53
		C_w'' (Ns/m ³)	1,40	11,57
		η_d (Pa.s)	0,06	0,10
		E (TPa)	0,95	1,19
		β	1,56	4,08
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	e_0a (nm)	1,41	1,62
		Δ_1	0,19	0,26
		Ω_1 (Trad/s)	0,71	1,21
		E_∞ (TPa)	1,02	1,15
		β	0,57	4,94
$3B^b$	\mathcal{M}_2^p	e_0a (nm)	1,36	1,60
		Δ_1	0,00	0,23
		Δ_2	0,00	0,40
		Ω_1 (Trad/s)	0,00	1,06
		Ω_2 (Trad/s)	0,74	3,00
		E_∞ (TPa)	0,99	1,14
		β	0,60	2,97

Fonte: O autor, 2021.

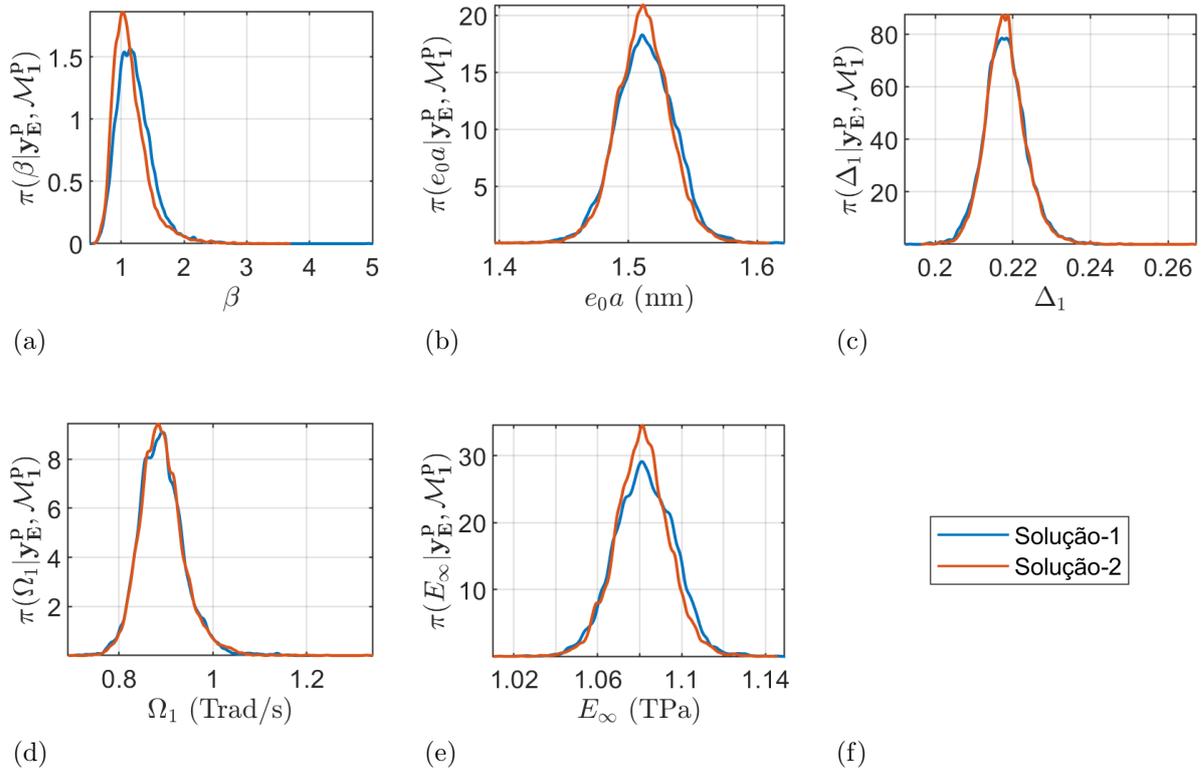
Tabela 28 - PDFs *a priori* redimensionadas após a primeira solução dos problemas inversos: SLGS

Parâmetro	Notação PDF	Classes de Modelos		
		\mathcal{M}_0^p	\mathcal{M}_1^p	\mathcal{M}_2^p
e_0a (nm)	$\pi(e_0a \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[1, 11, 6]$	$\mathcal{U}[1, 3; 1, 7]$	$\mathcal{U}[1, 3; 1, 7]$
E (Tpa)	$\pi(E \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$	-	-
E_∞ (Tpa)	$\pi(E_\infty \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$	$\mathcal{N}(1, 06; 0, 053^2)$
C_w'' (kNs/m ³)	$\pi(C_w'' \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[0; 15]$	-	-
η_d (Pa.s)	$\pi(\eta_d \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{U}[0; 0, 1]$	-	-
Δ_1	$\pi(\Delta_1 \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{U}[0, 15; 0, 3]$	$\mathcal{U}[0; 0, 3]$
Δ_2	$\pi(\Delta_2 \mathcal{M}_i^p)$	-	-	$\mathcal{U}[0; 0, 3]$
Ω_1 (Trad/s)	$\pi(\Omega_1 \mathcal{M}_i^p)$	-	$\mathcal{U}[0, 5; 1, 5]$	$\mathcal{U}[0; 1, 2]$
Ω_2 (Trad/s)	$\pi(\Omega_2 \mathcal{M}_i^p)$	-	-	$\mathcal{U}[0, 5; 3]$
β	$\pi(\beta^2 \mathcal{M}_i^p)$	$\mathcal{IG}(2; 10)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$	$\mathcal{IG}(2; 3)$

Fonte: O autor, 2021.

segunda solução dos problemas inversos, na Tabela 29 são apresentadas as propriedades estatísticas marginais das PDFs *a posteriori* dos parâmetros em todos os casos de estudo avaliados e, nas Figuras 19 e 20, são apresentados os gráficos de espalhamento dos estados nos casos de estudo $2B^p$ e $3B^p$, respectivamente. Com a finalidade de avaliar as qualidades de ajuste aos dados experimentais, tem-se as PDFs dos parâmetros modais nas Figuras 21 e 22. Adicionalmente, as predições ótimas, obtidas a partir das estimativas de MAP com a solução dos problemas inversos, são apresentadas na Tabela 30. Na Figura 23, funções de resposta em frequência, obtidas a partir dos estados amostrados das PDFs *a posteriori* dos casos $1A^p$ e $1B^p$, são também apresentadas.

Figura 18 - PDFs marginais *a posteriori* dos parâmetros. Caso $2B^p$ (Classe de modelos \mathcal{M}_1^p e estimando a variância do erro global), Solução-1 e Solução-2: SLGS



Legenda: PDFs *a posteriori* marginais: (a) $\pi(\beta|\mathbf{y}_E^p, \mathcal{M}_1^p)$. (b) $\pi(e_0a|\mathbf{y}_E^p, \mathcal{M}_1^p)$.

(c) $\pi(\Delta_1|\mathbf{y}_E^p, \mathcal{M}_1^p)$. (d) $\pi(\Omega_1|\mathbf{y}_E^p, \mathcal{M}_1^p)$. (e) $\pi(E_\infty|\mathbf{y}_E^p, \mathcal{M}_1^p)$.

Fonte: O autor, 2021.

Com relação às PDFs *a priori* mais informativas, Tabela 28, destacam-se as escolhas de não alterar as PDFs Gaussianas para os parâmetros E e E_∞ e de redimensionar a PDF *a priori* do parâmetro de escala β da variância do erro aditivo para a classe de modelos \mathcal{M}_0^p por $\pi(\beta^2|\mathcal{M}_0^p) = \mathcal{IG}(2; 10)$, com base na primeira solução do problema inverso $1B^p$. De semelhante modo, todos os intervalos nas distribuições uniformes dos demais

parâmetros foram redimensionados baseados nos valores mínimos e máximos amostrados da primeira solução dos problemas inversos, apresentados na Tabela 27.

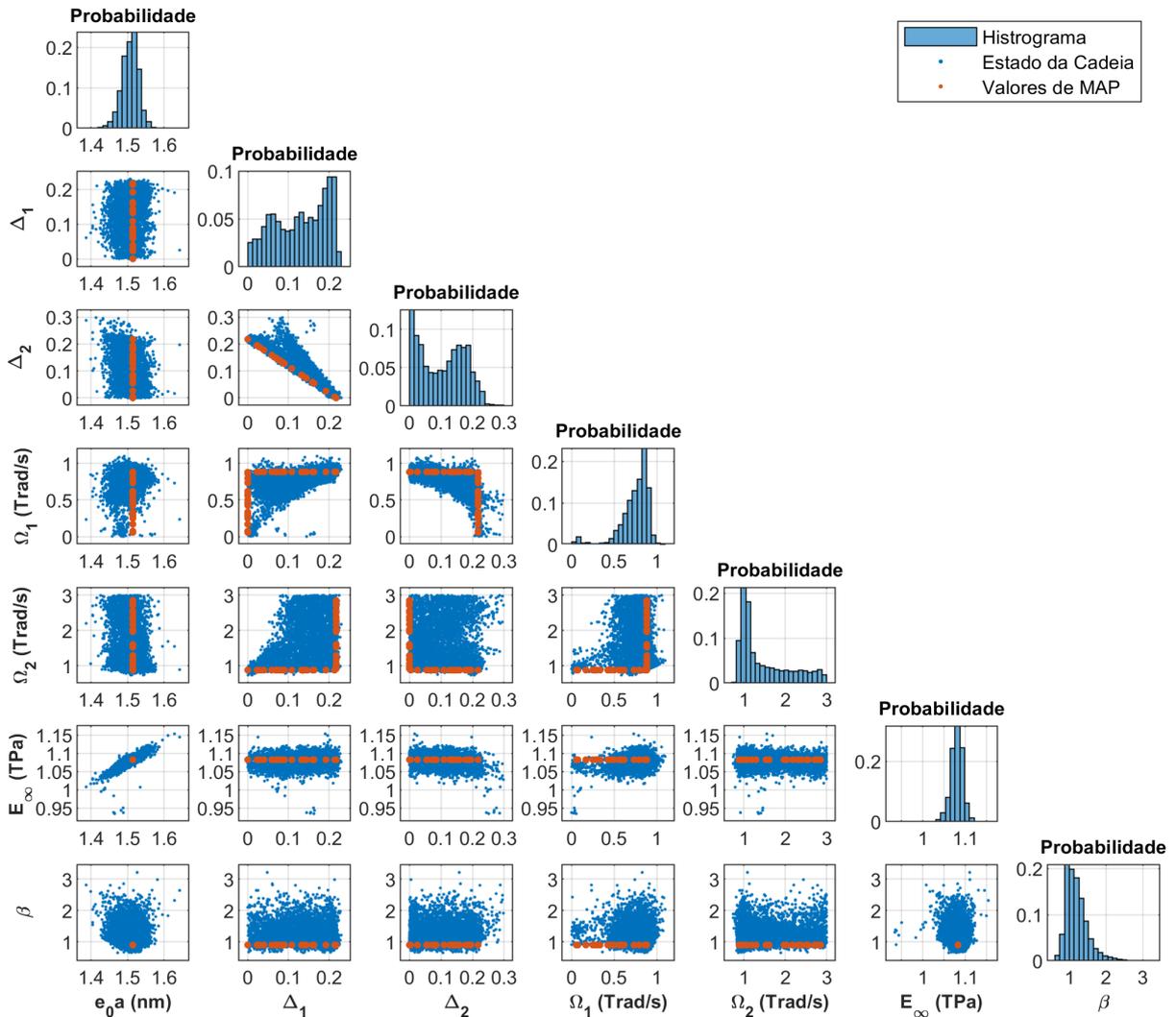
Tabela 29 - Propriedades estatísticas dos estados amostrados (Solução-2): SLGS

Caso	Classe de Modelos	Parâmetro	μ	σ	σ/μ %	IC 95 %	θ_{MAP}
1A ^p	\mathcal{M}_0	e_0a (nm)	1,315	0,017	1,26	[1,284;1,348]	1,316
		C_w'' (KNs/m ³)	6,276	0,509	8,11	[5,313;7,277]	6,263
		η_d (Pa.s)	0,078	0,0021	2,70	[0,074;0,082]	0,078
		E (TPa)	1,037	0,010	0,99	[1,018;1,058]	1,037
2A ^p	\mathcal{M}_1	e_0a (nm)	1,513	0,018	1,20	[1,479;1,549]	1,514
		Δ_1	0,218	0,004	1,90	[0,210;0,226]	0,218
		Ω_1 (Trad/s)	0,889	0,039	4,33	[0,819;0,970]	0,884
		E_∞ (TPa)	1,082	0,011	1,04	[1,060;1,105]	1,082
3A ^p	\mathcal{M}_2	e_0a (nm)	1,504	0,019	1,26	[1,468;1,542]	1,514
		Δ_1	0,128	0,065	50,50	[0,006;0,216]	*
		Δ_2	0,106	0,066	62,09	[0,005;0,218]	*
		Ω_1 (Trad/s)	0,731	0,181	24,75	[0,091;0,925]	*
		Ω_2 (Trad/s)	1,628	0,633	38,87	[0,872;2,855]	*
		E_∞ (TPa)	1,077	0,013	1,16	[1,053;1,100]	1,082
1B ^p	\mathcal{M}_0	e_0a (nm)	1,327	0,051	3,87	[1,231;1,429]	1,323
		C_w'' (Ns/m ³)	6,462	1,905	29,48	[2,675;10,268]	6,258
		η_d (Pa.s)	0,078	0,007	9,09	[0,064;0,092]	0,078
		E (TPa)	1,045	0,032	3,02	[0,985;1,109]	1,042
		β	3,726	0,873	23,44	[2,401;5,671]	2,824
2B ^p	\mathcal{M}_1	e_0a (nm)	1,512	0,021	1,37	[1,471;1,553]	1,515
		Δ_1	0,218	0,005	2,38	[0,209;0,229]	0,218
		Ω_1 (Trad/s)	0,892	0,048	5,43	[0,809;0,100]	0,884
		E_∞ (TPa)	1,081	0,013	1,19	[1,0565;1,107]	1,083
		β	1,148	0,282	24,58	[0,769;1,873]	0,894
3B ^p	\mathcal{M}_2	e_0a (nm)	1,508	0,023	1,52	[1,458;1,550]	1,515
		Δ_1	0,130	0,064	48,99	[0,011;0,216]	*
		Δ_2	0,105	0,070	66,75	[0,004;0,224]	*
		Ω_1 (Trad/s)	0,747	0,171	22,86	[0,119;0,938]	*
		Ω_2 (Trad/s)	1,484	0,614	41,39	[0,878;2,856]	*
		E_∞ (TPa)	1,080	0,015	1,36	[1,049;1,105]	1,083
		β	1,193	0,296	24,81	[0,783;1,948]	0,894

Legenda: * Valores de MAP não identificados.

Fonte: O autor, 2021.

Figura 20 - Gráficos de espalhamento de estados. Caso $3B^p$ (Solução-2). Classe de modelos \mathcal{M}_2^p : SLGS



Fonte: O autor, 2021.

Sobre os resultados de estimação de parâmetros na Tabela 29, em relação aos impactos da inclusão da variância do erro aditivo como variável aleatória a ser estimada nos problemas inversos, podem-ser comparadas as propriedades estatísticas marginais para os parâmetros das classes de modelos \mathcal{M}_0^p , \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , obtidas nos casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$, quando não estimada a variância do ruído, com as respectivas nos casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$, quando estimada a variância do ruído. Verifica-se que há um alargamento dos suportes das PDFs *a posteriori* dos parâmetros das classe de modelos \mathcal{M}_0^p , enquanto que, nas classes \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , não se verificam alterações significativas. A classe de modelos \mathcal{M}_0^p é aquela que maiores valores para o parâmetro β foram estimados (caso $1B^p$), sendo também a de menor complexidade dentre as classes de modelos propostas. Diferentemente, nos casos $2B^p$ e $3B^p$, classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , respectivamente; foi obtido $\beta \simeq 1$, sendo

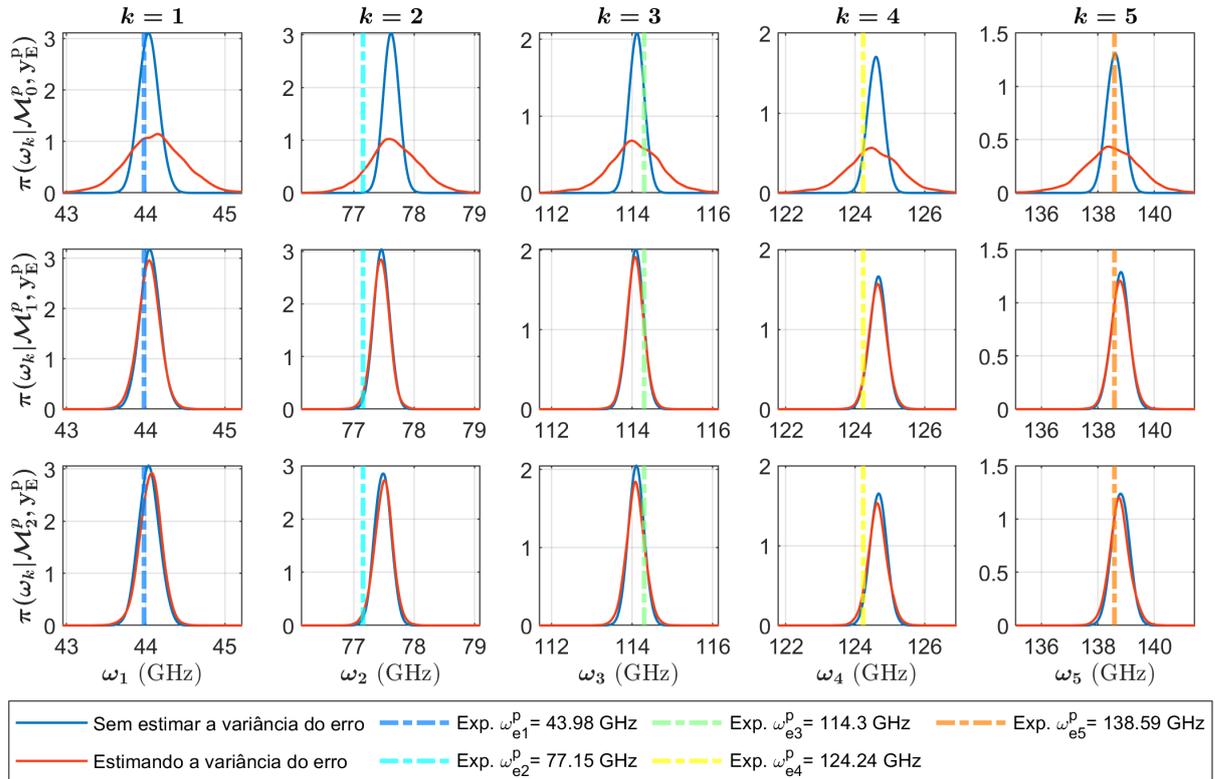
essas as classes de modelos de maior complexidade. Os valores mais elevados para a variância do erro global aditivo, a partir do parâmetro β , indicam que ocorreram maiores discrepâncias de modelagem com a classe de modelos \mathcal{M}_0^p , comparado-se com os valores para o parâmetro de escala β , obtidos a partir das classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p .

De acordo com os resultados na Tabela 29, tem-se ainda que as classes de modelos \mathcal{M}_0^p e \mathcal{M}_1^p apresentam unicidade de solução para a MAP, sendo essas próximas às médias marginais obtidas. Para a classe \mathcal{M}_1^p , Caso $2B^p$, tem-se, adicionalmente, o gráfico de espalhamento de estados apresentado na Figura 19, com o valor pontual da MAP indicando a configuração paramétrica ótima entre os estados amostrados pelo TMCMC. Pelo fato de haver uma solução única para a MAP, os suportes da PDF a *posteriori*, em concordância com as PDFs marginais na Figura 18, são bem delimitados e definidos no espaço paramétrico. A classe de modelos \mathcal{M}_2^p , por outro lado, possui parâmetros viscoelásticos não identificáveis. Dessa forma, para os parâmetros Δ_1^p , Δ_2^p , Ω_1^p e Ω_2^p , existem infinitas soluções ótimas de MAP nos casos de estudo $3A^p$ e $3B^p$. As correlações paramétricas nessas infinitas soluções podem ser visualizadas na Figura 20, onde, além das dispersões dos estados amostrados na solução do problema inverso $3B^p$, 60 diferentes pontos ótimos de MAP são apresentados, o que permite caracterizar a topologia da PDF a *posteriori* dos parâmetros no espaço paramétrico de solução. Os estados amostrados da PDF a *posteriori* são localizados em torno dessas regiões planas de alta densidade de probabilidade. Vale mencionar que as estimativas de MAP apresentadas são a última geração de estados a partir do algoritmo de Evolução Diferencial (STORN; PRICE, 1997), aplicado nesta tese em conjunto com o algoritmo SIMPLEX de Nelder e Mead (1965), tal que todos os pontos de MAP apresentados são igualmente ótimos. Interpretando as compensações paramétricas envolvidas, as estimativas de MAP para a classe de modelos \mathcal{M}_2^p ocorrem recuperando a configuração ótima por MAP na classe de modelos \mathcal{M}_1^p , uma vez que as classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p são encaixadas de forma hierárquica. Por exemplo, a estimativa de MAP para o caso $2A^p$ ocorre com $\Delta_1^{2A^p} = 0,218$ e $\Omega_1^{2A^p} = 0,884$ Trad/s. Com efeito, para a classe de modelos \mathcal{M}_2^p no caso $3A^p$, os parâmetros viscoelásticos são valores equilibrados em uma das três opções a seguir.

- Mantendo não nulas as duas variáveis internas: $\Delta_1^{3p} + \Delta_2^{3p} = 0,218$ e $\Omega_1^{3p} = \Omega_2^{3p} = 0,884$ Trad/s.
- Anulando a primeira variável interna: $\Delta_1^{3p} = 0$, $\Delta_2^{3p} = 0,218$, $\Omega_1^{3p} \in [0; 0,884]$ Trad/s e $\Omega_2^{3p} = 0,884$ Trad/s.
- Anulando a segunda variável interna: $\Delta_1^{3p} = 0,218$, $\Delta_2^{3p} = 0$, $\Omega_1^{3p} = 0,884$ Trad/s e $\Omega_2^{3p} \in [0,884; 3]$ Trad/s.

Destaca-se que as mesmas observações sobre as compensações paramétricas nos valores obtidos de MAP podem ser igualmente realizadas para o caso de estudo $2B^p$, uma vez que tratam-se dos mesmos valores ótimos, conforme a Tabela 29.

Figura 21 - Predições de frequências naturais (Solução-2): SLGS



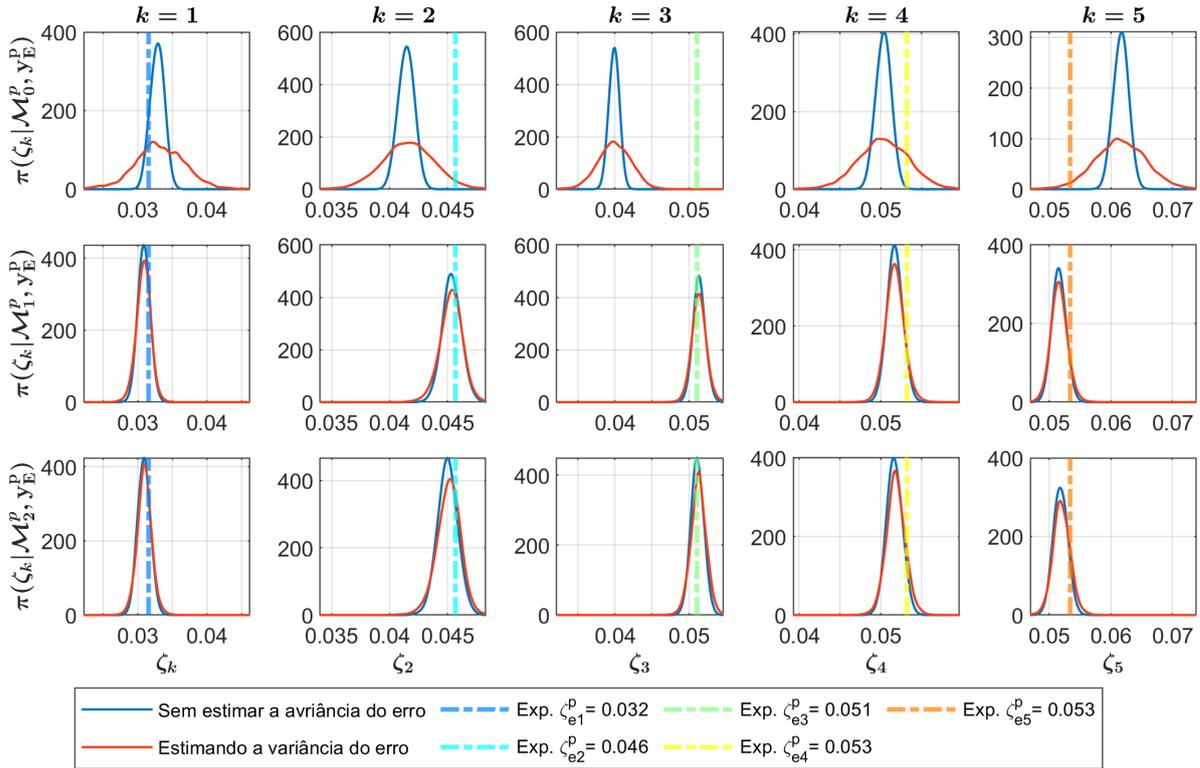
Fonte: O autor, 2021.

Nas Figuras 21 e 22 são apresentadas as predições de parâmetros modais, obtidas a partir das classes de modelos \mathcal{M}_0^p , \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p calibradas. Observa-se que a classe de modelos \mathcal{M}_0^p tem a pior qualidade preditiva em relação aos dados experimentais, enquanto que as classes de maior complexidade, \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , apresentam qualidades de ajuste, em relação aos dados experimentais, superiores e similares entre si. Faz-se necessário observar que a classe de modelos \mathcal{M}_0^p recupera relativamente bem as frequências naturais, mas não as razões de amortecimento. Quando solucionados os problemas inversos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$, em relação aos impactos da inclusão da variância do erro global aditivo como variável a ser estimada, verifica-se que há um alargamento dos suportes das PDFs dos parâmetros modais na classe de modelos \mathcal{M}_0^p e pouca alteração ocorre pelas classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p .

Na Figura 23, considerando a classe de modelos \mathcal{M}_0^p , observam-se as predições de função de resposta em frequência nos casos de estudo $1A^p$ e $1B^p$, considerando os estados amostrados da PDF a *posteriori*. O atuador foi modelado posicionado nas coordenadas espaciais $x = 0,75L_x$ e $y = 0,67L_y$ e o sensor em $x = 0,25L_x$ e $y = 0,25L_y$. Nota-se que o envelope estocástico pelo intervalo de credibilidade de 97,73% é consideravelmente expandido quando estimada a variância do erro, com tendência a cobrir as características dinâmicas do modelo de referência. Comparando às FRFs obtidas para o caso de aplicação

com nanotubo de carbono, Figura 13, verifica-se que o cenário em que o modelo adotado para gerar os dados experimentais possui apenas uma única variável interna, aparentemente, propicia que a hipótese do modelo de amortecimento viscoso para representar as dissipações do sistema seja uma opção com relativa maior qualidade preditiva. Esse fato cabe ser investigado em trabalhos futuros, considerando diferentes modelos na geração dos dados experimentais dentro do mesmo caso de aplicação.

Figura 22 - Predições de razões de amortecimento (Solução-2): SLGS

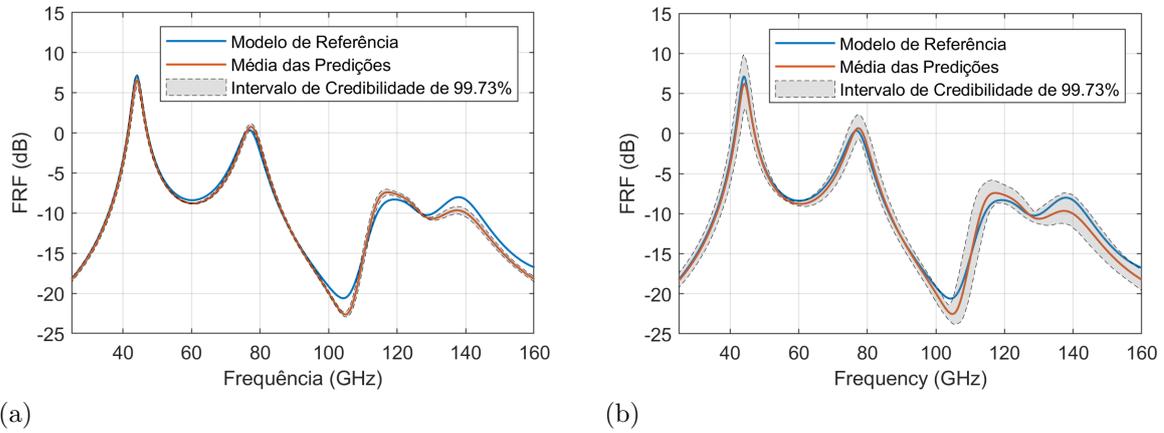


Fonte: O autor, 2021.

Por fim, na Tabela 30, para serem comparadas as predições de parâmetros modais obtidas a partir da estimativa de MAP, consideram-se os erros relativos percentuais médios, $EM(\%)$, calculados por

$$EM(\%) = \frac{1}{10} \left[\sum_{i=1}^5 \left(\frac{\omega_i^{\text{MAP}} - \omega_{ei}^p}{\omega_{ei}^p} \right) + \sum_{i=1}^5 \left(\frac{\zeta_i^{\text{MAP}} - \zeta_{ei}^p}{\zeta_{ei}^p} \right) \right] \times 100 \quad (168)$$

onde ω_{ei}^p e ζ_{ei}^p correspondem, respectivamente, à i -ésima frequência natural e à i -ésima razão de amortecimento e ω_{ei}^{MAP} e ζ_{ei}^{MAP} às respectivas estimativas de MAP da solução do problema inverso. Dessa forma, considerando os casos de estudo $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$, de acordo com a Tabela 30, a configuração paramétrica ótima para classe de modelos \mathcal{M}_0^b fornece um desvio relativo médio em relação aos dados experimentais 7,9 vezes maior que as demais classes de modelos. Em concordância com o fato de que a MAP para a classe

Figura 23 - Predições de FRFs. Casos $1A^p$ e $1B^p$ (Solução-2): SLGS

Legenda: FRFs obtidas considerando a posição do atuador foi posicionado nas coordenadas espaciais $x = 0,75L_x$ e $y = 0,67L_y$ e o sensor em $x = 0,25L_x$ e $y = 0,25L_y$

(a) Caso $1A^p$ - Não estimada a variância do ruído aditivo

(b) Caso $1B^p$ - Estimada a variância do ruído aditivo

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 30 - Predições modais considerando as estimativas de MAP segundo os casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$: SLGS

Parâmetro Modal	Valor Experimental	$A(\theta_{\text{MAP}} \mathcal{M}_i^p)$		
		\mathcal{M}_0^p	\mathcal{M}_1^p	\mathcal{M}_2^p
ω_1 (GHz)	44,15	44,04	44,05	44,05
ω_2 (GHz)	77,21	77,62	77,46	77,46
ω_3 (GHz)	114,21	114,11	114,08	114,08
ω_4 (GHz)	124,18	124,59	124,65	124,65
ω_5 (GHz)	139,30	138,60	138,78	138,78
ζ_1	0,031	0,033	0,031	0,031
ζ_2	0,046	0,041	0,045	0,045
ζ_3	0,051	0,040	0,051	0,051
ζ_4	0,050	0,050	0,052	0,052
ζ_5	0,053	0,062	0,051	0,051
Erro relativo médio percentual - EM(%):		5,69	0,72	0,72

Fonte: O autor, 2021.

de modelos \mathcal{M}_2^p ocorre recuperando a configuração paramétrica de MAP da classe de modelos \mathcal{M}_1^p , o erro relativo médio percentual apresentado na Tabela 30 é idêntico entre as classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p . Em relação à classe de modelos \mathcal{M}_1^p , a classe de modelos \mathcal{M}_2^p não é superior em qualidade de ajuste aos dados experimentais. Deste fato, dada a não identificabilidade dos parâmetros viscoelásticos, conclui-se que a classe de modelos \mathcal{M}_2^p é super-parametrizada.

3.3.5 Resultados numéricos. Problemas inversos de seleção de classes de modelos:

SLGS

As evidências das classes de modelos, obtidas das duas execuções do TMCMC, nos dois estágios de solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros propostos, Solução-1 e Solução-2; são apresentadas nas Tabelas 15 e 16, respectivamente. Tem-se as evidências obtidas nos casos de estudo $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$, quando a variância do erro aditivo global não foi estimada, e as evidências dos casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$, quando essa variância é estimada junto aos parâmetros das classes de modelos, compondo dois problemas inversos de seleção de classes de modelos. As plausibilidades das classes de modelos são atualizadas na primeira execução do TMCMC (Solução-1) e utilizadas como plausibilidades *a priori* em uma segunda solução dos problemas inversos de seleção de classes de modelos. Novamente, tem-se então três estágios de conhecimento sobre as plausibilidades das classes de modelos. Define-se que o estágio 0 consiste das expectativas *a priori*, o estágio 1, daquelas atualizadas quando consideradas as evidências obtidas na Solução-1, e o estágio 3, das plausibilidades obtidas a partir das evidências calculadas na Solução-2. Nesta aplicação, também são adotados dois cenários de conhecimento *a priori*, um em que as classes de modelos são igualmente plausíveis *a priori* e um segundo, adotando plausibilidades *a priori* informativas. Dessa forma, adotando plausibilidades iguais *a priori*, tem-se

$$P(\mathcal{M}_0^p|\mathcal{M}^p) = P(\mathcal{M}_1^p|\mathcal{M}^p) = P(\mathcal{M}_2^p|\mathcal{M}^p) = 1/3 \quad (169)$$

onde $\mathcal{M}^p = [\mathcal{M}_0^p, \mathcal{M}_1^p, \mathcal{M}_2^p]$ e, para o cenário com expectativas *a priori* informativas para as classes de modelos, adota-se

$$\begin{aligned} P(\mathcal{M}_0^p|\mathcal{M}^p) &= 0,2 \\ P(\mathcal{M}_1^p|\mathcal{M}^p) &= 0,3 \\ P(\mathcal{M}_2^p|\mathcal{M}^p) &= 0,5 \end{aligned} \quad (170)$$

Os resultados de seleção de classes de modelos são apresentados na Figura 24 e nas Tabelas 33 e 34. Na Tabela 33 são os resultados quando consideradas as classes de

modelos como igualmente prováveis a *priori* e, na Tabela 34, quando as plausibilidades são distintas a *priori*.

Tabela 31 - Evidências das classes de modelos na 1^a execução do TMCMC
(Solução-1): SLGS

Caso de Estudo	Classe de Modelo	Log-Valor Médio de <i>Verossimilhança</i>	Log-Ganho de Informação	Log-Evidência
$1A^p$	\mathcal{M}_0^p	-25,66	14,50	-40,16
$2A^p$	\mathcal{M}_1^p	24,73	13,38	11,35
$3A^p$	\mathcal{M}_2^p	24,34	14,53	9,81
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	10,42	14,20	-3,77
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	23,65	13,13	10,52
$3B^p$	\mathcal{M}_2^p	23,33	13,85	9,48

Fonte: O autor, 2021.

Tabela 32 - Evidências das classes de modelos na 2^a execução do TMCMC
(Solução-2): SLGS

Caso de Estudo	Classe de Modelo	Log-Valor Médio de <i>Verossimilhança</i>	Log-Ganho de Informação	Log-Evidência
$1A^p$	\mathcal{M}_0^p	-25,66	9,88	-35,53
$2A^p$	\mathcal{M}_1^p	24,66	8,98	15,67
$3A^p$	\mathcal{M}_2^p	24,37	9,94	14,43
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	10,82	5,84	4,99
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	23,93	8,39	15,54
$3B^p$	\mathcal{M}_2^p	23,66	9,39	14,26

Fonte: O autor, 2021.

Em relação às evidências das classes de modelos, são pontuadas as seguintes observações.

- O desempenho do algoritmo de amostragem, nos dois estágios de solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros, Solução-1 e Solução-2; é notado pelo nível de correspondência dos logaritmos dos valores médios das funções de *verossimilhança*, considerando as Tabelas 15 e 16, para os mesmos casos de estudo. Portanto, a configuração adotada para o TMCMC foi assumida como satisfatória para as investigações objetivadas. Reforça-se que este fato é importante para que os resultados

não sejam tendenciosos por conta das imprecisões numéricas do TMCMC, sobretudo nas estimativas das evidências.

- A estimação da variância do erro aditivo implica em um enfraquecimento dos termos de penalização das evidências. Para a classe de modelos \mathcal{M}_0^p , o valor médio da função de *verossimilhança* foi aumentado e, para as classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , reduzido, favorecendo, por conseguinte, a classe de modelos \mathcal{M}_0^p , que possui a pior qualidade ajuste aos dados experimentais. Em relação aos ganhos de informação, novamente, todos eles foram obtidos com tendência de redução quando estimada a variância do erro no problema inverso. Essa tendência é muito expressiva para a classe de modelos \mathcal{M}_0^p , uma vez que nesta classe de modelos houve maiores valores estimados para o parâmetro β . Diferentemente, nas classes de modelos \mathcal{M}_2^p e \mathcal{M}_3^p , tem-se $\beta \simeq 1$. Dessa forma, nas classes de modelos que melhor recuperam os dados experimentais, os impactos do enfraquecimento dos termos de penalização das evidências são muito pouco significativos.
- Comparando os valores de média do logaritmo da função de *verossimilhança*, a menor qualidade de ajuste aos dados experimentais é novamente verificada para a classe de modelos \mathcal{M}_0^p . As classes \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p apresentam qualidades de ajuste similares. Esse resultado é esperado, uma vez que, conforme verificado na Subseção 3.3.4 pelas estimativas de MAP, o melhor ajuste aos dados experimentais pela classe de modelos \mathcal{M}_2^p é obtido recuperando a configuração ótima para a classe \mathcal{M}_1^p , sem nenhuma melhoria adicional.
- Verifica-se que o uso de PDFs *a priori* mais informativas reduziu os ganhos de informação em todos os casos de estudo e, portanto, a penalização pela complexidade das classes de modelos, comparando os resultados na Tabela 15 com os respectivos na Tabela 16. Considerando as classes de modelos de maiores evidências, \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p , tem-se que os maiores fatores de Bayes são $BF_{\mathcal{M}_1^p|\mathcal{M}_2^p} = 4,66$ e $BF_{\mathcal{M}_1^p|\mathcal{M}_2^p} = 3,47$, respectivamente, para as duas soluções obtidas dos problemas inversos, a Solução-1 e a Solução-2. Pela escala proposta por Jeffreys (1948), ocorrem evidências substanciais em favor da classe de modelos \mathcal{M}_1^p nas soluções dos problemas inversos, sendo os respectivos fatores de Bayes convergentes no sentido de evidenciar a classe \mathcal{M}_1^p , independente dos níveis informativos nas diferentes PDFs *a priori* escolhidas.

Dos resultados de seleção de classes de modelos por inferência Bayesiana apresentados nas Tabelas 33 e 34 e na Figura 24, realizam-se as observações e conclusões listadas a seguir.

- A classe de modelos \mathcal{M}_0^p possui plausibilidades *a posteriori* quase nulas em todos os cenários analisados. O resultado está de acordo com os resultados da Subseção

Tabela 33 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos igualmente prováveis a priori: SLGS

Casos de Estudo	Classes de Modelo	$P(\mathcal{M}_i^p \mathcal{M}^p)$ (%)		
		Estágio 0	Estágio 1	Estágio 2
$1A^p$	\mathcal{M}_0^p	1/3	0,00	0,00
$2A^p$	\mathcal{M}_1^p	1/3	82,33	94,18
$3A^p$	\mathcal{M}_2^p	1/3	17,67	5,82
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	1/3	0,00	0,00
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	1/3	73,88	91,07
$3B^p$	\mathcal{M}_2^p	1/3	26,12	8,93

Fonte: O autor, 2021.

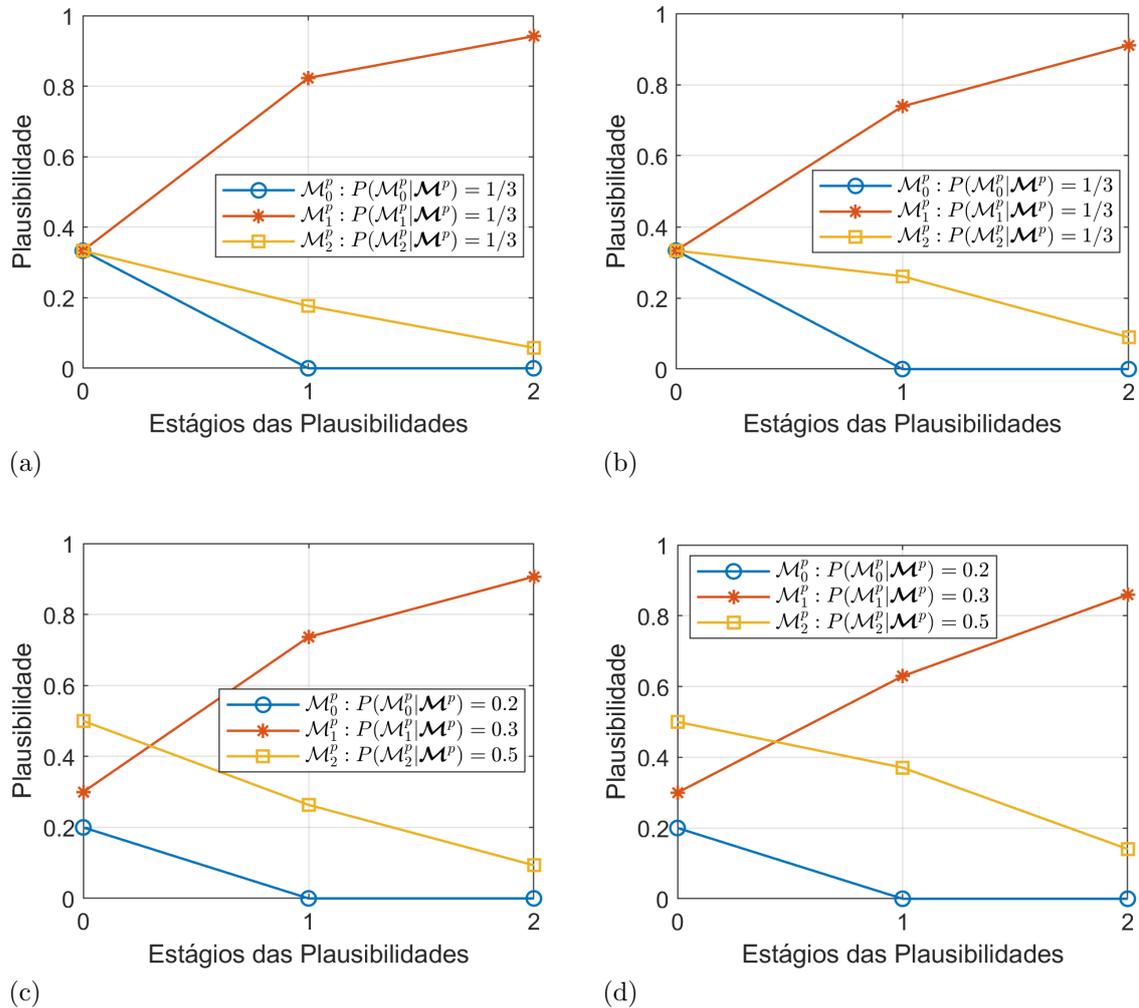
3.3.4 e com os valores de evidência obtidos. Comparada com as demais, essa é a classe de modelos que apresenta uma qualidade de ajuste aos dados experimentais muito inferior e, por conseguinte, possui os menores valores de evidência.

Tabela 34 - Plausibilidades das classes de modelos. Classes de modelos distintamente prováveis a priori: SLGS

Casos de Estudo	Classes de Modelo	$P(\mathcal{M}_i^p \mathcal{M}^p)$ (%)		
		Estágio 0	Estágio 1	Estágio 2
$1A^p$	\mathcal{M}_0^p	0,2	0,00	0,00
$2A^p$	\mathcal{M}_1^p	0,3	73,65	90,66
$3A^p$	\mathcal{M}_2^p	0,5	26,35	9,34
$1B^p$	\mathcal{M}_0^p	0,2	0,00	0,00
$2B^p$	\mathcal{M}_1^p	0,3	62,92	85,96
$3B^p$	\mathcal{M}_2^p	0,5	37,08	14,04

Fonte: O autor, 2021.

- Uma vez que houve o enfraquecimento das penalizações que compõem as evidências das classes de modelos quando estimada a variância do erro aditivo, as plausibilidades a posteriori das classes de modelos foram obtidas em valores mais aproximados nos casos de estudo $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$. Os impactos nas plausibilidades das classes de modelos \mathcal{M}_1^p e \mathcal{M}_2^p foram, no máximo, em torno de 10% em favor da classe de modelos \mathcal{M}_2^p , não sendo capaz da alteração da ordem do ranqueamento final das classes de modelos em nenhum dos cenários avaliados.

Figura 24 - Plausibilidades a *posteriori* das classes de modelos: SLGS

Legenda: (a) Casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$ (Sem estimar a variância do erro): Classes de modelos igualmente plausíveis a *priori*
 (b) Casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$ (Estimando a variância do erro): Classes de modelos igualmente plausíveis a *priori*
 (c) Casos $1A^p$, $2A^p$ e $3A^p$ (Sem estimar a variância do erro): Classes de modelos com plausibilidades distintas a *priori*.
 (d) Casos $1B^p$, $2B^p$ e $3B^p$ (Estimando a variância do erro): Classes de modelos com plausibilidades distintas a *priori*.

Fonte: O autor, 2021.

- As plausibilidades a *posteriori* se mostraram afetadas pela natureza informativa das plausibilidades a *priori* escolhidas para as classes de modelos propostas. Podem ser comparados os resultados das Figuras 15a e 15b com os respectivos nas Figuras 15c e 15d. Os impactos também foram na ordem de 10% para os resultados do primeiro

estágio de plausibilidades e em torno de 5% no segundo estágio de plausibilidades, em favor da classe de modelos \mathcal{M}_2^p , com a adoção de plausibilidades *a priori* mais informativas.

- Da primeira para a segunda solução dos problemas inversos de seleção de classes de modelos, houve um aumento da diferença nos valores de plausibilidade obtidos. O maior impacto foi de um ganho de 17,2% de plausibilidade relativa em favor da classe de modelos \mathcal{M}_1^p , conforme pode ser observado na Figura 24 e nas Tabelas 33 e 34. Ademais, os fatores de Bayes ocorrem com pesos similares de decisão em favor da classe de modelos \mathcal{M}_1^p e o principal ponto é que as duas soluções dos problemas inversos são convergentes na seleção da classe de modelos \mathcal{M}_1^p .

De forma análoga aos resultados obtidos para o caso de aplicação de nanotubo de carbono como viga em vibração transversal, é identificada a classe de modelos \mathcal{M}_1^p , que, justamente, é aquela com maior similaridade ao modelo de referência utilizado para a geração dos dados experimentais. Também de semelhante forma, a classe de modelos mais complexa, \mathcal{M}_2^p , consegue oferecer uma qualidade preditiva similar, porém é penalizada por possuir maior quantidade de parâmetros. O fato que mais destaca esse caso de aplicação em relação ao anterior é que, diferentemente, os dois estágios de solução foram convergentes. Em outras palavras, as diferenças de nível informativo nas PDFs *a priori* foram menos significativas neste caso de aplicação. Por fim, reitera-se que todos os resultados estão em concordância com todas as observações discutidas nos resultados de estimação de parâmetros na Subseção 3.3.4 e o ranqueamento das classes de modelos pelas plausibilidades *a posteriori* foi indiferente em todos os cenários avaliados, demonstrando-se, novamente, a relativa robustez nos resultados obtidos.

CONCLUSÃO

Na presente tese, foi realizada a proposição de modelos não-locais viscoelásticos de vigas e placas e a formulação e solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e de seleção de modelos por inferência Bayesiana.

Em termos de modelagem, além da viscoelasticidade (não-localidade temporal) e efeitos de escala (não-localidade espacial), foram incluídas as ações de amortecimento viscoso e de carregamentos transversais externos generalizados. Abordou-se a Teoria da Elasticidade Não-Local proposta por Eringen (1983), reportada na literatura como apropriada para se equacionar efeitos de escala em nanossistemas, e o comportamento viscoelástico abordado segundo o conceito de variáveis internas. A contribuição em modelagem de vigas e placas não-locais viscoelásticas foi realizada desde o desenvolvimento das equações de movimento pelo princípio generalizado de Hamilton à proposição de modelos discretizados espacialmente segundo o Método dos Elementos Finitos. Ademais, para a modelagem de vigas foi adotado o modelo de viga de Euler-Bernoulli e, para a modelagem de placas, o modelo de placas de Kirchhoff, adotando que as propriedades viscoelásticas possuem variabilidade espacial, sendo funções das coordenadas espaciais dos sistemas. Essa variabilidade espacial foi introduzida por campos aleatórios Gaussianos pela expansão de Karhunen–Loève, possibilitando modelos de elementos finitos estocásticos de vigas e placas.

Com respeito à formulação e à solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, foram abordados os fundamentos da formulação de problemas inversos pelo formalismo Bayesiano, notadamente a construção da função de *verossimilhança*, as PDFs *a priori* dos parâmetros e seus impactos nas inferências, a obtenção de propriedades estatísticas sobre os parâmetros estimados a partir de métodos MCMC para a exploração das PDFs *a posteriori* dos parâmetros, os conceitos envolvendo as evidências das classes de modelos como critério para seleção de classes de modelos e, por fim, o algoritmo TMCMC, utilizado nesta tese por possibilitar amostragem da PDF *a posteriori* dos parâmetros e, como subproduto, as evidências das classes de modelos.

Nas exemplificações numéricas em solução de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, dados pseudo-experimentais de parâmetros modais, frequências naturais e razões de amortecimento, foram gerados sinteticamente por modelos não-locais em que as propriedades viscoelásticas são descritas plenamente quando adotada a hipótese de variabilidade espacial dos parâmetros viscoelásticos. Esses foram denominados como modelos de referência ou perfeitos para a descrição do sistema observado experimentalmente. Dois casos de aplicação foram considerados, um consistindo de um nanotubo de carbono de única parede como viga e outro de uma lâmina de grafeno de única camada como placa, ambos em vibração transversal amortecida. Na construção

dos problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos, a viscoelasticidade foi assumida como espacialmente homogênea nas classes de modelos propostas para inferência. O erro aditivo foi modelado aplicando um ruído Gaussiano de média nula e duas hipóteses foram investigadas na construção da função de *verossimilhança*, que foi a inclusão ou não da variância do ruído como variável aleatória a ser estimada junto aos parâmetros desconhecidos. Além disso, discutiu-se o impacto de níveis de conhecimento *a priori* impostos sobre os parâmetros dos modelos e sobre as plausibilidades das classes de modelos, gerando-se dois cenários, um menos informativo e generalizado e outro mais informativo e assertivo sobre as propriedades dos sistemas. O algoritmo TMCMC foi adotado para a amostragem da PDF *a posteriori* dos parâmetros e o comportamento do algoritmo de amostragem avaliado para a obtenção de propriedades estatísticas acuradas sobre os parâmetros dos modelos e, por conseguinte, das predições teóricas obtidas e das respectivas evidências.

Da solução dos problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos por inferência Bayesiana, conclui-se os seguintes tópicos.

- Ao se estimar a variância do ruído aditivo, enfraquecem-se as penalizações que compõem as evidências das classes de modelos. Porém, esse efeito é pouco significativo quando as classes de modelos em questão recuperam de forma satisfatória os dados experimentais, notadamente quando a escala da matriz de variância do erro não é significativamente alterada ($\beta \simeq 1$).
- Em relação aos impactos de diferentes níveis de conhecimento *a priori* sobre os parâmetros dos modelos, tem-se que as PDFs *a priori* mais informativas reduzem o efeito da penalização de modelos complexos, como já seria esperado. A escolha das PDFs *a priori* deve ser decidida com o julgamento crítico de como as evidências são comprometidas pelo ganho de informação em função das PDFs *a priori* dos parâmetros. Nos casos de aplicação, nos diferentes problemas inversos propostos, as PDFs *a priori* mais informativas não alteraram os ranqueamentos obtidos. Entretanto, as plausibilidades podem ser afetadas significativamente, como pode ser notado no caso de aplicação da lâmina de grafeno como placa em vibração transversal amortecida. Neste exemplo em particular, um percentual de 17,2% a mais em plausibilidade relativa foi observado, porém em favor do resultado verificado no primeiro ranqueamento das classes de modelos pelas plausibilidades, quando realizada a Solução-1 dos problemas inversos.
- O algoritmo TMCMC teve um desempenho relativamente satisfatório para os problemas inversos investigados, observado por meio das PDFs *a posteriori* dos parâmetros, das características preditivas das classes de modelos e dos valores coerentes obtidos para as evidências das classes de modelos, de forma que todas as observações sobre

os resultados foram plenamente de acordo entre si. A dificuldade maior ocorreu para a calibração do algoritmo nos problemas inversos no caso de aplicação de um nanotubo de carbono como viga, tendo sido explicitados os motivos pelos quais alguns ajustes nos parâmetros do algoritmo foram necessários, como a queda das taxas de aceitação nos passos de MH ao longo dos avanços em estágios no TMCMC.

Por fim, a metodologia de análise de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de modelos por inferência Bayesiana abordada nesta tese é uma contribuição para o estudo de modelos de nanossistemas, assim como todos os tópicos em modelagem de efeitos de escala e amortecimento abordados. Para trabalhos futuros, são reconhecidos os tópicos que seguem.

- Análises complementares de propagação de incertezas e paramétricas dos modelos abordados.
- Investigação do uso de versões otimizadas do algoritmo TMCMC nos problemas inversos investigados. Como exemplo, poderiam ser consideradas as melhorias ao algoritmo propostas por Betz, Papaioannou e Straub (2016).
- Construção e solução de problemas inversos considerando dados advindos de simulações atomísticas de nanossistemas, como o método da Dinâmica Molecular, ou dados experimentais reais de nanoestruturas, conhecimentos *a priori* baseados em cenários de aplicação reais e medições experimentais reais.
- Possibilidades em termos da geração de dados experimentais sintéticos e da proposição de classes de modelos para inferência. Pode-se considerar outras teorias não-locais além da Teoria da Elasticidade Não-Local de Eringen (1983). Em termos da não-localidade espacial, a título de exemplo, tem-se a Teoria Não-Local do Gradiente de Deformação (LIM; ZHANG; REDDY, 2015), consistindo de um outro modelo não-local para formulação de problemas inversos de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos. Modelos de referência de diferentes níveis de complexidade podem ser explorados e analisadas como essas configurações impactam nas capacidades preditivas das classes de modelos propostas na inversão. Análises futuras poderiam também ocorrer considerando diferentes formas de amortecimento, viscoso e viscoelástico, por exemplo. Nessa perspectiva, compensações paramétricas adicionais ocorreriam e seriam um estudo complementar às análises apresentadas.

REFERÊNCIAS

- ADHIKARI, S.; CHOWDHURY, R. Zeptogram sensing from gigahertz vibration: Graphene based nanosensor. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 44, n. 7-8, p. 1528–1534, 2012.
- ADHIKARI, S.; FRISWELL, M. I. Distributed parameter model updating using the Karhunen–Loève expansion. *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 24, n. 2, p. 326–339, 2010.
- ADHIKARI, S.; GILCHRIST, D.; MURMU, T.; MCCARTHY, M. Nonlocal normal modes in nanoscale dynamical systems. *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 60, p. 583–603, 2015.
- AHMADI, H. R.; RAHIMI, Z.; SUMELKA, W. Thermoelastic damping in orthotropic and isotropic NEMS resonators accounting for double nonlocal thermoelastic effects. *Journal of Thermal Stresses*, v. 44, n. 3, p. 342–358, 2021.
- AKBAS, S. D. Modal analysis of viscoelastic nanorods under an axially harmonic load. *Advances in nano research*, v. 8, n. 4, p. 277–282, 2020.
- AKGÖZ, B.; CIVALEK, Ö. Strain gradient elasticity and modified couple stress models for buckling analysis of axially loaded micro-scaled beams. *International Journal of Engineering Science*, v. 49, n. 11, p. 1268–1280, 2011.
- AKSENCER, T.; AYDOGDU, M. Levy type solution method for vibration and buckling of nanoplates using nonlocal elasticity theory. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 43, n. 4, p. 954–959, 2011.
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. Phase transition for a hard sphere system. *The Journal of chemical physics*, v. 27, n. 5, p. 1208–1209, 1957.
- _____. Studies in molecular dynamics. I. General method. *The Journal of Chemical Physics*, v. 31, n. 2, p. 459–466, 1959.
- ALTEKAR, G.; DWARKADAS, S.; HUELSENBECK, J. P.; RONQUIST, F. Parallel metropolis coupled Markov chain Monte Carlo for Bayesian phylogenetic inference. *Bioinformatics*, v. 20, n. 3, p. 407–415, 2004.
- ANDRIEU, C.; THOMS, J. A tutorial on adaptive MCMC. *Statistics and computing*, v. 18, n. 4, p. 343–373, 2008.
- ANSARI, R.; OSKOUIE, M. F.; SADEGHI, F.; BAZDID-VAHDATI, M. Free vibration of fractional viscoelastic Timoshenko nanobeams using the nonlocal elasticity theory. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, v. 74, p. 318–327, 2015.
- ANSARI, R.; SAHMANI, S. Small scale effect on vibrational response of single-walled carbon nanotubes with different boundary conditions based on nonlocal beam models. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 17, n. 4, p. 1965–1979, 2012.

- ANSARI, R.; SAHMANI, S.; ARASH, B. Nonlocal plate model for free vibrations of single-layered graphene sheets. *Physics Letters A*, v. 375, n. 1, p. 53–62, 2010.
- ARASH, B.; ANSARI, R. Evaluation of nonlocal parameter in the vibrations of single-walled carbon nanotubes with initial strain. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 42, p. 2058–2064, 2010.
- ARASH, B.; WANG, Q. Vibration of single-and double-layered graphene sheets. *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*, v. 2, n. 1, 2011.
- _____. A review on the application of nonlocal elastic models in modeling of carbon nanotubes and graphenes. *Computational materials science*, v. 51, p. 303–313, 2012.
- AREFI, A.; SALIMI, M. Investigations on vibration and buckling of carbon nanotubes with small initial curvature by nonlocal elasticity theory. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, v. 23, n. 2, p. 105–112, 2015.
- ARLETT, J.; MYERS, E.; ROUKES, M. Comparative advantages of mechanical biosensors. *Nature nanotechnology*, v. 6, p. 203–215, 2011.
- BAGLEY, R. L.; TORVIK, J. Fractional calculus-A different approach to the analysis of viscoelastically damped structures. *AIAA journal*, v. 21, p. 741–748, 1983.
- BALBINO, F. O.; PRÉVE, C. T.; MUNARO, M.; JUNIOR, P. J. R.; LOPES, E. M. de O. Wide estimation of dynamic properties of viscoelastic materials using bayesian inference. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, v. 59, n. 3, p. 369–384, 2021.
- BECK, J. L. Bayesian system identification based on probability logic. *Structural Control and Health Monitoring*, v. 17, n. 7, p. 825–847, 2010.
- BECK, J. L.; YUEN, K.-V. Model selection using response measurements: Bayesian probabilistic approach. *Journal of Engineering Mechanics*, v. 130, p. 192–203, 2004.
- BETZ, W.; PAPAIOANNOU, I.; STRAUB, D. Transitional markov chain monte carlo: observations and improvements. *Journal of Engineering Mechanics*, v. 142, n. 5, p. 04016016, 2016.
- BIOT, M. A. Theory of stress strain relations in anisotropic viscoelasticity and relaxation phenomena. *Journal of Applied Physics*, v. 25, p. 1385–1391, 1954.
- BORGES, F. C. L.; CASTELLO, D. A.; MAGLUTA, C.; ROCHINHA, F. A.; ROITMAN, N. An experimental assessment of internal variables constitutive models for viscoelastic materials. *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 50, p. 27–40, 2015.
- BORGES, F. C. L.; ROITMAN, N.; MAGLUTA, C.; CASTELLO, D. A.; FRANCISS, R. A concept to reduce vibrations in steel catenary risers by the use of viscoelastic materials. *Ocean Engineering*, v. 77, p. 1–11, 2014.
- BOTEV, Z. I.; GROTOWSKI, J. F.; KROESE, D. P. Kernel density estimation via diffusion. *The annals of Statistics*, v. 38, n. 5, p. 2916–2957, 2010.
- BRYNJARSDÓTTIR, J.; O'HAGAN, A. Learning about physical parameters: The importance of model discrepancy. *Inverse problems*, v. 30, n. 11, p. 114007(24pp), 2014.

- BUNCH, J. S. et al. Electromechanical resonators from graphene sheets. *Science*, v. 315, n. 5811, p. 490–493, 2007.
- BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. *Model selection and inference: a practical information-theoretical approach*. New York: Springer-Verlag, 1998.
- CAJIĆ, M.; KARLIČIĆ, D.; LAZAREVIĆ, M. Nonlocal vibration of a fractional order viscoelastic nanobeam with attached nanoparticle. *Theoretical and Applied Mechanics*, v. 42, n. 3, p. 167–190, 2015.
- _____. Damped vibration of a nonlocal nanobeam resting on viscoelastic foundation: fractional derivative model with two retardation times and fractional parameters. *Meccanica*, v. 52, n. 1, p. 363–382, 2017.
- CAJIĆ, M.; LAZAREVIĆ, M.; KARLIČIĆ, D.; SUN, H.; LIU, X. Fractional-order model for the vibration of a nanobeam influenced by an axial magnetic field and attached nanoparticles. *Acta Mechanica*, v. 229, n. 12, p. 4791–4815, 2018.
- CASTELLO, D. A. *Modelagem e identificação de materiais viscoelásticos no domínio do tempo*. 2004. 156 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004.
- CASTELLO, D. A.; ROCHINHA, F. A.; ROITMAN, N.; MAGLUTA, C. Constitutive parameter estimation of a viscoelastic model with internal variables. *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 22, n. 8, p. 1840–1857, 2008.
- CHASTE, J. et al. A nanomechanical mass sensor with yoctogram resolution. *Nature Nanotechnology*, v. 7, n. 5, p. 301–304, 2012.
- CHEN, C.; MA, M.; LIU, J. Z.; ZHENG, Q.; XU, Z. Viscous damping of nanobeam resonators: Humidity, thermal noise, and a paddling effect. *Journal of Applied Physics*, v. 110, n. 3, p. 034320, 2011.
- CHEUNG, S. H.; BECK, J. L. Calculation of posterior probabilities for Bayesian model class assessment and averaging from posterior samples based on dynamic system data. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, v. 25, n. 5, p. 304–321, 2010.
- CHING, J.; CHEN, Y.-C. Transitional Markov chain Monte Carlo method for Bayesian model updating, model class selection, and model averaging. *Journal of engineering mechanics*, v. 133, n. 7, p. 816–832, 2007.
- CHING, J.; WANG, J.-S. Application of the transitional Markov chain Monte Carlo algorithm to probabilistic site characterization. *Engineering Geology*, Elsevier, v. 203, p. 151–167, 2016.
- CUI, Z.; GU, C. Nanofabrication challenges for NEMS. In: IEEE, 1., 2006. *2006 1st IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems*. Zhuhai, 2006. p. 607–610.
- CZEKANSKI, A.; ZOZULYA, V. V. Vibration analysis of nonlocal beams using higher-order theory and comparison with classical models. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, v. 28, n. 12, p. 1293–1309, 2021.

- DUAN, W. H.; WANG, C. M.; ZHANG, Y. Y. Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics. *Journal of applied physics*, v. 101, p. 24305, 2007.
- EHLERS, R. S. *Inferência Bayesiana*. Departamento de Matemática Aplicada e Estatística, ICMC-USP, 2011. 102 p. Disponível em: <http://conteudo.icmc.usp.br/pessoas/ehlers/bayes/bayes.pdf>. Acesso em: 10, dezembro. 2016.
- EICHLER, A. et al. Nonlinear damping in mechanical resonators made from carbon nanotubes and graphene. *Nature Nanotechnology*, v. 6, n. 6, p. 339–342, 2011.
- ELTAHER, M. A.; ALSHORBAGY, A. E.; MAHMOUD, F. F. Vibration analysis of Euler-Bernoulli nanobeams by using Finite Element Method. *Applied Mathematical Modelling*, v. 37, p. 4787–4797, 2013.
- ELTAHER, M. A.; KHATER, M. E.; EMAM, S. A. A review on nonlocal elastic models for bending, buckling, vibrations, and wave propagation of nanoscale beams. *Applied Mathematical Modelling*, v. 40, p. 4109–4128, 2016.
- ERINGEN, A. C. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves. *Journal of applied physics*, v. 54, p. 4703–4710, 1983.
- _____. *Nonlocal continuum field theories*. 1. ed. New York: Springer-Verlag, 2002. 376 p.
- EWOLDT, R. H.; BHARADWAJ, N. A. Low-dimensional intrinsic material functions for nonlinear viscoelasticity. *Rheologica Acta*, v. 52, n. 3, p. 201–219, 2013.
- FARIA, D. de S. *Estimação de parâmetros em modelos contínuos não-locais via método de Monte Carlo com Cadeias de Markov*. 2017. 112 p. Tese (Mestrado em Modelagem Computacional) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.
- FARIA, D. S.; STUTZ, L. T.; CASTELLO, D. A. Nonlocal viscoelastic Euler-Bernoulli beam model: a Bayesian approach for parameter estimation using the delayed rejection adaptive metropolis algorithm. *Inverse Problems in Science and Engineering*, p. 1–30, 2020.
- FARR, B.; KALOGERA, V.; LUIJTEN, E. A more efficient approach to parallel-tempered Markov-chain Monte Carlo for the highly structured posteriors of gravitational-wave signals. *Physical Review D*, v. 90, n. 2, p. 024014, 2014.
- FOX, C.; NICHOLLS, G. K.; TAN, S. M. *An introduction to inverse problems*. Otago Electronics Group, 2010. 184 p. Disponível em: http://elec.otago.ac.nz/w/images/1/19/ELEC404.Inverse_Problems.pdf. Acesso em: 10, dezembro. 2016.
- FREUND, J. B.; EWOLDT, R. H. Quantitative rheological model selection: Good fits versus credible models using Bayesian inference. *Journal of Rheology*, v. 59, n. 3, p. 667–701, 2015.
- GEYER, C. J. Markov chain Monte Carlo maximum likelihood. In: INTERFACE FOUNDATION OF NORTH AMERICA, 23rd., 1991. *Computing Science and Statistics, Proceedings of the 23rd Symposium on the Interface*. Washington, 1991. p. 156–163.

- GHANEM, R. G.; SPANOS, P. D. *Stochastic finite elements: a spectral approach*. New York: Dover Publications, 2003. 222 p.
- GHANIPOUR, A. R.; GHAVANLOO, E. Propagation of uncertainty in free vibration of graphene sheet rested on elastic foundation. *Materials Research Express*, v. 6, n. 6, p. 065601, 2019.
- GHANIPOUR, A. R.; GHAVANLOO, E.; FAZELZADEH, S. A.; POURESMAEELI, S. Uncertainty propagation in the buckling behavior of few-layer graphene sheets. *Microsystem Technologies*, v. 24, n. 2, p. 1167–1177, 2018.
- GHAVANLOO, E.; FAZELZADEH, S. A. Evaluation of nonlocal parameter for single-walled carbon nanotubes with arbitrary chirality. *Meccanica*, v. 51, n. 1, p. 41–54, 2016.
- GOLLA, D. F.; HUGHES, P. C. Dynamics of viscoelastic structures—a time-domain, finite element formulation. *Journal of Applied Mechanics*, v. 52, p. 897–906, 1985.
- GREGORY, P. *Bayesian Logical Data Analysis for the Physical Sciences: A comparative approach with mathematica®support*. New York: Cambridge University Press, 2005. 468 p.
- GUTIERREZ, D. L. *Engineering viscoelasticity*. New York: Springer, 2014. 353 p.
- HAARIO, H.; LAINE, M.; MIRA, A.; SAKSMAN, E. DRAM: efficient adaptive MCMC. *Statistics and Computing*, v. 16, p. 339–354, 2006.
- HAARIO, H.; SAKSMAN, E.; TAMMINEN, J. An adaptive Metropolis algorithm. *Bernoulli*, v. 7, n. 2, p. 223–242, 2001.
- HAARIO, H. von; HERTZEN, R.; KARTTUNEN, A. T.; JORKAMA, M. Identification of the viscoelastic parameters of a polymer model by the aid of a MCMC method. *Mechanics Research Communications*, v. 61, p. 1–6, 2014.
- HARTMANN, M. A.; TODT, M.; RAMMERSTORFER, F. G.; FISCHER, F. D.; PARIS, O. Elastic properties of graphene obtained by computational mechanical tests. *Europhysics Letters*, v. 103, n. 6, p. 68004, 2013.
- HASTINGS, W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, v. 57, p. 97–109, 1970.
- HENRIQUES, I. R.; BORGES, L. A.; CASTELLO, D. A. The mechanical behavior of viscoelastic materials in the frequency domain. In: DINAME, XIX., 2017. *Proceedings of DINAME 2017*. São Sebastião, 2017. p. 65–81.
- HERNANDEZ, W.; BORGES, F.; CASTELLO, D.; ROITMAN, N.; MAGLUTA, C. Bayesian inference applied on model calibration of fractional derivative viscoelastic model. In: DINAME, XVII., 2015. *Proceedings of the XVII International Symposium on Dynamic Problems of Mechanics*. Natal: ABCM, 2015. p. 1–5.
- HERNÁNDEZ, W. P.; CASTELLO, D. A.; MATT, C. F. T. On the model building for transmission line cables: a Bayesian approach. *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 26, n. 12, p. 1784–1812, 2018.

- HINCHLIFFE, A. *Molecular modelling for beginners*. 2. ed. United Kingdom: John Wiley & Sons, 2008. 411 p.
- HUANG, Y.; WU, J.; HWANG, K.-C. Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes. *Physical review B*, v. 74, n. 24, p. 245413, 2006.
- HUANG, Z.; WANG, X.; WU, N.; CHU, F.; LUO, J. A Finite Element Model for the Vibration Analysis of Sandwich Beam with Frequency-Dependent Viscoelastic Material Core. *Materials*, v. 12, n. 20, p. 3390(15), 2019.
- HUTTEL, A. K. et al. Carbon nanotubes as ultrahigh quality factor mechanical resonators. *Nano letters*, v. 9, n. 7, p. 2547–2552, 2009.
- INMAN, D. J. *Engineering vibration*. 4. ed. New Jersey: PEARSON, 2014. 707 p.
- JEFFREYS, H. *The theory of probability*. 2. ed. New York: Oxford University Press, 1948. 411 p.
- JENA, S. K.; CHAKRAVERTY, S.; JENA, R. M. Propagation of uncertainty in free vibration of Euler–Bernoulli nanobeam. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 41, n. 436, p. 1–18, 2019.
- JENA, S. K.; CHAKRAVERTY, S.; MALIKAN, M. Implementation of non-probabilistic methods for stability analysis of nonlocal beam with structural uncertainties. *Engineering with Computers*, p. 1–13, 2020.
- JENSEN, K.; KIM, K.; ZETTL, A. An atomic-resolution nanomechanical mass sensor. *Nature nanotechnology*, v. 3, n. 9, p. 533–537, 2008.
- KAIPIO, J.; SOMERSALO, E. *Statistical and computational inverse problems*. New York: Springer Science & Business Media, 2006. 339 p.
- KARATHANASOPOULOS, N.; GANGHOFFER, J.-F. Exploiting viscoelastic experimental observations and numerical simulations to infer biomimetic artificial tendon fiber designs. *Frontiers in bioengineering and biotechnology*, v. 7, p. 85, 2019.
- KARLIČIĆ, D.; CAJIĆ, M.; ADHIKARI, S.; KOZIĆ, P.; MURMU, T. Vibrating nonlocal multi-nanoplate system under inplane magnetic field. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, v. 64, p. 29–45, 2017.
- KARLIČIĆ, D. et al. Nonlocal mass-nanosensor model based on the damped vibration of single-layer graphene sheet influenced by in-plane magnetic field. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 96, p. 132–142, 2015.
- KARLIČIĆ, D.; KOZIĆ, P.; MURMU, T.; ADHIKARI, S. Vibration insight of a nonlocal viscoelastic coupled multi-nanorod system. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, v. 54, p. 132–145, 2015.
- KARLIČIĆ, D.; MURMU, T.; ADHIKARI, S.; MCCARTHY, M. *Non-local Structural Mechanics*. Hoboken: John Wiley & Sons; London: ISTE, 2016. 354 p.
- KASS, R. E.; RAFTERY, A. E. Bayes Factors. *Journal of the American Statistical Association*, v. 90, n. 430, p. 773–795, 1995.

- KE, C.; ESPINOSA, H. D. Nanoelectromechanical systems and modeling. In: RIETH, M.; SCHOMMERS, W.; GENNES, P. G. (Ed.). *Handbook of theoretical and computational nanotechnology*. California: American Scientific Publishers, 2005. v. 1, cap. 121, p. 1–38.
- KENNEDY, M. C.; O'HAGAN, A. Bayesian calibration of computer models. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, v. 63, n. 3, p. 425–464, 2001.
- KHOSRAVI, F.; HOSSEINI, S. A. On the viscoelastic carbon nanotube mass nanosensor using torsional forced vibration and Eringen's nonlocal model. *Mechanics Based Design of Structures and Machines*, v. 0, n. 0, p. 1–24, 2020.
- KOITER, W. T. Couple-stresses in the theory of elasticity, i and ii. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London B*, v. 67, p. 17–44.
- KOLEHMAINEN, V.; TARVAINEN, T.; ARRIDGE, S. R.; KAPIO, J. P. Marginalization of uninteresting distributed parameters in inverse problems-application to diffuse optical tomography. *International Journal for Uncertainty Quantification*, v. 1, n. 1, p. 1–17, 2011.
- KOTAKOSKI, J.; KRASHENINNIKOV, A. V.; KAISER, U.; MEYER, J. C. From point defects in graphene to two-dimensional amorphous carbon. *Physical Review Letters*, v. 106, n. 10, p. 105505, 2011.
- KRAUTHAMMER, T.; VENTSEL, E. *Thin Plates and Shells: Theory, Analysis and Applications*. New York: Marcel Dekker, Inc., 2001. 666 p.
- KRISHNAN, A.; DUJARDIN, E.; EBBESEN, T. W.; YIANILOS, P. N.; TREACY, M. M. J. Young's modulus of single-walled nanotubes. *Physical review B*, v. 58, n. 20, p. 14013, 1998.
- KULLBACK, S.; LEIBLER, R. A. On information and sufficiency. *The annals of mathematical statistics*, v. 22, n. 1, p. 79–86, 1951.
- LAM, D. C. C.; YANG, F.; CHONG, A. C. M.; WANG, J.; TONG, P. Experiments and theory in strain gradient elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 51, n. 8, p. 1477–1508, 2003.
- LECOMTE, C.; FORSTER, J. J.; MACE, B. R.; FERGUSON, N. S. Bayesian damage localisation at higher frequencies with Gaussian process error. In: SIMMERMACHER, T.; COGAN, S.; HORTA, L.; BARTHORPE, R. (Ed.). *Topics in Model Validation and Uncertainty Quantification*. New York: Springer, 2012. v. 4, cap. 4, p. 39–48.
- LEE, C.; WEI, X.; KYSAR, J. W. W.; HONE, J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *SCIENCE*, v. 321, n. 5887, p. 385–388, 2008.
- LEE, J.-L.; LIN, C.-B. The magnetic viscous damping effect on the natural frequency of a beam plate subject to an in-plane magnetic field. *Journal of Applied Mechanics*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 77, n. 1, p. 011014, 2010.

- LEI, Y.; ADHIKARI, S.; FRISWELL, M. Vibration of nonlocal Kelvin-Voigt viscoelastic damped Timoshenko beams. *International Journal of Engineering Science*, v. 66, p. 1–13, 2013.
- LEI, Y.; MURMU, T.; ADHIKARI, S.; FRISWELL, M. I. Dynamic characteristics of damped viscoelastic nonlocal Euler-Bernoulli beams. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, v. 42, p. 125–136, 2013.
- LEIMKUHNER, B.; MATTHEWS, C. *Molecular Dynamics with Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. Switzerland: Springer, 2016. 443 p.
- LEMAITRE, J.; CHABOCHE, J.-L. *Mechanics of solid materials*. New York: Cambridge university press, 1994. 556 p.
- LESIEUTRE, G.; BIANCHINI, E. Time domain modeling of linear viscoelasticity using anelastic displacement fields. *Journal of vibration and acoustics*, v. 117, p. 424–430, 1995.
- LESIEUTRE, G. A.; LEE, U. A finite element for beams having segmented active constrained layers with frequency-dependent viscoelastics. *Smart Materials and Structures*, v. 5, n. 5, p. 615–627, 1996.
- LESIEUTRE, G. A.; MINGORI, D. L. Finite element modeling of frequency-dependent material damping using augmenting thermodynamic fields. *Journal of Guidance, Control, and Dynamics*, v. 13, p. 1040–1050, 1990.
- LIANG, F.; LIU, C.; CARROLL, R. *Advanced Markov Chain Monte Carlo methods: learning from past samples*. 1. ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2010. 757 p.
- LIANG, Y.; HAN, Q. Prediction of nonlocal scale parameter for carbon nanotubes. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, v. 55, p. 1670–1678, 2012.
- LIFSHITZ, R.; ROUKES, M. L. Thermoelastic damping in micro- and nanomechanical systems. *Physical review B*, v. 61, n. 8, p. 5600, 2000.
- LIJIMA, S.; ICHIHASHI, T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, v. 363, p. 603–605, 1993.
- LIM, C. W.; ZHANG, G.; REDDY, J. N. A higher-order nonlocal elasticity and strain gradient theory and its applications in wave propagation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 78, p. 298–313, 2015.
- LIM, T.-C. *Nanosensors: theory and applications in industry, healthcare and defense*. Boca Raton: CRC Press, 2016. 313 p.
- LIN, M. X.; LEE, S. Y.; CHEN, C. K. Nonlocal effect on the pull-in instability analysis of graphene sheet nanobeam actuator. *Journal of Mechanics*, v. 35, n. 5, p. 767–778, 2019.
- LIU, H.; LV, Z. Vibration and instability analysis of flow-conveying carbon nanotubes in the presence of material uncertainties. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, v. 511, p. 85–103, 2018.

_____. Vibration performance evaluation of smart magneto-electro-elastic nanobeam with consideration of nanomaterial uncertainties. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, v. 30, n. 18-19, p. 2932–2952, 2019.

LIU, J. S.; LIANG, F.; WONG, W. H. The multiple-try method and local optimization in Metropolis sampling. *Journal of the American Statistical Association*, v. 95, n. 449, p. 121–134, 2000.

LIU, X.; ZHAO, X.; ADHIKARI, S.; LIU, X. Stochastic dynamic stiffness for damped taut membranes. *Computers & Structures*, v. 248, p. 106483, 2021.

LLORENTE, F.; MARTINO, L.; DELGADO, D.; LOPEZ-SANTIAGO, J. Marginal likelihood computation for model selection and hypothesis testing: an extensive review. *arXiv preprint arXiv:2005.08334*, 2020.

LU, Q.; BHATTACHARYA, B. Effect of randomly occurring Stone–Wales defects on mechanical properties of carbon nanotubes using atomistic simulation. *Nanotechnology*, v. 16, n. 4, p. 555, 2005.

LV, Z.; LIU, H. Uncertainty modeling for vibration and buckling behaviors of functionally graded nanobeams in thermal environment. *Composite Structures*, v. 184, p. 1165–1176, 2018.

MACKAY, D. J. C. *Information theory, inference and learning algorithms*. England: Cambridge University Press, 2005. 640 p.

MADIREDDY, S.; SISTA, B.; VEMAGANTI, K. A Bayesian approach to selecting hyperelastic constitutive models of soft tissue. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 291, p. 102–122, 2015.

MARTIN, O. Nonlocal effects on the dynamic analysis of a viscoelastic nanobeam using a fractional Zener model. *Applied Mathematical Modelling*, v. 73, p. 637–650, 2019.

MARTINO, L.; ELVIRA, V.; LUENGO, D.; CORANDER, J. Layered adaptive importance sampling. *Statistics and Computing*, v. 27, n. 3, p. 599–623, 2017.

MCTAVISH, D.; HUGHES, P. Finite element modeling of linear viscoelastic structures-the GHM method. In: AMERICAN INSTITUTE OF AERONAUTICS AND ASTRONAUTICS. *33rd structures, structural dynamics and materials conference*. Dallas, 1992. p. 1753–1763.

MCTAVISH, D. J.; HUGHES, P. C. Modeling of linear viscoelastic space structures. *Journal of Vibration and Acoustics*, v. 115, p. 103–110, 1993.

MELLINGER, P.; DÖHLER, M.; MEVEL, L. Variance estimation of modal parameters from output-only and input/output subspace-based system identification. *Journal of Sound and Vibration*, v. 379, p. 1–27, 2016.

METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, v. 21, p. 1087–1092, 1953.

- METROPOLIS, N.; ULAM, S. The monte carlo method. *Journal of the American statistical association*, v. 44, p. 335–341, 1949.
- MINDLIN, R. D.; TIERSTEN, H. F. Effects of couple-stresses in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, v. 11, n. 1, p. 415–448, 1962.
- MIRA, A. On Metropolis-Hastings algorithms with delayed rejection. *Metron*, v. 59, n. 3-4, p. 231–241, 2001.
- MOHAMMADSALEHI, M.; ZARGAR, O.; BAGHANI, M. Study of non-uniform viscoelastic nanoplates vibration based on nonlocal first-order shear deformation theory. *Meccanica*, v. 52, n. 4, p. 1063–1077, 2017.
- MURMU, T.; ADHIKARI, S. Nonlocal vibration of carbon nanotubes with attached buckyballs at tip. *Mechanics Research Communications*, v. 38, n. 1, p. 62–67, 2011.
- _____. Nonlocal frequency analysis of nanoscale biosensors. *Sensors and Actuators A: Physical*, v. 173, p. 41–48, 2012.
- MURMU, T.; PRADHAN, S. C. Small-scale effect on the free in-plane vibration of nanoplates by nonlocal continuum model. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 41, n. 8, p. 1628–1633, 2009.
- MUTO, M.; BECK, J. L. Bayesian updating and model class selection for hysteretic structural models using stochastic simulation. *Journal of Vibration and Control*, v. 14, n. 1-2, p. 7–34, 2008.
- NARENDAR, S.; GOPALAKRISHNAN, S. Axial wave propagation in coupled nanorod system with nonlocal small scale effects. *Composites Part B: Engineering*, v. 42, p. 2013–2023, 2011.
- NEAL, R. M. Annealed importance sampling. *Statistics and computing*, v. 11, n. 2, p. 125–139, 2001.
- NELDER, J. A.; MEAD, R. A simplex method for function minimization. *The computer journal*, v. 7, p. 308–313, 1965.
- NEWTON, M. A.; RAFTERY, A. E. Approximate bayesian inference with the weighted likelihood bootstrap. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, v. 56, n. 1, p. 3–26, 1994.
- NG, T. S.; MCKINLEY, G. H. Power law gels at finite strains: The nonlinear rheology of gluten gels. *Journal of Rheology*, v. 52, n. 2, p. 417–449, 2008.
- NG, T. S.; MCKINLEY, G. H.; EWOLDT, R. H. Large amplitude oscillatory shear flow of gluten dough: A model power-law gel. *Journal of Rheology*, v. 55, n. 3, p. 627–654, 2011.
- NICHOLS, J.; LINK, W.; MURPHY, K.; OLSON, C. A bayesian approach to identifying structural nonlinearity using free-decay response: application to damage detection in composites. *Journal of Sound and Vibration*, v. 329, n. 15, p. 2995–3007, 2010.

NICHOLS, J. M.; MOORE, E. Z.; MURPHY, K. D. Bayesian identification of a cracked plate using a population-based Markov Chain Monte Carlo method. *Computers & Structures*, v. 89, n. 13-14, p. 1323–1332, 2011.

NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *SCIENCE*, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.

OATES, W. S.; HAYS, M.; MILES, P.; SMITH, R. Uncertainty quantification and stochastic-based viscoelastic modeling of finite deformation elastomers. In: SOCIETY OF PHOTO-OPTICAL INSTRUMENTATION ENGINEERS. *Proc. SPIE 8687, Electroactive Polymer Actuators and Devices (EAPAD)*. San Diego, 2013. v. 8687, p. 868710.

ÖZİŞİK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. *Inverse heat transfer: Fundamentals and Applications*. New York: Taylor and Francis, 2000. 331 p.

PENG, Z.; YONGGANG, H.; GEUBELLE, P. H.; KEHCHIH, H. On the continuum modeling of carbon nanotubes. *Acta Mechanica Sinica*, v. 18, p. 528–536, 2002.

PETYT, M. *Introduction to Finite Element Vibration Analysis*. 2. ed. New York: Cambridge university press, 2010. 500 p.

PHADIKAR, J. K.; PRADHAN, S. C. Variational formulation and finite element analysis for nonlocal elastic nanobeams and nanoplates. *Computational materials science*, v. 49, p. 492–499, 2010.

POPOV, A. M.; BICHOUTSKAIA, E.; LOZOVIK, Y. E.; KULISH, A. S. Nanoelectromechanical systems based on multi-walled nanotubes: nanothermometer, nanorelay, and nanoactuator. *physica status solidi (a)*, v. 204, n. 6, p. 1911–1917, 2007.

POURESMAEELI, S.; GHAVANLOO, E.; FAZELZADEH, S. A. Vibration analysis of viscoelastic orthotropic nanoplates resting on viscoelastic medium. *Composite structures*, v. 96, p. 405–410, 2013.

PRADHAN, S. C.; PHADIKAR, J. K. Nonlocal elasticity theory for vibration of nanoplates. *Journal of Sound and Vibration*, v. 325, n. 1-2, p. 206–223, 2009.

RADE, D. A.; DEÜ, J.-F.; CASTELLO, D. A.; LIMA, A. M. G. de; ROULEAU, L. Passive vibration control using viscoelastic materials. In: JAUREGUI, J. C. (Ed.). *Nonlinear Structural Dynamics and Damping*. Switzerland: Springer, 2019. v. 69, cap. 5, p. 119–168.

RADEBE, I. S.; ADALI, S. Buckling and sensitivity analysis of nonlocal orthotropic nanoplates with uncertain material properties. *Composites Part B: Engineering*, v. 56, p. 840–846, 2014.

_____. Effect of surface stress on the buckling of nonlocal nanoplates subject to material uncertainty. *Latin American Journal of Solids and Structures*, v. 12, n. 9, p. 1666–1676, 2015.

RAFTERY, A. E.; NEWTON, M. A.; SATAGOPAN, J. M.; KRIVITSKY, P. N. *Estimating the integrated likelihood via posterior simulation using the*

harmonic mean identity. Technical Report no. 499, Department of Statistics, University of Washington, Seattle, Wash., USA, 2006. 41 p. (6). Disponível em: <https://biostats.bepress.com/mskccbiostat/paper6/>. Acesso em: 21, novembro. 2021.

RAJABI, K.; HOSSEINI-HASHEMI, S. Application of the generalized hooke's law for viscoelastic materials (GHVMs) in nonlocal free damped vibration analysis of viscoelastic orthotropic nanoplates. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 124-125, p. 158–165, 2017.

_____. Application of the generalized Hooke's law for viscoelastic materials (GHVMs) in nanoscale mass sensing applications of viscoelastic nanoplates: A theoretical study. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, v. 67, p. 71–83, 2018.

RAMSDEN, J. *Nanotechnology: an introduction*. Waltham: William Andrew, 2011. 288 p.

RAO, S. S. *The Finite Element Method in Engineering*. 5. ed. Burlington: Elsevier, 2010. 710 p.

RAPPEL, H.; BEEEX, L. A.; HALE, J. S.; BORDAS, S. Bayesian inference for the stochastic identification of elastoplastic material parameters: introduction, misconceptions and insights. *arXiv preprint arXiv:1606.02422*, 2016.

REDDY, J. N. *An introduction to the Finite Element Method*. 2. ed. New York: McGraw-Hill New York, 1993. 684 p.

_____. Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams. *International Journal of Engineering Science*, v. 45, p. 288–307, 2007.

_____. *An introduction to continuum mechanics*. 2. ed. New York: Cambridge university press, 2013. 450 p.

ROULEAU, L.; DEÜ, J. F. Time domain analysis of viscoelastic models. In: KATHOLIEKE UNIVERSITEIT LEUVEN, DEPARTMENT OF MECHANICAL ENGINEERING, 2016. *PROCEEDINGS OF ISMA2016 INCLUDING USD2016*. Leuven,, 2016. p. 547–558.

RUSSEL, P. M.; BREWER, B. J.; KLAERE, S.; BOUCKAERT, R. R. Model selection and parameter inference in phylogenetics using nested sampling. *Systematic biology*, v. 68, n. 2, p. 219–233, 2019.

SAFTA, C.; KHALIL, M.; NAJM, H. N.; LAO, J. *Transitional Markov Chain Monte Carlo sampler in UQTK*. Technical report SAND2020-3166, Sandia National Lab, Albuquerque, New Mexico 87185 Livermore, California 94550, 2020. 30 p. Disponível em: <https://www.osti.gov/servlets/purl/1606084>. Acesso em: 1, dezembro. 2021.

SALVETAT, J.-P. et al. Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes. *Physical Review Letters*, v. 82, n. 5, p. 944, 1999.

SANTOS, J. V.; REDDY, J. N. Vibration of Timoshenko beams using non-classical elasticity theories. *Shock and Vibration*, v. 19, n. 3, p. 251–256, 2012.

- SCHMID, D. R.; STILLER, P. L.; STRUNK, C.; HÜTTEL, A. K. Magnetic damping of a carbon nanotube NEMS resonator. *arXiv preprint arXiv:1203.2319*, 2012. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1203.2319>. Acesso em: 10, novembro. 2021.
- SHI, J.-X.; NATSUKI, T.; LEI, X.-W.; NI, Q.-Q. Equivalent Young's modulus and thickness of graphene sheets for the continuum mechanical models. *Applied Physics Letters*, v. 104, n. 22, p. 223101, 2014.
- SHOKRIEH, M. M.; RAFIEE, R. Prediction of Young's modulus of graphene sheets and carbon nanotubes using nanoscale continuum mechanics approach. *Materials & Design*, v. 31, n. 2, p. 790–795, 2010.
- SIMOEN, E.; PAPADIMITRIOU, C.; LOMBAERT, G. On prediction error correlation in Bayesian model updating. *Journal of Sound and Vibration*, v. 332, n. 18, p. 4136–4152, 2013.
- SKILLING, J. Nested sampling for general Bayesian computation. *Bayesian analysis*, v. 1, n. 4, p. 833–859, 2006.
- SOUSA, T. L. D.; KANKE, F.; PEREIRA, J. T.; BAVASTRI, C. A. Property identification of viscoelastic solid materials in nomograms using optimization techniques. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, v. 55, n. 4, p. 1285–1297, 2017.
- SOUZA, M.; CASTELLO, D. A.; ROITMAN, N.; RITTO, T. Impact of damping models in damage identification. *Shock and Vibration*, v. 2019, p. 1–12, 2019.
- SPANOS, P. D.; GHANEM, R. Stochastic finite element expansion for random media. *Journal of engineering mechanics*, v. 115, n. 5, p. 1035–1053, 1989.
- STEFANO, G.; PAPADRAKAKIS, M. Assessment of spectral representation and Karhunen–Loève expansion methods for the simulation of gaussian stochastic fields. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, v. 196, n. 21-24, p. 2465–2477, 2007.
- STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, v. 11, n. 4, p. 341–359, 1997.
- TAMAYO, J.; KOSAKA, P. M.; RUZ, J. J.; PAULO, Á. S.; CALLEJA, M. Biosensors based on nanomechanical systems. *Chemical Society Reviews*, v. 42, n. 3, p. 1287–1311, 2013.
- TOKDAR, S. T.; KASS, R. E. Importance sampling: a review. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, v. 2, n. 1, p. 54–60, 2010.
- TOUPIN, R. A. Elastic materials with couple-stresses. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, v. 11, p. 385–414, 1962.
- TRIAS, M.; VECCHIO, A.; VEITCH, J. Delayed rejection schemes for efficient Markov-Chain Monte-Carlo sampling of multimodal distributions. *arXiv preprint arXiv:0904.2207*, 2009. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/0904.2207>. Acesso em: 15, novembro. 2021.

- TRINDADE, M. A.; ALMEIDA, S. C. N. d. de. Análise custo-benefício de modelos de amortecimento para estruturas com elementos viscoelásticos. In: BRAZILIAN ASSOCIATION OF COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING, 2006. *Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*. Belém, 2006. p. 1–17.
- TROTTA, R. Bayes in the sky: Bayesian inference and model selection in cosmology. *Contemporary Physics*, v. 49, n. 2, p. 71–104, 2008.
- TUNA, M.; KIRCA, M. Unification of Eringen's nonlocal parameter through an optimization-based approach. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, p. 1–10, 2019.
- VASQUES, C. M. A.; MOREIRA, R. A. S.; RODRIGUES, J. D. Viscoelastic Damping Technologies-Part I: Modeling and Finite Element Implementation. *Journal of Advanced Research in Mechanical Engineering*, v. 1, n. 2, p. 76–95, 2010.
- VEMAGANTI, K.; MADIREDDY, S.; KEDARI, S. On the inference of viscoelastic constants from stress relaxation experiments. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, v. 24, n. 1, p. 1–24, 2020.
- WANG, C. M.; ZHANG, Y. Y.; HE, X. Q. Vibration of nonlocal Timoshenko beams. *Nanotechnology*, v. 18, p. 105401, 2007.
- WANG, Q.; VARADAN, V. K. Vibration of carbon nanotubes studied using nonlocal continuum mechanics. *Smart Materials and Structures*, v. 15, p. 659–666, 2006.
- WANG, Q.; WANG, C. M. The constitutive relation and small scale parameter of nonlocal continuum mechanics for modelling carbon nanotubes. *Nanotechnology*, v. 18, p. 075702, 2007.
- WANG, Y.; LI, F. Dynamical properties of nanotubes with nonlocal continuum theory: A review. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, v. 55, n. 7, p. 1210–1224, 2012.
- WENXING, B.; CHANGCHUN, Z.; WANZHAO, C. Simulation of young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics. *Physica B: Condensed Matter*, v. 352, n. 1-4, p. 156–163, 2004.
- XIE, G.; NI, S. S. Vibration of a simply supported graphene sheet with uncertain small scale parameter based on nonlocal theory. *Mathematical Models in Engineering*, v. 7, n. 2, p. 22–29, 2021.
- XIE, S.; LI, W.; PAN, Z.; CHANG, B.; SUN, L. Mechanical and physical properties on carbon nanotube. *Journal of Physics and Chemistry of solids*, v. 61, n. 7, p. 1153–1158, 2000.
- YANG, F.; CHONG, A.; LAM, D. C. C.; TONG, P. Couple stress based strain gradient theory for elasticity. *International Journal of Solids and Structures*, v. 39, n. 10, p. 2731–2743, 2002.

YANG, Y.-T.; CALLEGARI, C.; FENG, X. L.; EKINCI, K. L.; ROUKES, M. L. Zeptogram-scale nanomechanical mass sensing. *Nano Letters*, v. 6, n. 4, p. 583–586, 2006.

YUEN, K.-V. *Bayesian methods for structural dynamics and civil engineering*. Singapore: John Wiley & Sons, 2010. 294 p.

ZANG, X.; ZHOU, Q.; CHANG, J.; LIU, Y.; LIN, L. Graphene and carbon nanotube (CNT) in MEMS/NEMS applications. *Microelectronic Engineering*, v. 132, p. 192–206, 2015.

ZENKOUR, A. M. Nonlocal transient thermal analysis of a single-layered graphene sheet embedded in viscoelastic medium. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 79, p. 87–97, 2016.

ZHANG, E.; CHAZOT, J.-D.; ANTONI, J.; HAMDI, M. Bayesian characterization of Young's modulus of viscoelastic materials in laminated structures. *Journal of Sound and Vibration*, v. 332, n. 16, p. 3654–3666, 2013.

ZHANG, Y.; YANG, W. A comparative study of the stochastic simulation methods applied in structural health monitoring. *Engineering Computations*, v. 31, n. 7, p. 1484–1513, 2014.

APÊNDICE A – Expansão de Karhunen–Loève: Variabilidade espacial aleatória

A.1 Expansão de Karhunen–Loève: Domínio unidimensional

Pela decomposição espectral pela expansão de Karhunen–Loève (KL), de acordo com Ghanem e Spanos (2003), dado um campo aleatório genérico Gaussiano $H(x, \theta)$, função de $x \in \Omega_H$ e $\theta \in \Omega_\theta$, onde Ω_H é o domínio físico onde é definido o campo aleatório e Ω_θ é o espaço de eventos aleatórios, a aproximação $\hat{H}(x, \theta)$ desse campo é dada por

$$\hat{H}(x, \theta) \sim \bar{H}(x) + \tilde{H}(x, \theta) \quad (171)$$

onde $\bar{H}(x)$ é o valor médio do campo aleatório, $\tilde{H}(x, \theta)$ é a parcela estocástica de média nula com a função de representar as propriedades de variância dada a função de auto-covariância $C_H(x_1, x_2)$, definida na forma de uma série de Fourier truncada por

$$\tilde{H}(x, \theta) \sim \sum_{i=1}^{N^{KL}} \sqrt{\lambda_i^x} \xi_i(\theta) \phi_i^x(x) \quad (172)$$

onde N^{KL} é a ordem de truncamento da expansão KL, $\xi_i(\theta)$ são variáveis aleatórias não correlacionadas e λ_i^x e ϕ_i^x são os autovalores e autovetores da função de auto-covariância $C_H(x_1, x_2)$ pela solução da equação integral homogênea de Fredholm do segundo tipo (STEFANOU; PAPADRAKAKIS, 2007; ADHIKARI; FRISWELL, 2010; LIU et al., 2021). Para tratabilidade numérica, o caso particular da função de auto-covariância exponencial é adotado e $\xi_i(\theta)$ são definidos como variáveis Gaussianas aleatórias de média zero e desvio padrão unitário (GHANEM; SPANOS, 2003; ADHIKARI; FRISWELL, 2010; LIU et al., 2021). Dessa forma, tem-se

$$\int_{-L/2}^{L/2} C_H(x_1, x_2) \phi_i^x(x_1) dx_1 = \lambda_i^x \phi_i^x(x_2) \quad (173)$$

$$C_H(x_1, x_2) = \exp\left(\frac{-|x_1 - x_2|}{b_x}\right) \quad (174)$$

onde L é o comprimento do domínio e b_x é o comprimento de correlação. O domínio espacial Ω_H é simetricamente dado por $x \in [-L/2, L/2]$ (GHANEM; SPANOS, 2003; ADHIKARI; FRISWELL, 2010). Definindo $c_x = \frac{1}{b_x}$ e $a_x = L/2$, a seguinte solução

analítica é obtida (GHANEM; SPANOS, 2003; ADHIKARI; FRISWELL, 2010).

$$\lambda_i^x = \frac{2c_x}{\omega_i^2 + (c_x)^2} \quad (175)$$

$$\phi_i^x(x) = \frac{\cos(\omega_i x)}{\sqrt{a_x + \frac{\sin(2\omega_i a_x)}{2\omega_i}}} \quad \text{para } i \text{ ímpar} \quad (176)$$

$$\phi_i^x(x) = \frac{\sin(\omega_i x)}{\sqrt{a_x - \frac{\sin(2\omega_i a_x)}{2\omega_i}}} \quad \text{para } i \text{ par} \quad (177)$$

onde ω_i são obtidos pela solução das equações transcendentais dadas por

$$\omega_i \tan(a_x \omega_i) - c_x = 0 \quad \text{para } i \text{ ímpar} \quad (178)$$

$$c_x \tan(a_x \omega_i) + \omega_i = 0 \quad \text{para } i \text{ par} \quad (179)$$

A.2 Expansão de Karhunen–Loève: Domínio bidimensional

Similarmente, para um domínio bidimensional Ω_H , tem-se (GHANEM; SPANOS, 2003)

$$\hat{H}(x, y, \theta) \sim \bar{H}(x, y) + \tilde{H}(x, y, \theta) \quad (180)$$

onde $(x, y) \in \Omega_H$.

A função de auto-covariância é dada pelo produto de duas funções exponenciais de auto-covariância nas coordenadas espaciais x e y como segue.

$$C_H(x_1, x_2; y_1, y_2) = C_H(x_1, x_2)C_H(y_1, y_2) = \exp\left(\frac{-|x_1 - x_2|}{b_x} - \frac{|y_1 - y_2|}{b_y}\right) \quad (181)$$

onde b_x e b_y são os comprimentos de correlação em relação às coordenadas espaciais x e y da placa (LIU et al., 2021; GHANEM; SPANOS, 2003). Dessa forma, a equação integral de Fredholm pode ser representada pelo produto de duas soluções independentes pela

expansão KL em relação às coordenadas espaciais x e y por

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_H} C_H(x_1, x_2; y_1, y_2) \phi_i^{xy}(x_1, y_1) dx_1 dy_1 = \\ \int_{-L_x/2}^{L_x/2} C_H(x_1, x_2) \phi_j^x(x_1) dx_1 \int_{-L_y/2}^{L_y/2} C_H(y_1, y_2) \phi_k^y(y_1) dy_1 = \\ \lambda_i^{xy} \phi_i^{xy}(x_2, y_2) = \lambda_j^x \lambda_k^y \phi_j^x(x_2) \phi_k^y(y_2) \end{aligned} \quad (182)$$

onde λ_i^{xy} e ϕ_i^{xy} são os i -ésimos autovalores e autovetores pela solução da equação integral de Fredholm bidimensional, respectivamente; λ_j^x , λ_k^y , ϕ_j^x e ϕ_k^y são, respectivamente, os j -ésimos e k -ésimos autovalores e autovetores pelas soluções individuais de equações integrais de Fredholm definidas em x e y , com $\lambda_i^{xy} = \lambda_j^x \lambda_k^y$ e $\phi_i^{xy}(x, y) = \phi_j^x(x) \phi_k^y(y)$.

O domínio da integração é simétrico e dado por $\Omega_H \in \mathcal{R}^2$, com $x \in [-L_x/2, L_x/2]$ e $y \in [-L_y/2, L_y/2]$. A parcela estocástica $\tilde{H}(x, y, \theta)$ do campo aleatório bidimensional é a seguinte aproximação (GHANEM; SPANOS, 2003; ADHIKARI; FRISWELL, 2010).

$$\tilde{H}(x, y, \theta) \sim \sum_{i=1}^{N^{KL}} \xi_i(\theta) \sqrt{\lambda_i^{xy}} \phi_i^{xy}(x, y) \quad (183)$$

onde o truncamento da expansão KL, N^{KL} , consiste nos i -ésimos maiores autovalores $\lambda_i^{xy} = \lambda_j^x \lambda_k^y$, com $j = [1, \dots, N_x]$ e $k = [1, \dots, N_y]$, onde N_x e N_y são a quantidade de termos nas expansões KL ao longo das coordenadas x e y , respectivamente, sendo $N^{KL} \leq N_x N_y$.

Definindo $c_x = \frac{1}{b_x}$, $c_y = \frac{1}{b_y}$, $a_x = L_x/2$ e $a_y = L_y/2$, soluções analíticas para os autovalores λ_j^x e λ_k^y e autovetores ϕ_j^x e ϕ_k^y são dados pelas Equações (175), (177) e (179), definidas para a realização da expansão KL para um domínio unidimensional. Por exemplo, os autovalores λ_j^x e autovetores ϕ_j^x pela substituição do subscrito $(\bullet)_i$ por $(\bullet)_j$ e, para os autovalores λ_k^y e autovetores ϕ_k^y , pela substituições $(\bullet)_i$ por $(\bullet)_k$ e $(\bullet)_x$ por $(\bullet)_y$.