



Universidade Federal  
do Rio de Janeiro  

---

Escola Politécnica

## ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS ADESIVOS

Fabiana Cheade Hamilton

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro

Orientadores: Lavinia Maria Sanabio Borges  
Daniel Alves Castello

Rio de Janeiro

Março de 2016

## ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS ADESIVOS

Fabiana Cheade Hamilton

PROJETO FINAL SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA DA ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGENHEIRO MECÂNICO.

Aprovado por:

---

Prof. Lavinia Maria Sanabio Alves Borges, D.Sc.

---

Prof. Daniel Alves Castello, D.Sc.

---

Prof. José Luis Lopes da Silveira, D.Sc.

---

Eng. William Pinto Hernandez

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2016

Hamilton, Fabiana Cheade

Estudo e Caracterização de Materiais Adesivos/ Fabiana Cheade Hamilton. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2016.

VI, 60p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Lavinia Maria Sanabia Alves Borges e Daniel Alves Castello.

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/ Curso de Engenharia Mecânica, 2016.

Referências Bibliográficas: p. 48 – 52.

1. Materiais Adesivos. 2. Modelos de Adesão. 3. Lignocelulose. 4. Problemas Inversos. I. Borges, Lavinia Maria Sanabio *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Mecânica. III. Estudo das Propriedades de Materiais Adesivos.

## **AGRADECIMENTOS**

Gostaria de, finalmente, agradecer à minha família, especialmente ao meu tio Eduardo. À minha mãe Amélia, que sempre me encaminhou e me orientou a ser uma pessoa de bem. Ao meu padrasto Antonio, meu segundo pai que fez por mim o que poucos pais fariam. Ao meu pai Bruce, quem me incentivou a ser a profissional que sou hoje.

Quero também agradecer aos meus orientadores, professores Lavinia Borges e Daniel Castello, por serem sempre solícitos e esclarecerem todas as dúvidas que tive durante o desenvolvimento desse trabalho. Além, me deixaram a vontade para tomar diversas decisões relativas ao trabalho.

Um agradecimento especial aos meus orientadores de iniciação científica, professores Albino Leiroz e Marcelo Colaço. Colaço, obrigada pelas inúmeras vezes que você repetiu a mesma coisa sobre filtros de partículas até que eu finalmente entendesse.

Aproveito também para agradecer aos amigos diretamente envolvidos neste trabalho: Gabriel Silva e William, sem os quais tudo teria ficado mais difícil e também aos que tiraram minhas dúvidas, Diego e Rafael. Um agradecimento especial aos amigos da faculdade, que fizeram momentos tensos mais leves, especialmente: Laura Faria, Rafael Antunes, César Pacheco e Rodrigo Sudá.

Gostaria também de agradecer ao professor Flávio de Marco, pelas orientações tanto acerca de assuntos acadêmicos como profissionais e pessoais.

Um obrigada especial ao CNPq, que sustentou minhas bolsas de iniciação científica e intercâmbio acadêmico, totalizando um investimento de dois anos e meio na minha profissionalização.

Por fim, não poderia deixar de agradecer à Agência Nacional do Petróleo, que me agraciou com a bolsa do Programa de Recursos Humanos (PRH-37) por dois anos, me permitindo concluir o curso de Engenharia Mecânica com uma especialização na área de biocombustíveis.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica / UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Mecânico.

## Estudo e Caracterização de Materiais Adesivos

Fabiana Cheade Hamilton

Março / 2016

Orientadores: Lavinia Maria Sanabio Alves Borges e Daniel Alves Castello

Curso: Engenharia Mecânica

A criação de novos adesivos, especialmente os derivados de lignocelulose de bagaço de cana vem crescendo nos últimos anos. Esses novos materiais precisam ser caracterizados e ter suas propriedades tais como resistência, rigidez e energia de decoesão determinadas. Dentro deste cenário, a aplicação de problemas inversos e teoria Bayesiana para determinação destas características é uma técnica relativamente nova. Uma das suas grandes vantagens é a possibilidade de determinação de parâmetros que não podem ser medidos diretamente com os dados experimentais.

O objetivo deste trabalho é aplicar a teoria Bayesiana para caracterização de adesivos viscosos. Além, deseja-se verificar a sensibilidade do modelo de adesão escolhido com relação aos parâmetros estimados. Inicialmente, os parâmetros são determinados separadamente para posteriormente serem determinados em conjunto.

Este trabalho é motivado por uma revisão bibliográfica com foco em adesivos derivados de lignocelulose. Em seguida, é escolhido um modelo de adesão constitutivo para simulação computacional que prevê a perda da intensidade de adesão. A partir de medidas simuladas a estimativa dos parâmetros do adesivo é feita a partir do método Monte Carlo com Cadeia de Markov. É apresentada uma discussão dos resultados obtidos e da viabilidade de implementação deste método para estimativa dos parâmetros. Por fim, sugestões para trabalhos futuros são apresentadas.

*Palavras-chave:* Materiais Adesivos, Modelos de Adesão, Adesivos Viscoelástico, Problemas Inversos, Cadeia de Markov, Estimativa de Parâmetros.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Engineer.

## Study and Characterization of Adhesive Materials

Fabiana Cheade Hamilton

March / 2016

Advisors: Lavinia Maria Sanabio Alves Borges and Daniel Alves Castello

Course: Mechanical Engineering

Elaborating of new adhesive materials, especially the ones derived from lignocellulose has grown the last few years. These new materials need to have its characteristics and properties such as resistance, rigidity and decohesion energy determined. In this context, application of inverse problems and Bayesian theory for determination of these characteristics is a relatively new technique. One of its greatest advantages is the possibility of estimation of parameters not experimentally measurable.

The aim of this project is to apply Bayesian theory to characterize viscoelastic adhesives. Furthermore, we want to verify the sensitivity of the chosen adhesion model with respect to the estimated parameters. At first, parameters are estimated separately, so they can be determined jointly at a further stage.

This work is motivated by a literature review focused on adhesives derived from lignocellulose. Then, we chose a constitutive adhesion model that predicts the loss of adhesion to be computationally simulated. From synthetic measurements, the parameter estimation is performed through an inverse problem, using the Monte Carlo Markov Chain technique. A discussion about the results obtained and the viability of this method is presented. At last, suggestions for further work is presented.

*Keywords:* Adhesive Materials, Adhesive Models, Viscoelastic Adhesives, Inverse Problems, Markov Chain, Parameter Estimation.

# ÍNDICE

<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
1.1. Objetivos.....	2
1.2. Organização do trabalho.....	3
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	<b>4</b>
2.1. Utilização e caracterização de adesivos lignocelulósicos.....	4
2.2. Modelos de Adesão.....	8
2.3. Fundamentos da Teoria Bayesiana de filtros de partículas.....	10
2.3.1. Filtragem e Teoria Bayesiana.....	10
2.3.2. Métodos de Monte Carlo e filtragem de Monte Carlo.....	11
2.3.3. Teoria Bayesiana aplicada a problemas de Engenharia.....	12
<b>3. METODOLOGIA</b> .....	<b>14</b>
3.1. Problema proposto.....	14
3.2. Modelo de adesão.....	14
3.3. Modelo de adesão aplicado a uma viga.....	16
3.4. Desenvolvimento de simulador computacional para o modelo.....	20
3.5. Abordagem Bayesiana de problemas inversos.....	22
3.5.1. Análise de sensibilidade .....	22
3.5.2. Modelagem do problema inverso.....	24
3.5.3. Considerações para implementação do algoritmo MCMC.....	27
3.6. Metodologia para análise dos resultados numéricos.....	29
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	<b>31</b>
4.1. Resultados do simulador computacional do modelo .....	31
4.2. Resultados da análise de sensibilidade.....	34
4.3. Resultados da estimativa de parâmetros .....	36
4.3.1. Estimativa de parâmetros isolados.....	37
<b>5. CONCLUSÕES</b> .....	<b>46</b>
5.1. Sugestões para trabalhos futuros .....	47
<b>6. REFERÊNCIAS</b> .....	<b>48</b>

# 1. Introdução

O crescimento da utilização de materiais adesivos é concomitante ao desenvolvimento de novos materiais compósitos. Este crescimento pode ser visto no setor industrial através de aplicações de adesivos em plataformas de petróleo, automóveis e eletrodomésticos.

Há uma tendência mundial hoje que se refere à necessidade de utilização de recursos renováveis bem como à redução da dependência do petróleo e de outros combustíveis fósseis. Nesse sentido, a biomassa derivada do bagaço de cana-de-açúcar utilizada para produção de etanol assume um papel de importância, na medida em que pode ser usada de diversas formas, gerando um aproveitamento muito maior da cadeia energética.

Além, ao observarmos a matriz energética brasileira, a crescente necessidade de independência de combustíveis e materiais não-derivados de fontes fósseis alavancou no mercado brasileiro a inserção de veículos do tipo FLEX, movidos tanto a gasolina quanto à álcool. Essa tendência pode ser observada na Figura 1, que mostra a evolução e projeção da produção de Etanol no país. Vemos uma produção crescente ao longo dos anos, com a maior parte do produto sendo utilizada como combustível. Neste sentido, o Brasil é hoje o segundo maior produtor mundial de Etanol em números absolutos, a fim de abastecer a grande frota de veículos deste tipo já existentes, gerando uma grande quantidade de biomassa derivada do bagaço da cana-de-açúcar.

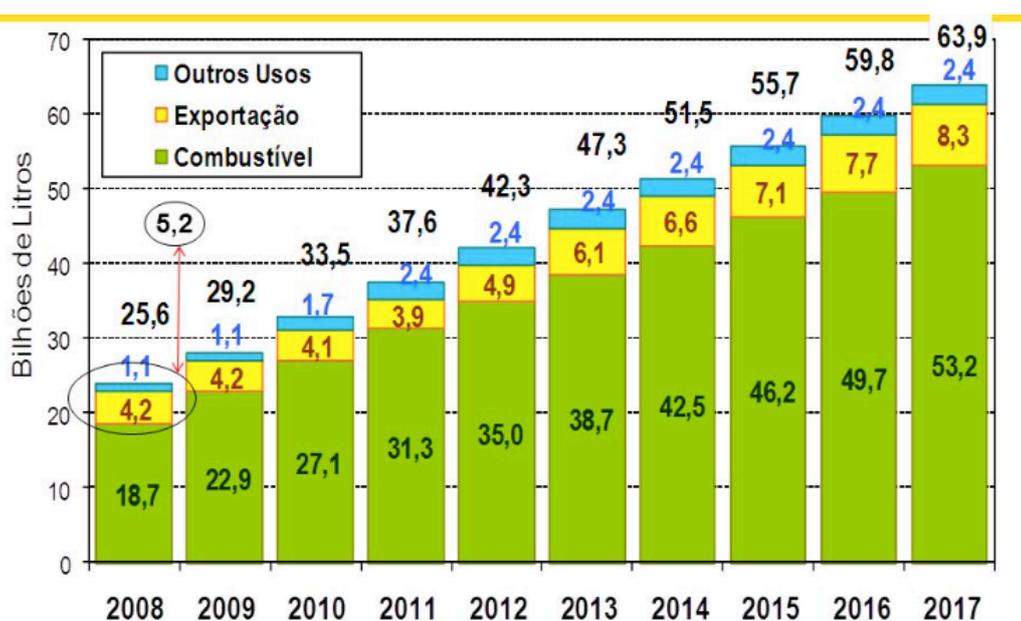


Figura 1 – Etanol no Brasil: evolução e expectativa de crescimento (A.N.P. (2009)).

Desta forma, torna-se pertinente pesquisar a viabilidade técnica e econômica do bagaço de cana-de-açúcar e de outros componentes para produção destes novos materiais, visto que a lignina está presente em quantidade abundante nesse vegetal. Há uma tendência tecnológica voltada para a produção de novos materiais adesivos a partir de material lignocelulósico.

Associadamente, há um aumento significativo da utilização de novos materiais compósitos em diversos setores, bem como crescimento de pesquisas voltadas à otimização destes materiais. Este crescimento gera a necessidade de criação de adesivos especiais específicos para esse tipo de material. Pesquisas mais recentes voltam sua atenção para adesivos fabricados a partir de material lignocelulósico, mais especificamente derivado de plantas herbáceas.

Dentro deste contexto, é de interesse a pesquisa de materiais adesivos a partir de bagaço de cana-de-açúcar. Pesquisas similares já estão em desenvolvimento, e suportam a viabilidade técnica deste material. Entretanto, a pesquisa de suas propriedades mecânicas a partir de um modelo de mecânica dos sólidos e aplicação de filtros Bayesianos não foi encontrado na literatura, tornando este um trabalho relativamente novo no cenário mundial.

## **1.1. Objetivos**

O trabalho a ser desenvolvido é voltado para o aprofundamento do estudo das aplicações e propriedades de materiais adesivos lignocelulósicos. Dentro deste contexto, destacamos como objetivos:

- Estado da arte e análise das principais aplicações de materiais derivados de lignocelulose.
- Revisão bibliográfica sobre a viabilidade técnica para produção de materiais adesivos derivados de materiais lignocelulósicos.
- Estudo bibliográfico das características de materiais adesivos parcialmente substituídos por material lignocelulósico.
- Estudo e análise de modelos e condições de adesão e suas simplificações.
- Proposta de um problema de adesão.
- Simulação computacional de um modelo de adesão proposto.
- Análise das características e propriedades de materiais adesivos simulados.

- Análise de simulações numéricas baseadas em métodos inversos que possibilitam a determinação de diferentes parâmetros de adesivos.
- Determinação da validade do modelo escolhido para solução, comparando resultados obtidos através de simulação computacional com dados da bibliografia.
- Determinação das conclusões obtidas a partir do estudo realizado.

## **1.2. Organização do trabalho**

Na Seção 2 deste trabalho é apresentada uma revisão bibliográfica com foco em utilização e caracterização de adesivos lignocelulósicos, modelos de adesão e problemas inversos. Em seguida, a Seção 3, Metodologia, inicialmente apresenta o problema que será resolvido, seguida de quais métodos foram utilizados: modelo de adesão escolhido, desenvolvimento das equações de Euler-Bernoulli aplicadas ao problema, adimensionalizações para implementação computacional, considerações e algoritmo do método Monte Carlo com Cadeia de Markov. Segue-se então para a Seção 4, onde serão expostos os resultados computacionais do modelo direto, análise de sensibilidade bem como estimativa dos parâmetros designados. Além, apresenta-se na mesma seção, uma discussão a respeito dos resultados obtidos. A Seção 5 apresenta as conclusões obtidas após finalização do trabalho, bem como sugestões de trabalhos futuros que podem ser feitos. Por fim, a Seção 6 apresenta as referências, em ordem alfabética, utilizadas neste trabalho. Ao final do texto, encontra-se um Apêndice, onde foram inseridos resultados extra bem como códigos computacionais utilizados durante a elaboração deste projeto.

## 2. Revisão Bibliográfica

### 2.1. Utilização e caracterização de adesivos lignocelulósicos

Observa-se o crescente número de publicações recentes voltadas para novas tecnologias de produção de materiais derivados de lignocelulose, bem como as implicações ambientais e econômicas consequentes desses materiais. Esses fatos são corroborados por GHAFAR e FAN (2014), PARK *et al.* (2008) e ZHANG *et al.* (2013). Este fenômeno pode ser atribuído, em grande parte, à constante necessidade de tecnologias que utilizem recursos renováveis bem como de estudos sobre a otimização destes recursos.

Formas inovadoras de aplicação de recursos renováveis bem como abordagens inteligentes para reduzir a utilização destes recursos garantem a qualidade dos produtos e permitem a transição de processos químicos de derivados de petróleo para bioprocessos baseados em materiais renováveis. Esta tendência promove ganhos ambientais consideráveis, bem como novas políticas sustentáveis de crescimento econômico conforme exposto por GHAFAR e FAN (2014).

Dentro deste contexto, o uso da lignina toma um lugar de destaque, por ser este um polímero abundante na natureza, especialmente nos resíduos agrícolas. Além, este material apresenta alta capacidade de renovação: as plantas herbáceas possuem o maior estoque anual de biomassa, em torno de 1549 milhões de toneladas por ano no mundo, conforme estimado por KIM e DALE (2004).

GHAFAR e FAN (2014) definem a lignina como um material polimérico natural e amorfo, derivada de fenilpropano e sendo um recurso natural existente em abundância no planeta. Ela é encontrada na forma de um componente da parede das células em plantas vasculares, conforme exposto em SARKANEN e LUDWIG (1972), e representa cerca de 15 a 40% do material do caule das plantas. Ela age como um selante da água nos caules e regula o transporte de água através da parede das células. A lignina também é responsável pela adesão permanente entre células, “agindo como uma cola”, e dando ao caule rigidez e resistência ao impacto, de acordo com GHAFAR e FAN (2014).

SUN (2010) mostrou que a dificuldade para definição precisa deste material

consiste basicamente em quatro razões: dificuldade de isolamento, análise de sua composição, caracterização estrutural e falta de estruturas unitárias regularmente repetidas. Atualmente, a definição mais precisa e concisa para este material foi dada por RALPH *et al.* (2004): ligninas são biopolímeros que consistem em unidades fenilpropanóides com um átomo de Oxigênio na posição *p*, e com nenhum, um ou dois grupos metoxi na posição *o* deste átomo de Oxigênio.

É importante destacar que a maior parte das publicações referentes à estrutura, composição e biosíntese da lignina se baseiam em lignina derivada de material lenhoso, conforme destacado por HIGUCHI (1990), LIN e DENCE (1992) e SARKANEN e LUDWIG (1972). Poucas publicações são voltadas para a lignina derivada de herbáceas. GHAFAR e FAN (2014) explicam esta tendência através da importância da produção de bioetanol a partir de biomassa renovável.

GHAFAR e FAN (2014) apresentam um panorama abrangente sobre o atual cenário de utilização da lignina para produção de materiais. Essa publicação considera que uma das principais causas da baixa aplicação comercial desta tecnologia corresponde à dificuldade de separação da lignina em plantas herbáceas, destacando a importância da extração deste material. O mesmo artigo estabelece as diferenças entre lignina derivada de aveia, do arroz e do milho, o que mostra que estudos sobre a lignina presente na cana-de-açúcar são relativamente novos.

Uma das razões para o estudo aprofundado da caracterização da lignina consiste em otimizar seu uso como adesivo na indústria. Atualmente, boa parte dos adesivos utilizados para esta finalidade consistem em formaldeído de uréia e derivados do petróleo. Também em GHAFAR e FAN (2014) são destacadas as desvantagens destes materiais, entre elas o alto preço de produtos de petróleo. STEWART (2008) menciona que outro adesivo muito utilizado para aplicações industriais é derivado de resina de formaldeído a qual, entre outras desvantagens, já se mostrou tóxica para humanos e contaminadora do meio ambiente, além de causar danos à saúde dos que a manipulam. Desta forma, o estudo de adesivos não tóxicos torna-se interessante na medida em que reduziria os males causados pelos atuais adesivos largamente utilizados.

LEWIS *et al.* (1989) estudou as propriedades adesivas da lignina: em termos de eficiência, a lignina isolada não apresenta boas propriedades adesivas para materiais compósitos quando comparada com adesivos tradicionais derivados de resinas. Entretanto, em conjunto com hemicelulose, a lignina apresenta boas características

adesivas para utilização em materiais celulósicos.

Existem diversos processos para modificação das propriedades e composição da lignina, bem como sua otimização. A seguir, abordaremos os processos encontrados na literatura.

### **Fenolização**

A Fenolização aperfeiçoa a reatividade da lignina insolúvel em água após hidrólise, fazendo com que as moléculas do material se incorporem mais facilmente à resina através de polimerização. Estudo apresentado por MA *et al.* (2011) mostra que a fenolização da lignina insolúvel em água em combinação com a polimerização da resina melhorou as características da amostra, tais como morfologia, estabilidade, elasticidade e resistência à água e à radiação ultra-violeta. Essa melhora nas propriedades do material se devem principalmente ao aumento da interação entre a resina e a lignina.

### **Ultrafiltração**

O processo de ultrafiltração é utilizado para produção de lignina que requer um peso molecular específico. Em estudo, FORSS e FUHRMANN (1979) afirmam que adesivos feitos com resina fenólica e com alto peso molecular, a partir de processo de ultrafiltração, mostraram maior força adesiva. Além, este processo mostrou-se, técnica e economicamente, atrativo em estudos simulados por KIRKMAN *et al.* (1986). JÖNSSON e WALLBERG (2009), estabelecem outras vantagens da ultrafiltração, como por exemplo a não-necessidade de grandes ajustes no pH, temperatura ou concentração da solução.

### **Pré-tratamentos biológicos**

Os pré-tratamentos biológicos são menos agressivos que os tratamentos físicos ou químicos. GHAFAR e FAN (2014) afirmam que, basicamente, há duas abordagens: ativação enzimática da lignina e adesão assistida. O primeiro aperfeiçoa as propriedades auto-adesivas da biomassa a partir da oxidação da lignina presente na superfície do material. WIDSTEN e KANDELBAIER (2008), por outro lado, afirmam que a ativação enzimática ocorre devido a radicais fenol localizados na superfície do material, que se ligam quando o material é pressionado.

Diversos autores destacam a viabilidade da substituição parcial de fenol em

resinas de material fenol-formaldeído por lignina, dadas suas características fenólicas. PARK *et al.* (2008) estudaram a substituição de fenol em resinas de fenol-formaldeído por lignina derivada de bagaço de cana-de-açúcar. Através de substituições em diferentes porcentagens, foi possível determinar uma porcentagem otimizada para a substituição, em função de testes térmicos e reológicos. Em testes de absorção de água, a substituição se mostrou efetiva. Os resultados de YSBRANDY *et al.* (1992) mostram que a resina fenol-formaldeído contendo 33% de bagaço de lignina tratada por fenolização resultou em amostras com melhores propriedades físicas. KHAN *et al.* (2004) estudaram a possibilidade de preparo de adesivos a partir de lignina derivada de bagaço de plantas. Resultados indicam que até 50% de fenol pode ser substituído por lignina em adesivos feitos a partir de fenol-formaldeído, sem perda da qualidade da adesão quando comparado com adesivos comerciais. ZHANG *et al.* (2013) estudaram substituições de 10% a 70% do fenol por lignina derivada de bagaço de cana-de-açúcar em um material lignina-fenol-formaldeído, confirmando o sucesso da substituição e a viabilidade industrial da produção do material.

GHAFFAR e FAN (2014) destacam as três formas de utilização da lignina em materiais fenol-formaldeído:

- Reação da lignina com o fenol, com posterior reação do material lignina-fenol com formaldeído.
- Lignina reage com fenol e formaldeído, com subsequente reação do pré-polímero com fenol.
- Reação do fenol com formaldeído, com subsequente reação da mistura à lignina.

Alguns autores destacam as desvantagens da substituição parcial de fenol por lignina em resinas fenol-formaldeídos. DOHERTY *et al.* (2011) advertem a respeito da influência que o método de extração da lignina bem como o tipo de biomassa utilizado exercem sobre as propriedades do novo material. CYR e RITCHIE (1989) destacam que resinas derivadas de lignina possuem performance de adesão sujeita a grandes variações bem como propriedades de adesão mais fracas. HIRO-KUNI e KENICHI (1989) justificam essa baixa performance de adesão através da presença de contaminantes e plastificantes. Esses contaminantes não são apenas externos, eles podem ser inerentes ao próprio material, como moléculas de baixo peso molecular da própria lignina.

A análise das referências citadas nos permite concluir que há uma tendência tecnológica atual voltada para o desenvolvimento de materiais a partir de fontes

renováveis. A substituição de fenol por lignina em resinas de fenol-formaldeído assume um papel de destaque neste campo, e observa-se um grande número de publicações recentes. Entretanto, estas não são suficientes para determinar a viabilidade desses novos materiais, havendo necessidade de mais testes com essa finalidade. Boa parte das pesquisas ainda se encontra em nível inicial, reforçando que este é um período de desenvolvimento do tema.

## **2.2. Modelos de Adesão**

Nesta seção abordaremos os modelos de adesão encontrados na literatura, bem como suas subdivisões. Os modelos de adesão são extensivamente estudados e muitas são as publicações nesta área. Uma busca no site ResearchGate gera mais de 300.000 resultados para as palavras chave “adhesion model”, fora as publicações neste campo que não possuem a palavra chave. Dado o grande volume de material e informações a respeito do tema em questão, a bibliografia estudada concentra-se principalmente em publicações que fazem revisões abrangentes de trabalhos já publicados.

SAUER (2016) apresenta uma revisão extensa e mais recente de diversos modelos de adesão, apresentando suas características e subdivisões. Este autor fez um extensivo trabalho de pesquisa a fim de dissertar sobre boa parte dos modelos de adesão mais relevantes. Apesar de ter enfoque em modelos com aplicações computacionais, e não experimentais ou analíticos, esta revisão indica as principais tendências no que se refere aos modelos de adesão como um todo. Inicialmente, SAUER (2016) restringe sua pesquisa a modelos mais gerais, aplicáveis a diversas situações particulares. O principal aspecto discutido na publicação é a mecânica do modelo, apesar de efeitos térmicos serem brevemente discutidos. Adicionalmente, os modelos revisados por SAUER (2016) são aplicáveis a sólidos, e não líquidos. Nessa publicação são definidas três abordagens para modelagem da adesão:

- i. Modelos de material local, que descrevem o comportamento do material do adesivo.
- ii. Modelos de interface local, que descrevem o comportamento de adesão na interface do material.
- iii. Modelos globais de adesão, que descrevem o comportamento efetivo de adesão.

Modelos de material local descrevem o comportamento tensão-deformação do adesivo devido a parâmetros locais, como: elasticidade, viscosidade, plasticidade, fratura, dano e efeitos térmicos, cura e envelhecimento. Para adesivos líquidos, forças capilares devido à tensão superficial podem ser importantes.

Modelos locais de interface descrevem o comportamento tração-separação local na interface do material. Este comportamento pode estar relacionado a ligações moleculares fortes ou fracas, interações eletrostáticas ou fenômenos de fratura e modelos de descolamento. Esta abordagem, particularmente, pode representar praticamente todos os mecanismos de adesão.

Já os modelos de adesão efetiva descrevem os efeitos de ligação e descolamento a um nível global, por exemplo na forma de curvas globais de carga-deslocamento.

Atualmente, dependemos de modelos mecânicos constitutivos para estudo do comportamento físico de adesivos sob diferentes condições. O estudo apresentado por SAUER (2016) mostra que esses modelos devem ser capazes de representar a reação do adesivo sendo exposto a diversas cargas, bem como prever a perda da intensidade de adesão.

Boa parte dos trabalhos de modelagem de interfaces geram uma análise de decoesão e a modelagem dos efeitos de fricção são muito elementares, partindo da Lei de Tresta, quando presente, conforme observado em HUTCHINSON e JENSEN (1990) e MARSHALL (1984).

O trabalho publicado por RAOUS *et al.* (1999) apresenta um modelo constitutivo de adesão considerando contato unilateral e fricção de Coulomb, sendo bastante abrangente e generalizado. A zona de contato foi considerada como um material limite e as leis constitutivas foram elaboradas escolhendo dois potenciais de superfície: energia livre e potencial de dissipação, que possuem propriedades não-regulares. Desta forma, as leis de comportamento local são definidas através de uma análise convexa. É introduzida uma variável ( $\beta$ ) para representação da intensidade de adesão, que inclui o efeito viscoso. Soma-se à isso a inclusão de condições de não-penetração e a Lei de Coulomb.

O trabalho desenvolvido por CHABOCHE *et al.* (1997) forneceu uma proposta para garantir a continuidade dos modelos de tensão e deslocamento em uma interface adesiva. Já em STUPKIEWICZ (1996) são consideradas as micro asperezas da

superfície, em um modelo governado por critérios de tensão ou energia. Nestes casos, as condições de contato – não penetração e lei de fricção – são modeladas e não se considera o efeito viscoso na evolução do modelo de adesão.

Diversos trabalhos analíticos e numéricos, tais como HUTCHINSON e JENSEN (1990) e LEGUILLON (1994), tratam o modelo de decoesão como uma decoesão frágil para a interface de adesão, e não um modelo progressivo de decoesão.

Também foram encontradas referências a trabalhos que utilizam um terceiro corpo na modelagem da interface de adesão, conforme visto em CHABOCHE *et al.* (1997). Apesar de ser uma solução atrativa, problemas numéricos são encontrados devido à dificuldade de determinação da geometria e parâmetros do terceiro corpo e à problemas relacionados à geração da malha, dado que as dimensões da interface de adesão são infinitamente menores que o domínio do terceiro corpo.

Um estudo mais recente apresentado por ALBUQUERQUE *et al.* (2015) utiliza uma simplificação do modelo de adesão proposto por RAOUS *et al.* (1999). ALBUQUERQUE *et al.* (2015) desconsidera as componentes tangenciais do deslocamento, desta forma desconsiderando efeitos de cisalhamento e fricção. Além, este trabalho considera apenas interações entre uma superfície rígida e um corpo deformável.

## **2.3. Fundamentos da Teoria Bayesiana e Problemas Inversos**

### **2.3.1. Filtragem e Teoria Bayesiana**

A teoria Bayesiana foi proposta pelo pesquisador britânico Thomas Bayes em 1763 através de uma publicação póstuma (BAYES (1763)). A teoria proposta por Bayes só passou a ser relevantemente reconhecida após sua reformulação moderna pelo matemático francês Pierre-Simon de Laplace. Inferência Bayesiana voltada para aplicação de estatística Bayesiana à inferência estatística se tornou um importante rumo da estatística, conforme destacado em BERNARDO e SMITH (1998) e KWOK *et al.* (2003) e tem sido aplicada com sucesso em detecção e estimativa de parâmetros, reconhecimento e análise de padrões. Em diversos casos, os resultados alcançados através de inferência Bayesiana são considerados ótimos, de acordo com CHEN

(2003). Dessa forma, a teoria Bayesiana é muito estudada na literatura relativa à filtragem.

Uma das primeiras publicações em estimativa Bayesiana iterativa é encontrada em HO e LEE (1964), na qual os autores especificaram os princípios e procedimento da filtragem Bayesiana. SPRAGINS (1965) dissertou a respeito da aplicação iterativa da teoria de Bayes à estimativa sequencial de parâmetros. LIN e YAU (1967) e CHIN *et al.* (2002) discutiram a otimização de sistemas adaptativos através de abordagem Bayesiana.

### **3.2.2. Métodos de Monte Carlo e Filtragem de Monte Carlo**

A idéia inicial de Monte Carlo remonta ao problema da agulha de buffon, quando em 1777 Buffon tentou estimar o valor de  $\pi$ , fato curioso descrito por CHEN (2003). O método de Monte Carlo é nomeado em homenagem ao principado de Mônaco.

As formulações modernas dos métodos de Monte Carlo começaram em 1940 nas áreas da física, conforme visto em METROPOLIS *et al.* (1953) e METROPOLIS *et al.* (1949). Mais tarde, nos anos 50, começaram a nascer publicações nas áreas de estatística (HAMMERSLEY e HANSCOMB (1964)). Em décadas mais recentes, CHEN (2003) estabelece que técnicas de Monte Carlo foram redescobertas nas áreas de estatística, física, engenharia, econometria, biologia, automação e robótica e processamento de sinais, com muitas técnicas novas sendo atualizadas.

CHEN (2003) afirma que a técnica de Monte Carlo visa atacar sistemas complexos sem solução analítica, através de uma abordagem estocástica de amostragem. Dessa forma, problemas com integração numérica complexa podem ser resolvidos.

Uma das vantagens da abordagem de Monte Carlo sequencial é a possibilidade de estimar parâmetros combinando método de amostragem de Monte Carlo com inferência Bayesiana, com baixo custo computacional, conforme estabelecido por CHEN (2003). Particularmente, a abordagem sequencial de Monte Carlo tem sido utilizada na estimativa de parâmetros e estados, este último sendo chamado filtro de partículas.

O filtro de partículas usa um número de variáveis independentes e aleatórias chamadas partículas, retiradas diretamente do espaço de estados para representar a probabilidade posterior, e atualizar o estado posterior através de modelos de observação. O sistema de partículas é corretamente ponderado e propagado recursivamente de acordo com o Teorema de Bayes (CHEN (2003)).

A filtragem por partículas não é a única opção de filtragem Bayesiana. CHEN (2003) afirma que esta também pode ser aplicada através da utilização de outras técnicas, tais como: geometria diferencial, método variacional e método conjugado.

### **3.2.3. Teoria Bayesiana aplicada à problemas de Engenharia Mecânica**

A maior parte das publicações relativas a problemas inversos aplicados a Engenharia Mecânica encontradas na literatura são voltadas para a área de engenharia térmica, conforme destacado por KAIPIO e FOX (2011), embora possamos encontrar algumas publicações voltadas para a mecânica dura.

Em pesquisa recente, HAMILTON *et al.* (2013) estimaram o coeficiente de transferência de calor na parede do cilindro de um motor de combustão interna. Trata-se de um problema não-estacionário solucionado pelo filtro SIR, e cujas medidas consideradas são sintéticas, obtidas a partir de um modelo direto. O resultado é avaliado variando-se frequência de aquisição dos dados, estimativa inicial e número de partículas. Os resultados obtidos foram satisfatórios para o propósito do artigo.

Projeto similar à HAMILTON *et al.* (2013) é encontrado na publicação de ESTUMANO *et al.* (2014), também voltado para a área de transferência de calor. Neste, foi determinada a taxa de liberação da quantidade de calor em um motor através do método SIR. Os resultados concluem que este parâmetro pode ser determinado mesmo quando não há nenhuma informação a respeito do comportamento do parâmetro, mostrando como a aplicação da estatística de problemas inversos é uma ferramenta poderosa.

Indo mais para a área da mecânica dura, boa parte das publicações que se referem a problemas inversos correspondem a problemas de mecânica da fratura. KEAT *et al.* (1998) desenvolvem um algoritmo inverso não linear para reconhecimento de falhas existentes sob a superfície de sólidos tridimensionais. É utilizado um modelo de

mecânica da fratura. Trabalho similar foi feito por MELLINGS e ALIABADI (1993), por sua vez considerando uma superfície (modelo bidimensional).

### **3. Metodologia**

Nesta seção é apresentada inicialmente a proposta e definição do problema que nos dispomos a resolver. Em seguida, expõe-se a metodologia para solução do problema, incluindo todas as técnicas e ferramentas utilizadas, considerações feitas e dissertação a respeito do modelo matemático utilizado.

#### **3.1. Problema proposto**

O problema proposto neste trabalho consiste na identificação e estudo das propriedades e parâmetros de materiais adesivos, tais como:

- Resistência
- Rigidez
- Energia de decoesão
- Capacidade de adesão
- Condições de integridade

O conjunto desses parâmetros e características nos permitirá caracterizar novos materiais adesivos, mais especificamente os materiais derivados de lignocelulose.

A caracterização desses materiais será feita utilizando um conjunto de técnicas e ferramentas, que incluem, não exclusivamente, teoria Bayesiana, um modelo de adesão e realização de procedimentos experimentais.

#### **3.2. Modelo de Adesão**

O modelo de adesão utilizado neste trabalho foi derivado do trabalho apresentado por ALBUQUERQUE *et al.* (2015). Este consiste em um modelo de contato que apresentaremos nesta seção, simplificado de RAOUS *et al.* (1999).

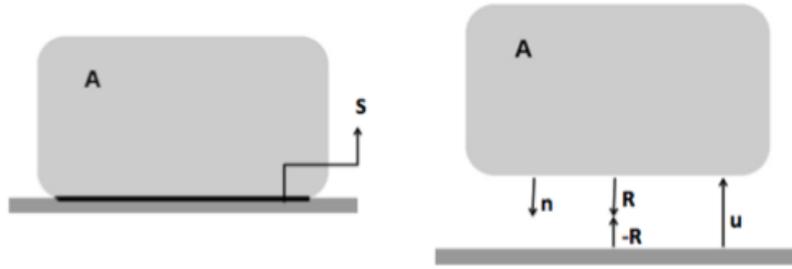


Figura 2 – Ilustração do modelo de contato entre duas superfícies, com a inclusão de um adesivo na interface, ALBUQUERQUE *et al.* (2015).

A Figura 2 ilustra o modelo de adesão. Para fins de simplificação, as seguintes hipóteses serão consideradas como verdadeiras:

- Desconsideração da componente tangencial de deslocamento.
- Desconsideração dos efeitos cisalhantes e de fricção entre as superfícies.
- Considera-se apenas corpos deformáveis ligados à superfície rígida.

Na Figura 2, **A** representa o corpo deformável, ligado à superfície rígida e **S** representa a interface adesiva, de espessura desprezível, **u** representa o vetor deslocamento vertical do corpo relativo à superfície rígida e **n** o vetor unitário relativo ao corpo. Podemos então definir o deslocamento vertical em cada ponto da interface **S** através da relação  $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ . Da mesma forma, a força de contato  $r_n$  pode ser escrita na forma vetorial  $r_n = \mathbf{R} \cdot \mathbf{n}$ . Podemos criar uma variável para determinação da intensidade de adesão,  $\beta$ , podendo variar entre 0 e 1, correspondendo respectivamente às condições de não-adesão e adesão total sem dano.

A reação de contato e o deslocamento são definidos por (ALBUQUERQUE *et al.* 2015):

$$r_n + \beta^2 C_n u_n \leq 0; \quad u_n \leq 0; \quad (r_n + \beta^2 C_n u_n) u_n = 0 \quad (1)$$

Também podemos definir o modelo de evolução da taxa de intensidade de adesão:

$$\dot{\beta} = - \left[ \frac{1}{b} \langle \beta^2 C_n u_n - w \rangle \right]^{1/p}, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (2)$$

Onde:

- $p \leq 1$
- $C_n$  é a rigidez.
- $b$  é a viscosidade.
- $w$  é o limite de energia para descolamento.

Na equação (2), os colchetes representam a notação de MacAuley's, a seguir definida:

$$\langle g \rangle = g, \text{ se } g > 0 \quad (3.a)$$

$$\langle g \rangle = 0, \text{ se } g \leq 0 \quad (3.b)$$

A partir das equações (1) e (2), podemos fazer uma análise do modelo de adesão. Elas relacionam as variáveis  $\beta$ ,  $u_n$  e  $r_n$  a partir do momento de aplicação de uma carga, com os parâmetros  $C_n$ ,  $b$ ,  $w$  e  $p$ , dados. Estes parâmetros podem ser estimados a partir de dados experimentais das variáveis por meio de um problema inverso.

No caso da adesão total to corpo à superfície, isto é,  $u_n = 0$ , conclui-se que  $r_n < 0$  e o vetor  $\mathbf{R}$  aponta para dentro do corpo  $A$ . Caso haja dano à interface adesiva, e consequente separação das superfícies ( $u_n > 0$ ), de (1) conclui-se:  $r_n = -\beta^2 C_n u_n > 0$ , e a reação  $R$  aponta para fora do corpo  $A$ . Em casos onde o deslocamento for grande o suficiente para a energia elástica ultrapassar o limite de energia de descolamento, a intensidade da adesão passa a diminuir, de acordo com (2). A lei de evolução (2) estabelece também a impossibilidade de recuperação da capacidade de adesão, isto é,  $\dot{\beta} \leq 0$ .

### 3.3. Modelo de Adesão Aplicado à uma viga

A seguir apresentaremos a proposta de problema que será resolvido tanto pela realização de procedimentos experimentais quanto pela simulação numérica, abordados posteriormente.

O problema consiste em um modelo simples de viga engastada para a reprodução do comportamento de adesão em procedimento experimental. Este modelo é de fácil solução através da equação de Euler-Bernoulli.

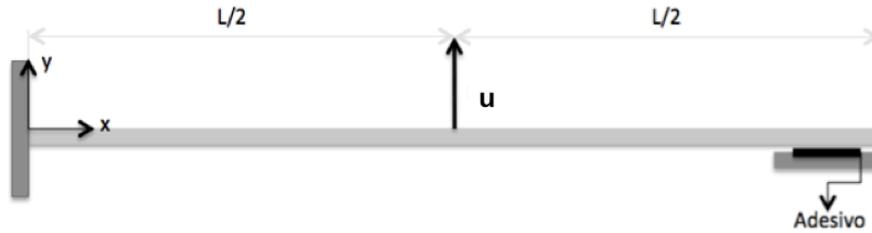


Figura 3 – Proposta de problema consistindo em uma viga engastada.

A figura 3 ilustra a viga utilizada para solução do problema proposto. As seguintes hipóteses e considerações são feitas:

- A lateral esquerda da viga se encontra engastada, ao passo que a lateral direita é anexada à uma base rígida através de uma interface adesiva.
- A viga possui material homogêneo e seção uniforme ao longo de seu comprimento.
- A base rígida permite apenas deslocamento no eixo  $y$  ( $u_n(L, t) = -u_y(L, t)$ ).
- As dimensões da interface adesiva na extremidade  $x = L$  da viga são consideradas desprezíveis em comparação com o comprimento da viga.
- Considera-se uma força quasi-estática aplicada no centro da viga.

A partir das considerações acima e da teoria de vigas de Euler-Bernoulli, apresentaremos a solução analítica do problema. Visto que durante a realização do procedimento experimental será prescrito o deslocamento e não a força no centro da viga, bem como também serão medidos os deslocamentos na extremidade  $x = L$ , apresentaremos as soluções nesta seção para os pontos  $x = L$  e  $x = L/2$ . A solução em cada ponto é subdividida de acordo com a carga aplicada à viga: haverá diferentes soluções para cargas  $F > 0$  e  $F < 0$  (cargas aplicadas nos sentidos positivo e negativo do eixo  $y$ , respectivamente). O momento em qualquer ponto da barra é definido por:

$$M_b = -r_n(L - x) + F \left\langle \frac{L}{2} - x \right\rangle \quad 0 \leq x \leq L \quad (4)$$

Pode-se, então, definir a relação momento-deslocamento através da teoria de Euler-Bernoulli:

$$EI \frac{d^2 u_y}{dx^2} = -r_n(L - x) + F \left\langle \frac{L}{2} - x \right\rangle \quad 0 \leq x \leq L \quad (5)$$

onde  $E$  representa o modulo de elasticidade do material da viga e  $I$  o momento de inércia da seção transversal da viga. O valor entre chaves representa a descontinuidade do momento. Como a viga encontra-se engastada em sua extremidade direita, podemos determinar as condições de contorno do problema:

$$\frac{du_y}{dx}(0) = 0 \quad u_y(0) = 0 \quad (6)$$

A partir de 2 e 3 podemos determinar  $u_y(x)$  para qualquer  $x$ . Inicialmente, desenvolveremos a solução para  $x = L$ . Realizando um processo de integração na equação (5), obtemos:

$$EI \frac{du_y}{dx} = -r_n \left( Lx - \frac{x^2}{2} \right) - F \frac{\langle \frac{L}{2} - x \rangle^2}{2} + C_1 \quad (7)$$

Aplicando a condição de contorno (6), obtemos  $C_1$ :

$$C_1 = \frac{FL^2}{8} \quad (8)$$

Assim,

$$EI \frac{du_y}{dx} = -r_n \left( Lx - \frac{x^2}{2} \right) - F \frac{\langle \frac{L}{2} - x \rangle^2}{2} + \frac{FL^2}{8} \quad (9)$$

Integrando a equação (9), obtemos:

$$EI u_y = -r_n \left( L \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} \right) + F \frac{\langle \frac{L}{2} - x \rangle^3}{6} + \frac{FL^2 x}{8} + C_2 \quad (10)$$

Substituindo a condicao de contorno (6) na equação (10), obtemos o valor de  $C_2$ :

$$C_2 = -\frac{FL^3}{48} \quad (11)$$

Desta forma, encontramos a relação entre  $u_y(x)$  e  $E, I, r_n, F$  e  $L$ :

$$EIu_y(x) = -r_n \left( L \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} \right) + F \frac{\left(\frac{L}{2} - x\right)^3}{6} + \frac{FL^2x}{8} - \frac{FL^3}{48} \quad (12)$$

Substituindo  $x$  por  $L$  em (12), encontramos:

$$EIu_y(L) = \frac{-r_n L^3}{3} + \frac{5F}{48} \quad (13)$$

Entretanto, conforme exposto anteriormente,  $u_n > 0$  e, conseqüentemente,  $r_n = -\beta^2 C_n u_n$ . Após substituição em 10 e manipulação algébrica, encontramos:

$$[r_n, u_y(L)] = \frac{5F}{16} \begin{cases} [1, 0], & \text{se } F \leq 0 \\ \left[ \frac{\beta^2 C_n}{\frac{3EI}{L^3} \left(1 + \frac{\beta^2 C_n L^3}{3EI}\right)}, \frac{1}{\frac{3EI}{L^3} \left(1 + \frac{\beta^2 C_n L^3}{3EI}\right)} \right], & \text{se } F > 0 \end{cases} \quad (14)$$

Podemos também encontrar a solução em  $x = L/2$ . Chamamos  $u_y(L/2)$  de  $u^*$  e substituindo  $x$  por  $L/2$  na equação (12), obtemos:

$$EIu^* = -r_n \frac{5L^3}{48} + \frac{FL^3}{24} \quad (15)$$

Substituindo a condição da equação (1) para o caso em que  $F > 0$ , encontramos:

$$EIu^* = -r_n \frac{5L^3 \beta^2 C_n u_y(L)}{48} + \frac{FL^3}{24} \quad (16)$$

Isolando  $F$ :

$$F = \left[ \frac{24u^*EI}{L^3} + \frac{5\beta^2 C_n u_y(L)}{2} \right] \quad (17)$$

Substituindo 17 em 14:

$$u(L) = \frac{1}{1 + \frac{\beta^2 C_n L^3}{3EI}} \left[ \frac{5}{2} u^* + \frac{25\beta^2 C_n L^3}{96 EI} u(L) \right] \quad (18)$$

Após manipulação algébrica da equação (18), podemos encontrar  $u(L)$  em função de  $u^*$ :

$$[r_n, u_y(L)] = \begin{cases} \left[ \frac{5u^*}{16} \left( \frac{24EI}{L^3} + \frac{600\beta^2 C_n EI}{96EI + 7\beta^2 C_n L^3} \right), 0 \right], & se \ u^* \leq 0 \\ \left[ \left( \frac{5}{2} \right) \frac{u^* \beta^2 C_n}{1 + \frac{7\beta^2 C_n L^3}{96EI}}, \left( \frac{5}{2} \right) \frac{u^*}{1 + \frac{7\beta^2 C_n L^3}{96EI}} \right], & se \ u^* > 0 \end{cases} \quad (19)$$

### 3.4. Desenvolvimento de Simulador Computacional para o modelo

A fim de verificar o modelo proposto nas seções anteriores bem como validar os resultados experimentais, foi desenvolvido um simulador no MATLAB. Este tem por finalidade reproduzir computacionalmente o comportamento do modelo apresentado na Seção 3.3 com a geração dos gráficos pertinentes para análise dos resultados, conforme será apresentado na Seção 4.

Inicialmente  $u^*$  foi prescrito como uma função do tempo  $u^* = u_0 \zeta(t)$ , sendo considerado um deslocamento crescente monotônico. A ordem de grandeza de  $u^*$  foi estimada a partir dos resultados apresentados em ALBUQUERQUE *et al.* (2015), que apresentam estudo semelhante, mas com prescrição da força  $F$  aplicada no centro da viga.

Considerando  $E, I$  e  $L$  da viga constantes ao longo do tempo, podemos realizar a adimensionalização das propriedades do adesivo, conforme segue:

$$\frac{u^*}{u_0} = \zeta(t) \quad (20)$$

De (19),

$$u_y(L) = \left(\frac{5}{2}\right) \frac{u_0 \zeta(t)}{1 + \frac{7\beta^2 C_n L^3}{96EI}} \quad (21)$$

Fazendo  $\bar{u} = u(L)/u_0$ :

$$\bar{c} = \frac{7C_n L^3}{96EI} \quad (22)$$

$$\bar{u} = \left(\frac{5}{2}\right) \frac{\zeta(t)}{1 + \beta^2 \bar{c}} \quad (23)$$

Similarmente para  $r_n$ , substituimos  $u^*$  por  $u_0 \zeta(t)$ :

$$r_n = \left(\frac{5}{2}\right) \frac{u_0 \zeta(t) \beta^2 C_n}{1 + \frac{7\beta^2 C_n L^3}{96EI}} \quad (24)$$

Fazendo  $\bar{r}_n = r_n / u_0 C_n$ , encontramos:

$$\bar{r}_n = \left(\frac{5}{2}\right) \frac{\zeta(t) \beta^2}{1 + \beta^2 \bar{c}} \quad (25)$$

E, conseqüentemente podemos definir:

$$\bar{w} = \frac{3wEI}{u_0^2 L^3 C_n^2} \quad (26)$$

$$\bar{b} = \frac{3bEI}{u_0^2 L^3 C_n^2} \quad (27)$$

Podemos adimensionalizar também a Lei de evolução da intensidade de adesão apresentada em (2):

$$\dot{\beta} = - \left[ \frac{1}{\bar{b}} \langle \beta \bar{c} \bar{u}^2 - \bar{w} \rangle \right]^{1/p}, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (28)$$

Foram prescritos um intervalo de tempo e a função deslocamento em  $x = L/2$ . A rotina recebe valores de  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$  e  $\bar{w}$  e calcula o deslocamento  $\bar{u}$  e a reação  $\bar{r}_n$  na extremidade  $x = L$  da viga a partir de um processo iterativo no tempo.

A fim de avaliar a influência do parâmetro  $\beta(t)$  no comportamento do modelo, os valores de  $\beta$  são calculados a cada instante de tempo, a partir da integração numérica da lei de evolução da intensidade de adesão (2), utilizando a função *ode45* do Matlab.

Foram plotados os gráficos  $\bar{u}$  e  $\beta$  em função do tempo, e  $r_n$  e  $\beta$  em função de  $\bar{u}(t)$ ,  $\beta(t)$  e  $\bar{r}_n(t)$ . A razão para geração específica destes gráficos é devido à necessidade de comparação dos resultados com gráficos similares apresentados por ALBUQUERQUE *et al.* (2015).

### 3.5. Abordagem Bayesiana de Problemas Inversos

A caracterização dos materiais adesivos consiste, não exclusivamente, na estimativa de determinados parâmetros do modelo apresentado na Seção 3.3. No presente trabalho, esses parâmetros serão determinados a partir de um problema inverso com base na Teoria Bayesiana, cujos fundamentos são apresentados nas seguintes seções. Uma discussão inicial à respeito da análise de sensibilidade do modelo também é apresentada.

#### 3.5.1. Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade é um estudo que deve ser feito antes da estimativa dos parâmetros a fim de determinar a possibilidade de estimativa dos mesmos, em conjunto ou isolados. ÖZISIK e ORLANDE (2000) apresentam três métodos para estudo da análise de sensibilidade de problemas inversos. O método da solução analítica direta para esse estudo requer, segundo ÖZISIK e ORLANDE (2000):

1. Problema linear e
2. Solução analítica disponível para o problema.

Como já obtivemos a solução analítica para o problema, este será o método utilizado neste trabalho.

O método consiste em determinar os coeficientes de sensibilidade com respeito à um parâmetro  $P_j$  diferenciando-se a função analítica com relação à  $P_j$ .

Definindo a matriz de sensibilidade  $J(\mathbf{P})$ :

$$J(\mathbf{P}) = \left[ \frac{\partial \mathbf{f}^T(\mathbf{P})}{\partial \mathbf{P}} \right]^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial P_1} & \frac{\partial f_1}{\partial P_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial P_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_I}{\partial P_1} & \frac{\partial f_I}{\partial P_2} & \dots & \frac{\partial f_I}{\partial P_N} \end{bmatrix} \quad (29)$$

Onde  $N$  é o número de parâmetros desconhecidos e  $I$  é o número total de medidas. Os elementos  $J_{ij}$  são chamados coeficientes de sensibilidade da matriz.

Os coeficientes de sensibilidade  $J_{ij}$  são cruciais na determinação da possibilidade de estimativa dos parâmetros. O coeficiente de sensibilidade é uma medida da sensibilidade do *output* com relação a variações em um parâmetro  $P_j$ .  $J_{ij}$  com grande magnitude indica grandes variações no parâmetro  $P_j$ , gerando pequenas variações no *output*. É desejável, portanto, obtermos coeficientes de sensibilidade linearmente independentes e com grandes magnitudes, de forma que o problema não seja muito sensível a erros de medição e possa estimar com precisão os parâmetros desejados.

Para realização da análise dos coeficientes de sensibilidade do problema que propomos, realizamos a derivada do resultado analítico tanto para  $\bar{r}_n$  quanto para  $\bar{u}$  com relação à cada parâmetro ( $\bar{c}$ ,  $\bar{b}$  e  $\bar{w}$ ). Ao realizarmos essa análise para as duas diferentes funções, será mais fácil identificar qual medida devemos usar na hora de implementar o método de solução do problema inverso.

Para implementação do código em Matlab para estudo da análise de sensibilidade, foi utilizado o método das diferenças finitas a fim de encontrar as derivadas parciais da equação diferencial correspondente. Será implementado o método das diferenças finitas centradas, conforme ÖZISIK e ORLANDE (2000):

$$X_i(t) \cong P_i \left[ \frac{Z_2(t) - Z_1(t)}{2\varepsilon P_i} \right] \quad (30)$$

Na equação (30),  $X_i(t)$  é o coeficiente de sensibilidade em relação a um parâmetro  $P_i$ .  $Z_1(t)$  e  $Z_2(t)$  são soluções do modelo direto para um valor muito pequeno acrescido e diminuído do parâmetro. Ou seja,  $Z_1(t)$  é a solução do modelo direto, quando os outros valores  $P_j = \text{constante}$ , para um valor do parâmetro igual à  $P_i \cdot (1 + \varepsilon)$ , ao passo que  $Z_2(t)$  é a solução para  $P_i \cdot (1 - \varepsilon)$ . Para este trabalho, foram utilizados os seguintes valores de  $\varepsilon$ :  $10^{-4}$ ,  $10^{-7}$  e  $10^{-10}$ , e seus resultados foram comparados. O código utilizado para simulação da análise de sensibilidade encontra-se no Apêndice, ao final deste trabalho.

### 3.5.2. Modelagem do problema inverso

Um problema inverso pode ser definido como aquele que lida com a estimativa de valores desconhecidos que aparecem no modelo matemático de qualquer processo, a partir das medidas de certas variáveis dependentes do problema, conforme visto em BECK e ARNOLD (1977).

No problema direto do presente trabalho, representado pelas equações (1) e (2), conhecemos as condições iniciais do problema e o objetivo é determinar os valores da intensidade de adesão  $\beta$  e da reação na ponta adesiva da viga, em função do tempo.

Por outro lado, o problema inverso desenvolvido neste projeto envolve medições experimentais do deslocamento no centro da viga a fim de recuperar os parâmetros  $\bar{b}$ ,  $\bar{w}$  e  $\bar{c}$  do modelo, estacionários no tempo.

O vetor de parâmetros que aparece na descrição do problema inverso é representado por:

$$\mathbf{P}^T = [P_1, \dots, P_N] \quad (31)$$

onde  $N$  é o número de parâmetros de interesse. Neste caso, os parâmetros desconhecidos são  $b$  e  $w$  do modelo matemático.

O vetor  $\mathbf{Y}$  representa as medições, neste caso o deslocamento  $u^*$  no centro da viga, e é descrito da seguinte forma:

$$\mathbf{Y}^T = [u_1, \dots, u_l] \quad (32)$$

Onde  $u_l$  é o número total de medições.

Assumimos que os erros de medição são variáveis randômicas Gaussianas, com média zero, matriz de covariância  $\mathbf{W}$  conhecida e que os erros de medição são aditivos e independentes dos parâmetros  $\mathbf{P}$ . Dessa forma, a função de verossimilhança pode ser expressa como:

$$\pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P}) = (2\pi)^{-l/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(\mathbf{P})] \right\} \quad (33)$$

onde  $\mathbf{T}(\mathbf{P})$  é o vetor solução do problema direto, obtido com o vetor de parâmetros  $\mathbf{P}$ .

A função de verossimilhança fornece a densidade de probabilidade de diferentes  $\mathbf{Y}$  para um  $\mathbf{P}$  fixo (KAPIO E SOMERSALO (2004)).

A minimização do expoente da função likelihood maximiza a densidade de probabilidade, que resulta na função likelihood máxima objetiva.

É importante observar que essa solução clássica para problemas de estimativa de parâmetros não é baseada na modelagem de informação a priori e incerteza dos parâmetros desconhecidos. Por outro lado, em técnicas baseadas em estatística Bayesiana, os modelos de distribuição de probabilidade para os parâmetros desconhecidos e para as medições são construídos separadamente e independentemente, de acordo com KAPIO e SOMERSALO (2004).

A solução do problema inverso dentro da estrutura Bayesiana é reformulado através da inferência estatística pela densidade de probabilidade posterior ( $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$ ), que é o modelo para a distribuição de propabilidade condicional dos parâmetros desconhecidos, dadas as medições. O modelo de medições incluindo as respectivas incertezas é chamado likelihood, representada pela equação (33). O modelo para os parâmetros desconhecidos que reflete toda a incerteza dos parâmetros sem a informação transmitida pelas medições é chamado de modelo a priori (KAPIO E SOMERSALO (2004)). O mecanismo que relaciona as novas informações (medições) com a informação anteriormente disponível (priori) é conhecido como Teorema de Bayes (KAPIO E SOMERSALO (2004)). Desta forma, o termo Bayesiano é geralmente usado para descrever a abordagem estatística inversa. Essa abordagem faz as seguintes considerações:

- Todas as variáveis que aparecem no modelo são aleatórias.

- A aleatoriedade determina o grau de informação a respeito de suas realizações, que é escrito em distribuições de probabilidade.
- A solução do problema inverso é a distribuição de probabilidade a posteriori, da qual estimativas de distribuição e outras estatísticas são computadas.

O Teorema de Bayes é definido em KAIPIO e SOMERSALO (2004) como:

$$\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y}) = \frac{\pi(\mathbf{P})\pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P})}{\pi(\mathbf{Y})} \quad (34)$$

onde  $\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})$  é a densidade de probabilidade posterior,  $\pi(\mathbf{P})$  representa a densidade a priori,  $\pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P})$  é a função likelihood e  $\pi(\mathbf{Y})$  é a densidade de probabilidade marginal das medições, realizando o papel de uma constante normalizadora, onde:

$$\pi(\mathbf{Y}) = \int_{R^N} \pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y}) d\mathbf{P} \quad (35)$$

O cálculo de  $\pi(\mathbf{Y})$  é geralmente difícil e não necessário para efeitos práticos, de acordo com a publicação de ORLANDE (2015). Dessa forma, o teorema de Bayes pode ser escrito da seguinte forma:

$$\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y}) = \pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y}) \propto \pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P}) \cdot \pi(\mathbf{P}) \quad (36)$$

Dentro da abordagem Bayesiana, uma das técnicas mais comuns para estimativas computacionais de amostragem da distribuição posterior é o método de Monte Carlo com Cadeia de Markov (MCMC). A técnica mais comum de MCMC é o algoritmo de Metropolis-Hastings (KAIPIO E SOMERSALO (2004)), cuja implementação começa com a seleção de uma distribuição proposta  $p(\mathbf{P}^*, \mathbf{P}^{(t-1)})$ , usada para adquirir um novo candidato  $\mathbf{P}^*$ , dado o estado atual  $\mathbf{P}^{(t-1)}$  da Cadeia de Markov. Uma vez que a distribuição proposta é selecionada, o algoritmo de amostragem de Metropolis-Hastings é implementado. Abaixo, é mostrada uma tabela com os passos para implementação do algoritmo de Monte Carlo Cadeia de Markov.

<b>Tabela do Algoritmo MCMC</b>
1. Escolha um <i>ponto candidato</i> $\mathbf{P}^*$ da distribuição $p(\mathbf{P}^*, \mathbf{P}^{(t-1)})$ .
2. Calcule o valor de aceitação:  $AF = \min \left[ 1, \frac{\pi(\mathbf{P}^*   \mathbf{Y})p(\mathbf{P}^{(t-1)}, \mathbf{P}^*)}{\pi(\mathbf{P}^{(t-1)}   \mathbf{Y})p(\mathbf{P}^*, \mathbf{P}^{(t-1)})} \right]$
3. Gerar um valor randômico $U$ uniformemente distribuído em $(0,1)$ .
4. Se $U \leq AF$ , fazer $\mathbf{P}^t = \mathbf{P}^*$ . Caso contrário, fazer $\mathbf{P}^t = \mathbf{P}^{t-1}$ .
5. Retornar ao passo 1 enquanto o critério de convergência não for satisfeito.

Dessa forma, é gerada uma sequência representando a distribuição posterior e a inferência desta distribuição é obtida por inferência das amostras  $\{\mathbf{P}^{(1)}, \mathbf{P}^{(2)}, \dots, \mathbf{P}^{(N)}\}$ . Note que os valores de  $\mathbf{P}^{(i)}$  devem ser ignorados enquanto a cadeia não tiver convergido para o equilíbrio.

Para este trabalho foi adotado um modelo de random-walk da seguinte forma:

$$\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^{(t-1)} + w\mathbf{P}^{(t-1)}\boldsymbol{\varepsilon} \quad (37)$$

onde  $\boldsymbol{\varepsilon}$  representa um vetor aleatório com distribuição normal padrão:  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0,1)$ .

### 3.5.3. Considerações e simplificações para implementação do algoritmo MCMC

Durante o processo de implementação do método MCMC algumas simplificações e considerações sobre o modelo e seus parâmetros foram realizadas. Acredito que seja pertinente discutir esse tema de forma que o leitor possa entender o que de fato foi feito e como essas considerações se inserem no contexto do Teorema de Bayes.

Um dos desafios do problema desenvolvido neste trabalho é a falta de referências bibliográficas no que se refere à estimativa de parâmetros de materiais a partir de problemas inversos, mais especificamente ainda para o modelo de adesão

proposto. Desta forma, pouco sabemos a respeito do comportamento deste parâmetro. A escolha da distribuição de probabilidade a priori para o parâmetro é diretamente afetada por essa falta de informação. Uma distribuição gaussiana é interessante quando temos informações à respeito do parâmetros e da maior probabilidade destes terem um valor  $\mu$  (média da distribuição Gaussiana). Entretanto, a Figura 4 apresenta um problema ao utilizar uma distribuição Gaussiana para um parâmetro cujo comportamento não é totalmente conhecido. Podemos atribuir uma probabilidade muito grande a um valor errado ( $\mu$ ) quando o verdadeiro valor do parâmetro recebe uma probabilidade muito baixa (destacado em vermelho).

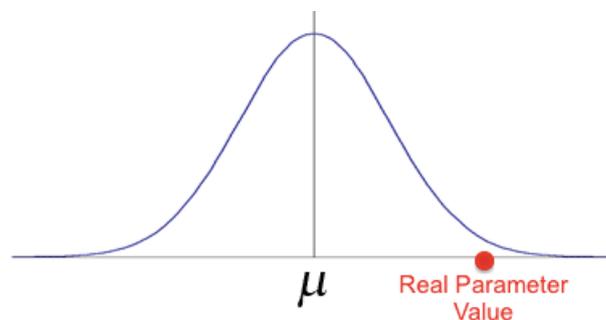


Figura 4 – Distribuição de probabilidade Gaussiana com média  $\mu$  e representação dos problemas associados.

Desta forma, neste trabalho utilizamos uma distribuição uniforme com valores mínimo e máximo para a priori dos parâmetros. Assim, qualquer valor dentro do suporte possuirá a mesma probabilidade  $1/(P_{MAX} - P_{MIN})$ , onde  $P_{MAX}$  e  $P_{MIN}$  são os valores máximo e mínimo da distribuição uniforme do parâmetro  $P$ .

A matriz de covariância  $|\mathbf{W}|$  foi modelada de forma que os parâmetros do modelo sejam não correlacionados.

A fim de que o processo de Random Walk mantenha o novo valor do parâmetro entre  $P_{MIN}$  e  $P_{MAX}$ , foi incluída uma rotina ao código computacional que garante essa condição. Esta consiste em verificar se o valor do parâmetro é aceitável a cada Random Walk. Caso o valor não seja aceitável, um novo Random Walk é gerado com o valor prévio do parâmetro.

O modelo é considerado simétrico, desta forma  $p(\mathbf{P}^{(t-1)}, \mathbf{P}^*) = p(\mathbf{P}^*, \mathbf{P}^{(t-1)})$  e o fator de aceitação pode ser simplificado a uma divisão entre as lifelihoods:

$$AF = \min \left[ 1, \frac{\pi(\mathbf{P}^* | \mathbf{Y})}{\pi(\mathbf{P}^{(t-1)}, \mathbf{Y})} \right]$$

Para este trabalho, as medidas sintéticas necessárias para alimentação do código MCMC foram modeladas da seguinte forma:

$$Y_{sint} = Y + \epsilon\sigma \quad (38)$$

Onde  $Y_{sint}$  são as medidas sintéticas obtidas,  $Y$  é o valor exato encontrado pelo algoritmo do modelo direto,  $\epsilon$  é uma distribuição normal padrão ( $N(0,1)$ ) e  $\sigma$  é o desvio padrão das medidas.

### 3.6. Metodologia para análise dos resultados numéricos

#### Critério de Convergência

Existem dois problemas relacionados à convergência dos resultados. O primeiro é garantir que a cadeia resultante possua média similar à referência do parâmetro que desejamos estimar, considerando-se um desvio padrão. A fim verificar essa condição, os seguintes passos foram seguidos:

1. Após inspeção visual do resultado, descarte do período de *burn in*.
2. Cálculo da média e desvio padrão da cadeia convergida.
3. Comparação do resultado e verificação da convergência, comparando-se à referência.

Esse procedimento foi seguido para todos os resultados encontrados para estimativa dos parâmetros a partir do método MCMC.

Um segundo problema relacionado à convergência da cadeia é a divergência tardia. Há relatos na literatura de cadeias aparentemente convergentes que, quando testadas para um número maior de estados, passaram a não convergir, por terem entrado em uma área da distribuição que não havia sido coberta antes. Dessa forma, durante a realização do presente trabalho, todos os resultados foram rodados para uma cadeia com tamanho pelo menos quatro a vinte vezes o número de estados do burn in.

## Desvio padrão

As médias e desvios padrão deste trabalho foram calculadas utilizando as fórmulas clássicas de estatística:

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} X_i}{n} \quad (39)$$

onde  $\bar{X}$  é a média dos resultados obtidos,  $X_i$  é o valor observado e  $n$  é o número de observações. Para o desvio padrão ( $\sigma_n$ ):

$$\sigma_n = \sqrt{\frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^{i=n} (X_i - \bar{X})^2} \quad (40)$$

Cabe salientar que o software utilizado na simulação deste trabalho (Matlab) já conta com as funções média e desvio padrão embutidas (respectivamente *mean* e *std*).

## Distribuição posterior

A distribuição posterior descreve a frequência com que cada estado estimado aparece na cadeia convergida, excluindo o período de *burn in*. Ela será apresentada em forma de histograma, onde a frequência de cada estado estimado é acrescentada à coluna correspondente.

## Estados aceitos

Serão calculados o número de estados aceitos na cadeia de Markov, em termos de porcentagem. Cada nova estimativa aceita aumentará esta porcentagem, ao passo que estimativas rejeitadas mantêm o valor percentual.

## 4. Resultados e Discussão

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos através de simulação computacional. Para os resultados computacionais foram incluídas tabelas com os valores de constantes e parâmetros utilizados. Também foram exploradas comparações com a bibliografia, quando disponível. Além, foi feita uma discussão dos resultados, com ênfase nas características consideradas mais pertinentes.

### 4.1. Resultados do simulador computacional do modelo

Os resultados do simulador computacional que descreve o modelo de adesão na ponta da viga serão apresentados nesta seção. Conforme descrito na seção 3.4, determinados dados de entrada, como parâmetros do adesivo e ordem de grandeza de deslocamentos foram retirados da bibliografia ALBUQUERQUE *et al.* (2015). Também foram utilizados dados da bibliografia ALBUQUERQUE *et al.* (2015) para determinação do perfil característico e ordem de grandeza da curva de deslocamento prescrito.

A Tabela 1 a seguir mostra os dados de entrada retirados de ALBUQUERQUE *et al.* (2015) utilizados para gerar os resultados apresentados nesta seção. Esses valores foram escolhidos de forma que os resultados do simulador fornecessem uma solução elástica.

Tabela 1 – Dados de entrada do simulador do modelo de adesão.

$\bar{w}_t$	1,025
$\bar{b}_T$	3,25
$\bar{c}_T$	$4,9 \cdot 10^{-2}$
$p$	1

Além dos dados acima, foi considerado um deslocamento prescrito crescente no ponto central da viga, cujo gráfico pode ser visto na Figura 5 a seguir:

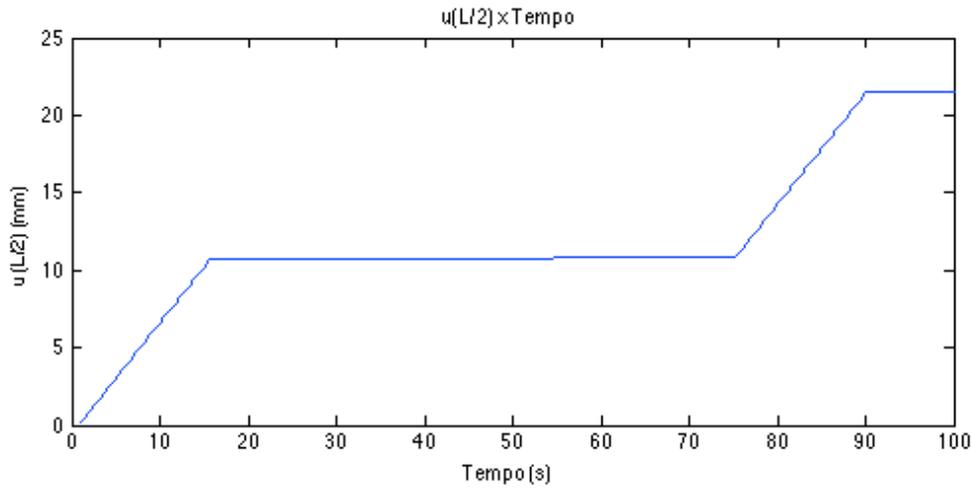


Figura 5 – Gráfico do deslocamento prescrito (mm) no centro da viga em função do tempo (s).

Para os propósitos deste estudo (possivelmente ambiente laboratorial) considerou-se uma viga relativamente pequena, com cerca de 15 cm de comprimento. Desta forma, foi escolhida uma magnitude de deslocamento prescrito pouco acima de 2 cm, garantindo que a viga se mantenha no regime elástico. O deslocamento prescrito é composto por uma função crescente, seguida por um platô, e posterior crescimento, sendo finalizada por um pequeno tempo em que o deslocamento se mantém constante.

O gráfico da intensidade de adesão  $\beta(t)$  em função do tempo, Figura 6, pode ser analisado em conjunto com o gráfico apresentado na Figura 5.

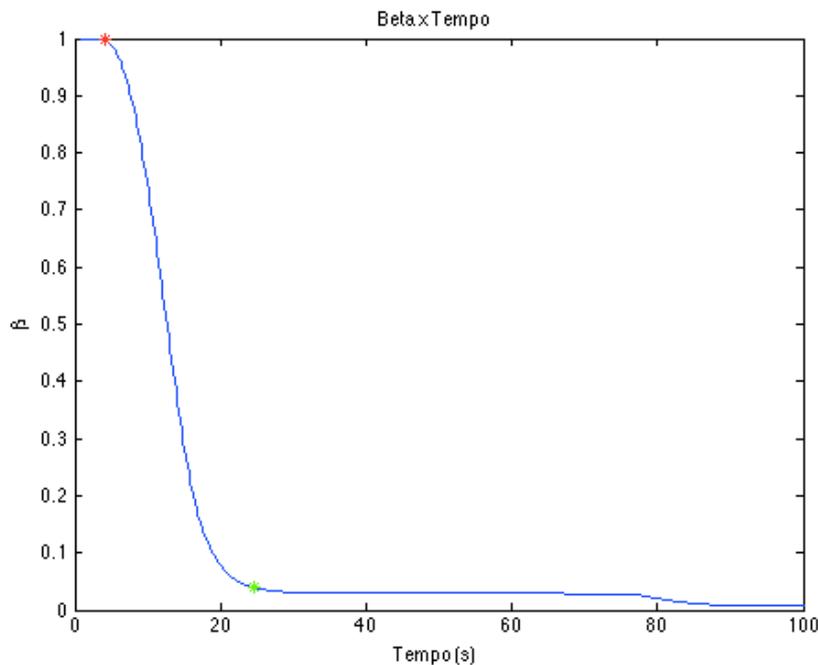


Figura 6 – Valor da variável  $\beta$  em função do tempo (s).

Em cerca de  $t=5s$  o material começa a falhar, com o valor de  $\beta$  saindo de 1 e passando a decrescer, ponto indicado pelo asterisco vermelho em destaque. Observa-se que até o instante  $t=20s$  há um decrescimento relativamente grande da variável de dano  $\beta$ , devido ao deslocamento da extremidade da viga, que causa dano ao material adesivo, ao mesmo tempo que o valor da reação cresce. Ao atingir 20s, como era de se esperar,  $\beta$  se mantém constante devido ao deslocamento prescrito no centro da viga também ser constante. Após cerca de 80s, quando o deslocamento prescrito volta a crescer, voltamos a observar a queda do valor de  $\beta$ , até chegar a virtualmente zero.

O gráfico da reação na ponta da viga em função do deslocamento também na ponta da viga, para os dados de entrada definidos, é apresentado na Figura 7.

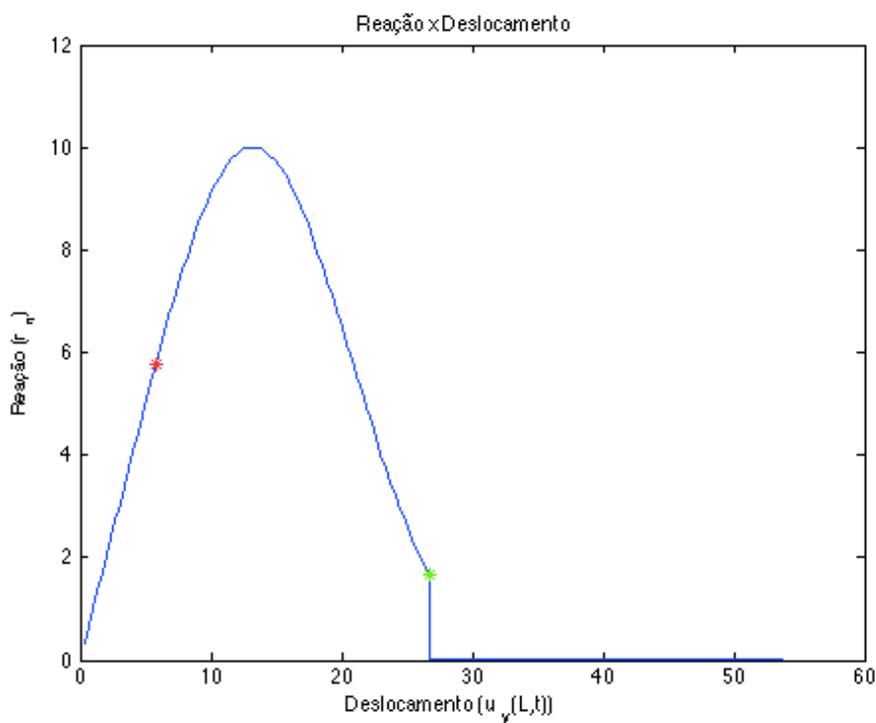


Figura 7 - Gráfico da reação em função do deslocamento na extremidade da viga.

A reação inicial (quando o deslocamento na ponta adesiva da viga é zero) é nula e cresce conforme o deslocamento aumenta. A reação atinge um valor máximo de cerca de 10 unidades e passa a decrescer, momento em que a capacidade de adesão do adesivo simulado é comprometida. Ao chegar em cerca de 27 unidades de deslocamento, podemos observar no gráfico apresentado uma brusca queda da reação, que se torna nula a partir deste ponto. Este fenômeno representa a perda total da capacidade de adesão. Neste ponto a condição de integridade  $\beta$  tende a zero.

Além dos gráficos apresentados nesta seção, também foram gerados os gráficos de deslocamento na ponta da viga em função do tempo, parâmetro  $\beta$  em função do deslocamento e derivada do parâmetro  $\beta$  em função do tempo. Estes podem ser encontrados no Apêndice e fornecem uma análise complementar ao estudo deste problema.

## 4.2. Resultados da Análise de Sensibilidade

O modelo computacional cujos resultados foram abordados na Seção 4.1 gera dois outputs  $\{\bar{r}_n, \bar{u}\}$  que podem ser medidos caso desejemos realizar um procedimento experimental: o deslocamento e a reação na extremidade adesiva da viga. Desta forma, esta seção visa analisar qual desses outputs devemos utilizar como medidas na estimativa dos parâmetros através do método MCMC. Ou seja, vamos determinar qual output é mais sensível a variações nos parâmetros do adesivo.

Conforme mencionado na Seção 3.5.1, foram testados três valores para o incremento  $\varepsilon$  utilizado para a aproximação das derivadas na equação 30. A seguir são apresentados os gráficos da análise de sensibilidade para os dois outputs  $\{\bar{r}_n, \bar{u}\}$  e três parâmetros ( $\{\bar{w}, \bar{c}, \bar{b}\}$ ) em função do tempo, para  $\varepsilon = 10^{-4}$  e para o carregamento apresentado na Figura 5.

Inicialmente vamos analisar o output  $\bar{r}_n$  (reação em  $x = L$ ). A Figura 8 mostra o gráfico dos coeficientes de sensibilidade dos parâmetros  $\bar{c}, \bar{w}$  e  $\bar{b}$  (respectivamente  $J_c, J_w$  e  $J_b$ ) em função do tempo.

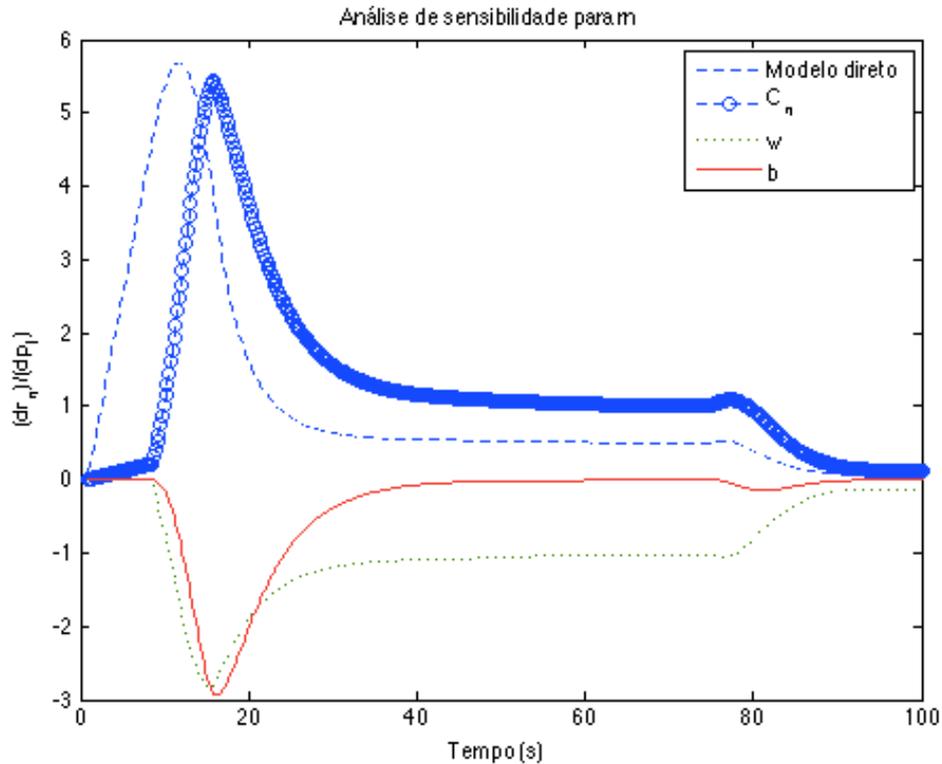


Figura 8 - Coeficientes de sensibilidade para o output output  $\bar{r}_n$ .

O gráfico apresentado na Figura 8 mostra que os parâmetros  $\bar{c}$ ,  $\bar{w}$  e  $\bar{b}$  são estimáveis visto que possuem um modulo significativo em relação ao zero. O parâmetro  $\bar{c}$  possui um pico maior em relação aos outros dois parâmetros, indicando uma possível maior facilidade de estimativa deste. Ao analisarmos o formato do gráfico, observamos que  $\bar{c}$  e  $\bar{b}$  possuem um pequeno grau de dependência linear, indicando que poderemos enfrentar problemas na hora de estimá-los em conjunto.

Em seguida, analisaremos os coeficientes de sensibilidade para o output  $\bar{u}$ , apresentados no gráfico da Figura 9.

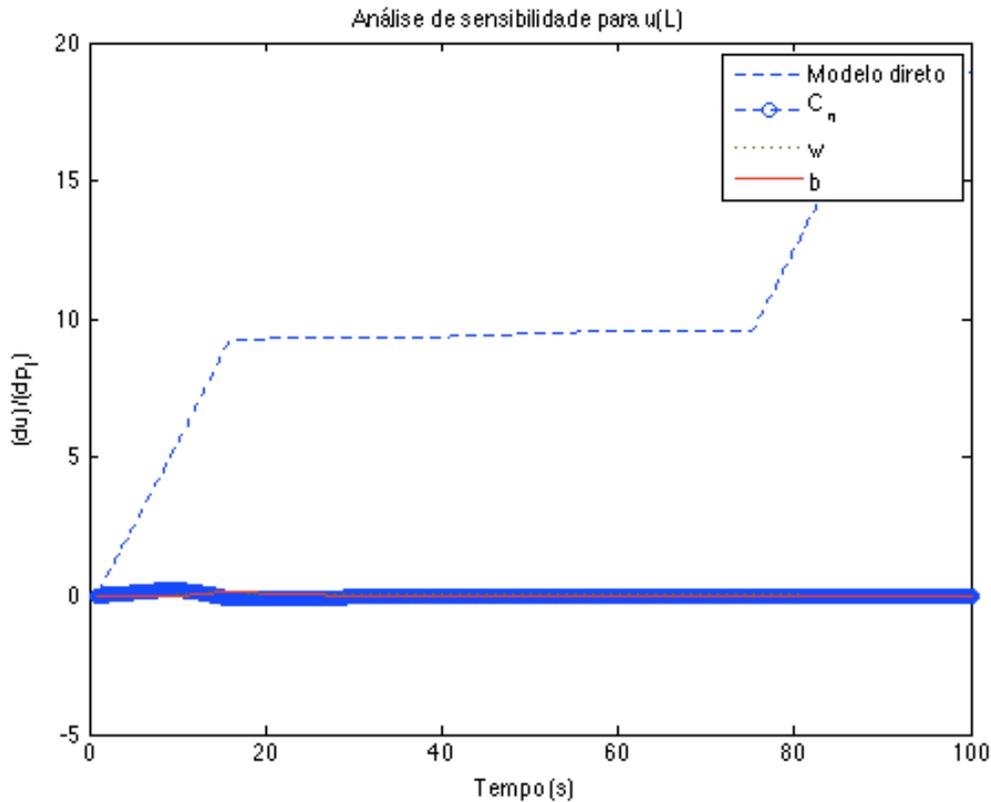


Figura 9 – Coeficientes de sensibilidade para o output  $\bar{u}$ .

Conforme podemos ver, todos os coeficientes de sensibilidade para esse output são praticamente nulos ao longo do tempo, indicando que a estimativa de parâmetros a partir das medidas  $\bar{u}$  é inviável.

Os mesmos gráficos foram plotados para  $\varepsilon = 10^{-7}$  e  $\varepsilon = 10^{-10}$  e podem ser encontrados no Apêndice. Observou-se que não houve diferença significativa no formato da resposta para os diferentes valores de  $\varepsilon$ . Ou seja, a forma e magnitude relativa dos coeficientes de sensibilidade se manteve similar para os diferentes valores de  $\varepsilon$  testados, reforçando os resultados apresentados nesta seção.

### 4.3. Resultados da estimativa de parâmetros

Os dados utilizados para estimativa dos parâmetros  $\bar{c}$ ,  $\bar{w}$  e  $\bar{b}$  foram obtidos do modelo direto. As medidas sintéticas foram simuladas a partir dos resultados de  $\bar{r}_n$ , com desvio padrão das medidas considerado 2% do valor máximo de  $\bar{r}_n$  simulado, para todos os casos apresentados neste trabalho.

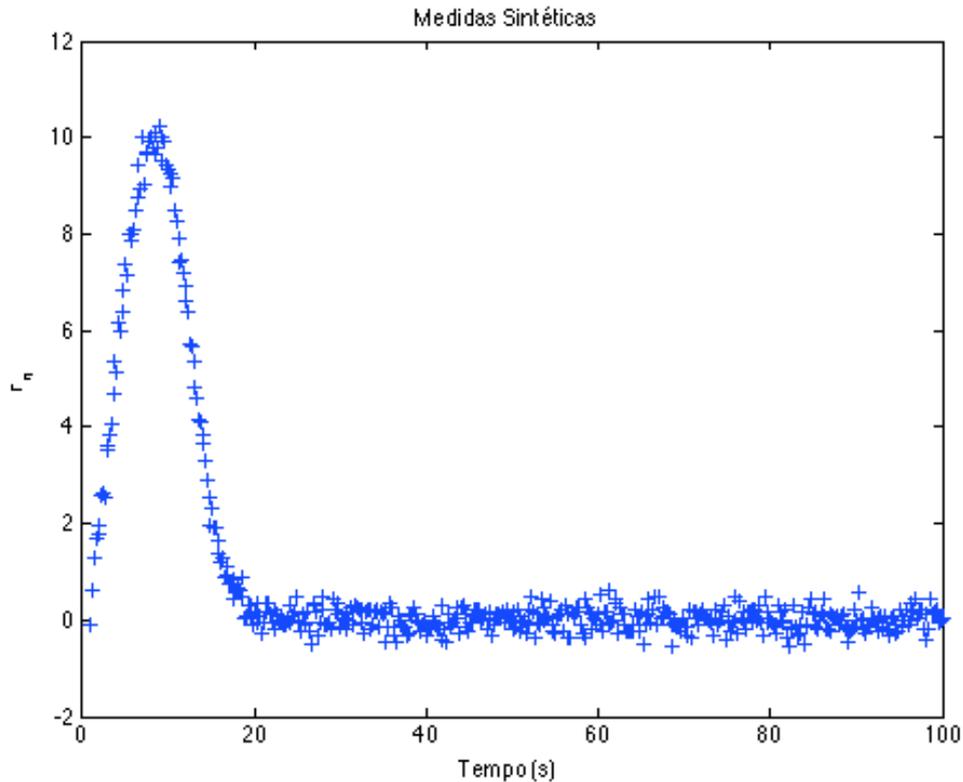


Figura 10 – Medidas sintéticas de  $\bar{r}_n$  para estimativa de parâmetros.

A Figura 10 mostra o gráfico das medidas sintéticas de  $\bar{r}_n$  em função do tempo, variando de 0 a 100 segundos, com uma taxa de aquisição de 5 Hz. Visto o resultado não promissor para os coeficientes de sensibilidade do output  $\bar{u}$ , não foi plotado o gráfico de medidas sintéticas para esta variável.

#### 4.3.1. Estimativa de parâmetros isolados

Nesta seção mostraremos os resultados encontrados para a estimativa dos parâmetros  $\bar{c}$ ,  $\bar{w}$  e  $\bar{b}$  isoladamente. Enquanto um parâmetro era estimado, os outros foram mantidos com os valores constantes da Tabela 1. Todos os resultados foram encontrados considerando-se uma distribuição priori uniforme com suporte  $[5\% \ 700\%] \bar{P}_i$ , onde  $\bar{P}_i$  é o valor de referência do parâmetro estimado. Foram testados diferentes dados de entrada, variando:

- Passo de procura ( $\epsilon$ ).
- Estimativa inicial.

Todas as estimativas foram feitas para uma cadeia com mil estados, que mostrou ser tamanho suficiente para convergência, com grande folga, conforme será mostrado nos gráficos de resultados. Deseja-se recuperar os valores da Tabela 1, referência ALBUQUERQUE *et al.* (2015). O código computacional utilizado para estimativa de cada parâmetro encontra-se anexado no Apêndice, ao final deste trabalho.

### Estimativa de $\bar{w}$

Inicialmente, estimou-se o valor de  $\bar{w}$ . Foram simulados oito casos, cujos principais dados de entrada e resultados foram resumidos na Tabela 2 a seguir:

Tabela 2– dados de entrada e resultados para  $\bar{w}$ .

Caso	Estimativa Inicial	$\epsilon$	Média	Desvio Padrão	Taxa de Aceitação
1	200% de $\bar{w}_T$	0,3	1,0238	0,06089	25%
2	500% de $\bar{w}_T$	0,3	1,0127	0,05921	24%
3	600% de $\bar{w}_T$	0,3	1,0090	0,05256	25%
4	5% de $\bar{w}_T$	0,3	1,0300	0,06346	26%
5	200% de $\bar{w}_T$	0,05	1,0294	0,01811	6%
6	200% de $\bar{w}_T$	0,1	1,0398	0,01798	6%
7	200% de $\bar{w}_T$	0,5	0,9742	0,23471	43%
8	200% de $\bar{w}_T$	0,9	0,9924	0,21074	45%

Observando a Tabela 2, vemos alguns fenômenos interessantes. Com relação ao passo de procura  $\epsilon$ , os casos 5 a 8 nos fornecem uma boa visão do que ocorre com sua variação. Um baixo passo de procura (caso 5,  $\epsilon = 0,05$ ) resulta em uma média  $\bar{w} = 1,0294$  que se distancia do valor de referência ( $\bar{w}_t = 1,025$ ). Os valores estimados tendem a se concentrar ao redor do valor de referência: observando o histograma da distribuição posterior, apresentado na Figura 11, vemos a falta de dispersão e alta frequência de ocorrência dos valores que circundam o valor de referência.

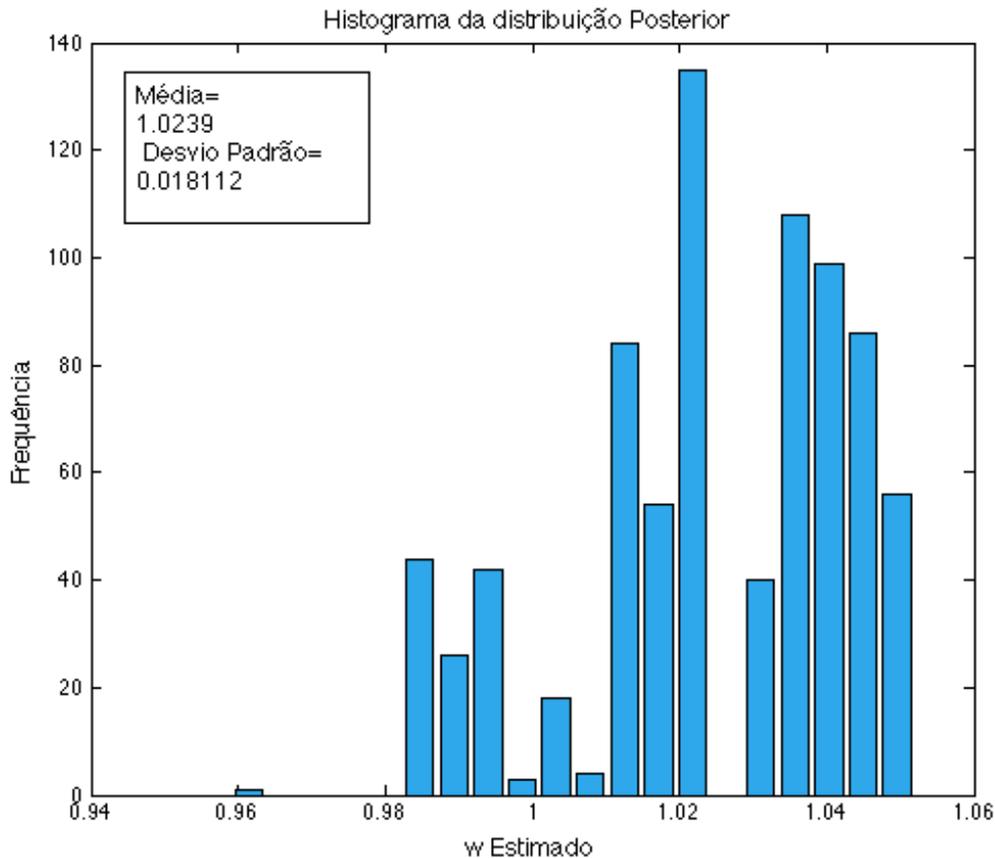


Figura 11 – Histograma da distribuição posterior de  $\bar{w}$  para o caso 5, onde 1,025 é o valor de referência para  $\bar{w}$ .

Também podemos observar a baixa taxa de aceitação de novos valores estimados, indicando que uma vez que a cadeia converge para um valor próximo da referência, o código tende a manter estes valores. Além, há uma diminuição no valor do desvio padrão devido à baixa dispersão dos valores estimados.

O caso 8 nos fornece resultados para um valor de passo de procura igual à 0,9, relativamente grande. Sua média é bem distante do valor de referência, possuindo um desvio padrão de 0,21074, o segundo maior entre todos os casos testados, indicando a grande dispersão de valores estimados. De fato, observando o histograma de sua distribuição posterior, representado na Figura 12 podemos ver que, ao contrário do caso 5, este assume um formato gaussiano.

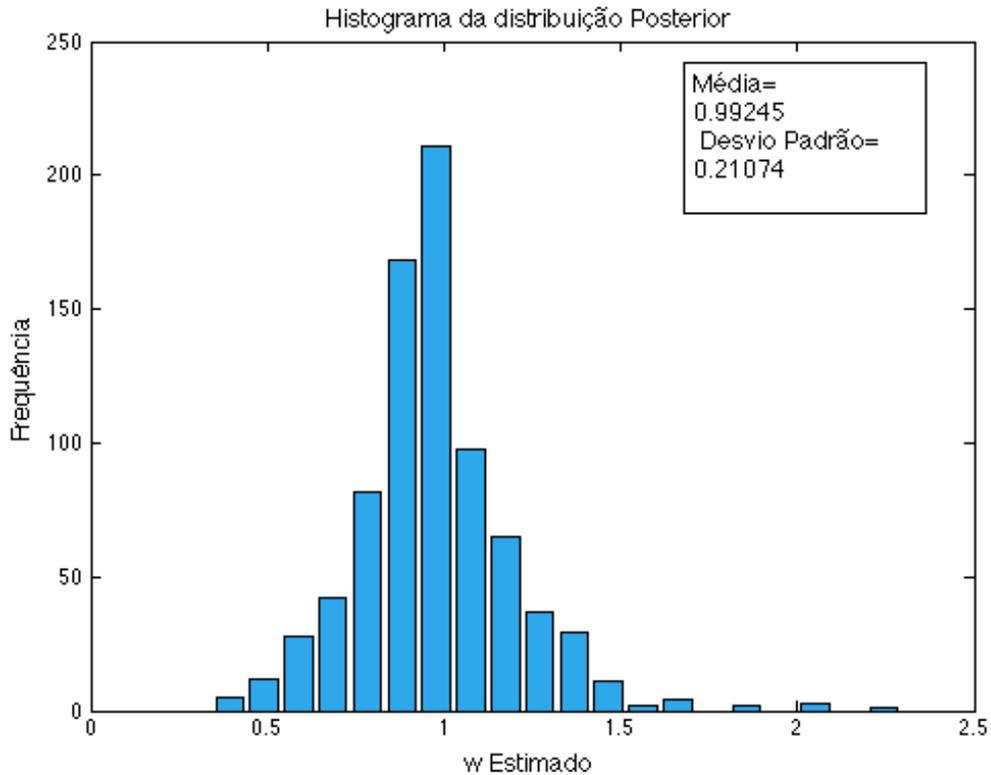


Figura 12 - Histograma da distribuição posterior de  $\bar{w}$  para o caso 8.

Ao mesmo tempo, a dispersão dos valores também se reflete no gráfico da estimativa versus o número de estados: este acaba assumindo uma forma com muito ruído. Alguns valores estimados, inclusive, são maiores do que a estimativa inicial, sendo difícil verificar a convergência do valor. A Figura 13 ilustra esse fato, comparando a cadeia resultante no caso 8 com a cadeia encontrada no caso 2.

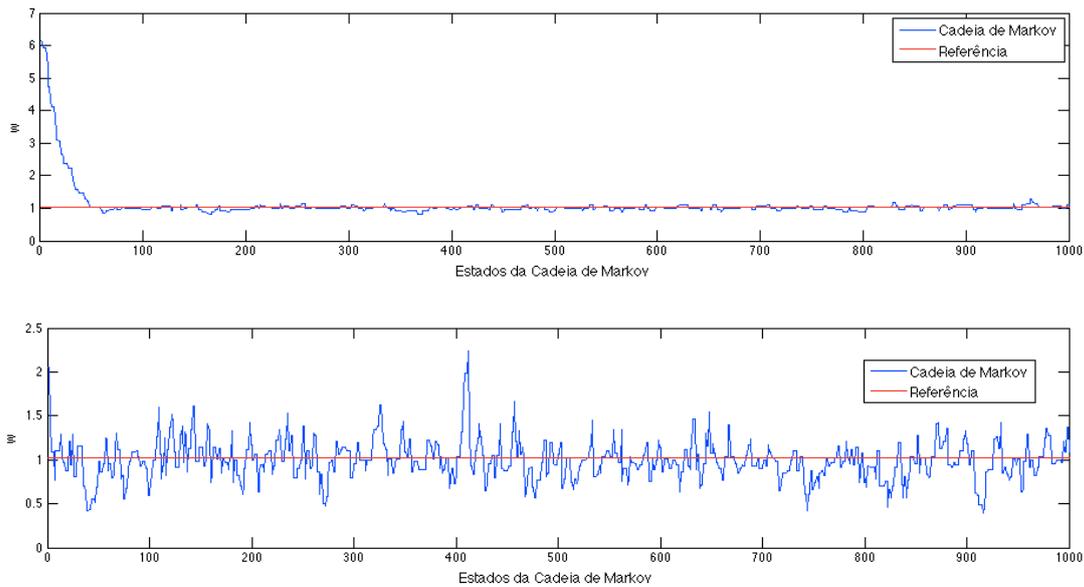


Figura 13 – Resultados da Cadeia de Markov para os casos 2 (acima) e 8 (abaixo).

Observamos também a rápida convergência do caso 2, com cerca de 50 estados no período de burn in. Os gráficos da estimativa dos casos restantes pode ser encontrado no Apêndice.

Também observamos um aumento significativo da taxa de novos estados aceitos: o algoritmo propõe novos estados que continuam a ser aceitos pelo código a fim de obter uma melhor estimativa.

No que tange o valor inicial utilizado para estimativa, os casos 1, 2, 3 e 4 foram rodados para valores forçados de 200%, 500%, 600% e 5% do valor de referência  $\bar{w}_t$ . Em termos de desvio padrão e taxa de aceitação, todos os três casos apresentam resultados similares, na casa dos 0,06 e 25%, respectivamente, mostrando que o valor inicial aparentemente possui pouca influência sobre a dispersão de valores estimados. Entretanto, os casos 3 e 4 apresentam uma média de 1,0090 e 1,0300, mais distantes do valor de referência que os casos 1 e 2. Este fato mostra que o valores iniciais muito distantes da referência podem ter influência significativa sobre o valor estimado do parâmetro, apesar da pouca influência sobre a dispersão. Além disso, não notou-se diferença significativa no período de burn in, para os casos 1 a 4.

### Estimativa de $\bar{b}$

Os casos apresentados na Tabela 3 foram rodados para estimativa do parâmetro  $\bar{b}$ . Nesta tabela podemos ver os resultados de média, desvio padrão e taxa de aceitação.

Tabela 3 – dados de entrada e resultados para  $\bar{b}$ .

Caso	Estimativa Inicial	$\epsilon$	Média	Desvio Padrão	Taxa de Aceitação
1	300% de $\bar{b}_T$	0,3	3,2674	0,21819	43%
2	500% de $\bar{b}_T$	0,3	3,2503	0,19655	42%
3	700% de $\bar{b}_T$	0,3	3,2656	0,21096	45%
4	5% de $\bar{b}_T$	0,3	3,2190	0,20541	44%
5	300% de $\bar{b}_T$	0,05	3,2481	0,02770	16%
6	300% de $\bar{b}_T$	0,1	3,2547	0,06176	26%
7	300% de $\bar{b}_T$	0,5	3,2230	0,35784	47%
8	300% de $\bar{b}_T$	0,9	3,1521	0,6055	50%

Observamos que, assim como nos resultados de  $\bar{w}$ , uma variação na estimativa inicial do parâmetro (casos 1 a 4) não altera significativamente a taxa de aceitação. Os casos 1, 2 e 3, que estimam o valor inicial em 300%, 500% e 700% do valor de referência, não demonstram variação significativa na média (3,2674, 3,2503 e 3,2656, respectivamente). Além, estes valores se mantêm muito próximos do valor de referência, ressaltando a convergência de cada cadeia. Desta forma é prudente concluir que o método aplicado ao problema tende a ser bem sucedido mesmo quando as informações que temos sobre o material testado são escassas. É interessante notar também que a estimativa inicial tem, aparentemente, pouca influencia sobre a dispersão da cadeia: o desvio padrão dos casos 1 a 4 varia pouco em comparação com o restante dos casos testados. Entretanto, vamos observar os histogramas da distribuição posterior para estes casos. A figura 14 mostra os histogramas dos casos 1 a 4.

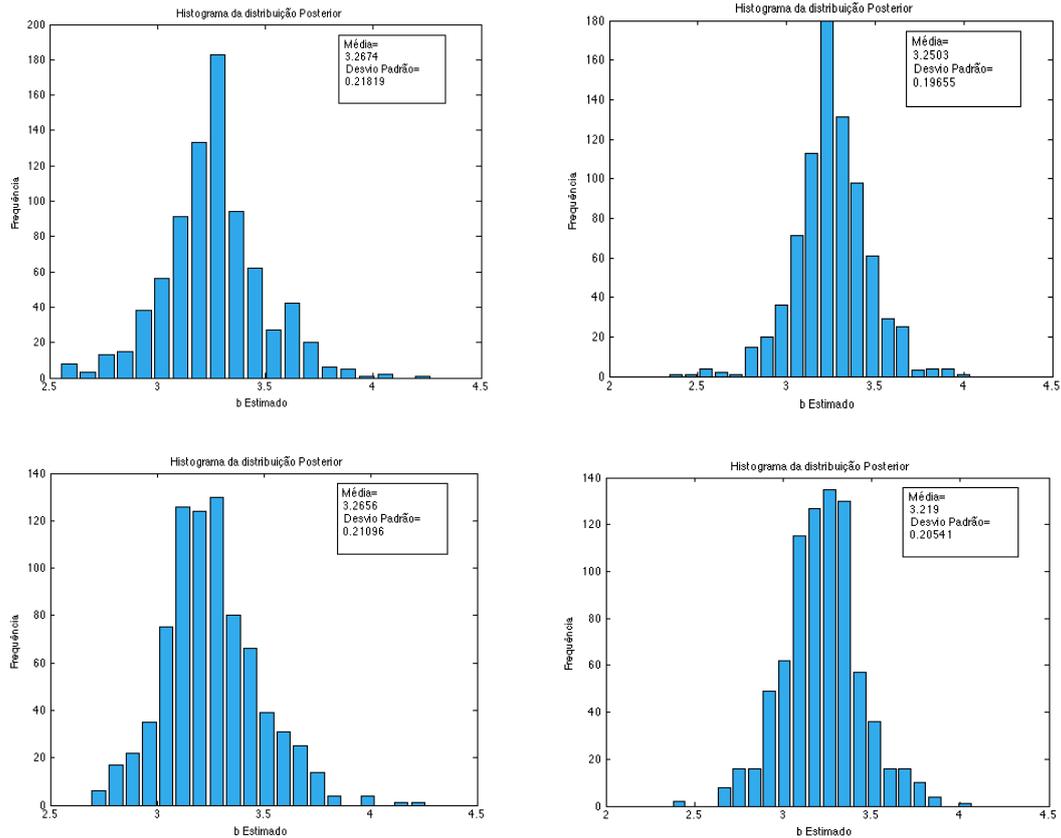


Figura 14 – Histogramas da distribuição posterior dos casos 1 a 4, para estimativa de  $\bar{b}$ , onde 3,25 é o valor de referência para  $\bar{b}$ .

Observamos claramente a semelhança de forma entre os quatro gráficos. Entretanto, para valores iniciais muito distantes do valor de referência (casos 3 e 4), a dispersão é afetada, com mais valores da cadeia nas vizinhanças da referência, ao passo que valores mais próximo possuem um pico de frequência próximo ao valor de referência. Este fenômeno não pode ser observado apenas a partir dos valores encontrados na média de cada cadeia.

Os casos 5, 6, 7 e 8 apresentam os resultados para valores crescentes de passo de procura. Podemos observar que, ao aumentar o passo, vamos obtendo médias mais distantes do valor de referência: para  $\epsilon = 0,05$  encontramos uma média de 3,2481, enquanto para  $\epsilon = 0,9$  a média encontrada foi 3,1521. Observamos também um aumento progressivo da taxa de aceitação conforme aumentamos o valor do passo de procura. Esta saltou de 16% em  $\epsilon = 0,05$  para 44% em  $\epsilon = 0,9$ . Assim como observado nos resultados da estimativa de  $\bar{w}$ , um valor muito alto para o passo de procura gera uma média mais distante da referência e um resultado com grande dispersão de valores.

### Estimativa de $\bar{c}$

Apresentamos na Tabela 4 o casos gerados para estimativa do parâmetro  $\bar{c}$ , similar às Tabelas 3 e 2.

Tabela 4 – dados de entrada e resultados para  $\bar{c}$ .

Caso	Estimativa Inicial	$\epsilon$	Média	Desvio Padrão	Taxa de Aceitação
1	200% de $\bar{c}_T$	0,3	0,04953	0,00354	45%
2	500% de $\bar{c}_T$	0,3	0,04881	0,00308	45%
3	700% de $\bar{c}_T$	0,3	0,04882	0,00347	44%
4	10% de $\bar{c}_T$	0,3	0,04896	0,00348	47%
5	130% de $\bar{c}_T$	0,05	0,04892	0,00051	14%
6	130% de $\bar{c}_T$	0,1	0,04900	0,00092	30%
7	130% de $\bar{c}_T$	0,5	0,04991	0,00598	47%
8	130% de $\bar{c}_T$	0,9	0,05110	0,00998	48%

Assim como observado nos casos estimados para  $\bar{b}$  e  $\bar{w}$ , o valor do passo de procura afetou diretamente a média encontrada. Os casos 5 a 8 fornecem os resultados para passos de procura crescentes e iguais a 0,05, 0,1, 0,5 e 0,9. Observa-se que o caso 6 resultou em uma média exatamente igual ao valor de referência, 0,04900, enquanto os outros três casos apresentaram valores com diferença maior, conforme aumentamos ou diminuimos o passo de procura. Isso indica que deve existir um valor ótimo para a variável  $w$ . Além, pode-se notar novamente que os valores para o desvio padrão e a taxa de aceitação crescem conforme aumentamos o passo de procura, indo de 0,00051 a 0,00998 e 14% a 48%, respectivamente, ocorrência também observada nos resultados para  $\bar{b}$  e  $\bar{w}$ .

Com relação à estimativa inicial do parâmetro, foram testados quatro casos, com 200%, 500%, 700% e 10% do valor de referência. As médias encontradas foram muito próximas ao valor de referência, sendo 0,04953, 0,04881, 0,04882 e 0,04896, respectivamente. É interessante notar que o valor da média encontrada para o caso 1 é a mais distante do valor de referência entre todos os outros três casos. Também, o caso 4 apresenta uma média mais próxima da referência do que o caso 3, apesar de possuir uma estimativa inicial mais distante. Desta forma, não se observa um padrão entre estimativa inicial e resultados da média para  $\bar{c}$ . Esse fato pode ter duas explicativas. A

primeira consiste no fato de que o método utilizado para estimativa dos parâmetros é baseado em análise estatística, desta forma os resultados podem variar um pouco para cada vez que o código é rodado. A segunda, menos provável, é a possibilidade de, para o caso de  $\bar{c}$ , os valores iniciais utilizados não afetarem os resultados da média de uma forma observável. A Figura 15 mostra o gráfico da estimativa do parâmetro em relação ao número de estados para o caso 3.

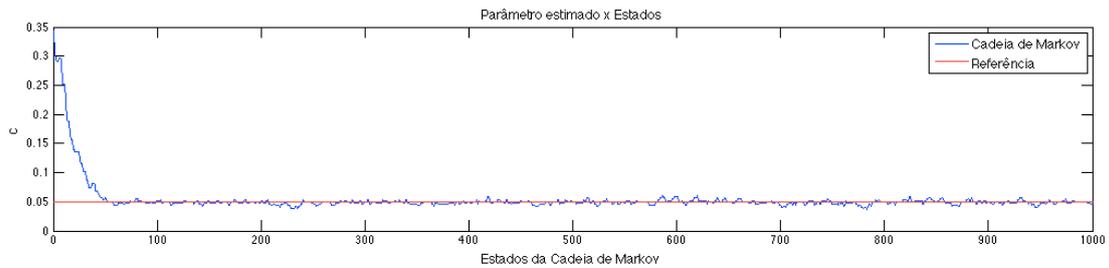


Figura 15 – Estimativa do parâmetro  $\bar{c}$  para o caso 3.

Observamos que, mesmo para valores iniciais muito distantes do valor de referência, o método utilizado (MCMC) apresenta uma rápida convergência, com cerca de 50 estados para o período de burn in, mesmo fato observado anteriormente na Figura 13. O mesmo fato se repete ao longo de todos os casos testados, conforme pode ser visto nos gráficos apresentados no Apêndice.

Com relação ao desvio padrão e taxa de aceitação, os valores se mantiveram próximo independente do caso observado, variando de 0,00354 a 0,00308 e 45% a 47%, respectivamente.

## 5. Conclusões

Neste projeto utilizamos um modelo direto de adesão para estimativa de parâmetros de um adesivo através do método de Monte Carlo com Cadeia de Markov. Foram estimados os parâmetros adimensionais  $\bar{b}$ ,  $\bar{c}$  e  $\bar{w}$  separadamente, para diferentes valores de passo de procura  $\epsilon$  e estimativa inicial. Foi eliminada, então, a necessidade do uso de correlações empíricas para os parâmetros.

O modelo direto proposto utilizou dados de parâmetros retirados da bibliografia e seus resultados, como reação e deslocamento na extremidade da viga, além de determinação da intensidade de adesão  $\beta$ , foram satisfatórios quando comparados aos da bibliografia indicada.

O código computacional do método de Monte Carlo com Cadeia de Markov foi de fácil implementação, entretanto com alto custo de tempo computacional.

Em todos os casos, a informação a priori foi considerada bastante abrangente (distribuição uniforme com suporte entre 5% e 700% do valor de referência do parâmetro estimado. Valores de passo de procura muito grandes geraram, em comparação com valores mais baixos, resultados levemente divergentes do parâmetro estimado. Foi observado que a maior influência do passo de procura é na dispersão da cadeia convergida.

Variações da estimativa inicial afetaram a média dos resultados finais, mas tiveram pouca influência sobre os valores de taxa de aceitação e desvio padrão. Recomendamos aumentar o número de estados da cadeia para verificar de forma mais completa a convergência do valor. No geral, para todos os casos testados, a cadeia convergiu, independente do valor inicial adotado. Mesmo para valores muito distantes, o método conseguiu recuperar os valores de referência, evidenciando que mesmo com pouca informação a priori, conseguimos estimar com sucesso o valor do parâmetro. Este fato corrobora como aplicação de métodos inversos a problemas de engenharia é uma ferramenta poderosa.

Para todos os casos testados neste trabalho, a cadeia convergiu para um valor muito próximo ao da referência, mesmo para valores de passo de procura e estimativa inicial inconvenientes.

Conforme exposto na revisão bibliográfica, existem poucas publicações sobre métodos inversos na área de caracterização de adesivos. Este trabalho abre portas para uma série de novas formas de abordar esse tema, dado o sucesso dos resultados obtidos.

### **5.1. Sugestões para trabalhos futuros**

Como trabalho futuro, sugerimos a realização de procedimento experimental representativo do modelo direto apresentado neste trabalho. A partir de coleta dos valores de  $r_n$ , pode-se obter a estimativa dos parâmetros do adesivo testado.

Também sugerimos a estimativa de um valor ótimo de passo de procura  $\epsilon$ , conforme foi observado nos resultados apresentados através de outros algoritmos mais eficazes, como o MCMC Adaptativo, Delay Rejection e DRAM (Delay Rejection Adaptative Metropolis).

Por fim, sugerimos a estimativa de parâmetros em conjunto e solução de possíveis problemas de mínimos locais que possam vir a surgir ao longo do trabalho.

## 6. Referências Bibliográficas

ALBUQUERQUE, E.B., CASTELLO, D.A., BORGES, L.A., 2015, “Calibration of Adhesion Models Based on Bayesian Inference”. *Inverse Problems in Science and Engineering*, DOI 10.1080/17415977.2015.1077444.

A.N.P., 2009, “Biocombustíveis na Matriz Energética Brasileira”. *X Seminário Nacional de Biocombustíveis no Brasil*, Brasília, 6 Agosto.

BAYES, T.R., 1763, “Essay towards solving a problem in the doctrine of chances,” *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.*, v. 53, pp. 370–418, Reimpresson em *Biometrika*, v. 45, 1958.

BECK, J.V., ARNOLD, K.J., *Parameter Estimation in Engineering and Science*, Wiley-Interscience , Nova York, 1977.

BERNARDO, J. M., SMITH A. F. M., *Bayesian Theory*, 2 ed. Nova York, Wiley, 1998.

CHABOCHE, J.L, GIRARD, R., LEVASSEUR, P., 1997, “The Interface Bonding Models”. *International Journal of Damage Mechanics*, v. 6, pp. 220-257.

CHABOCHE, J.L., GIRARD, R., LEVASSEUR, P., 1997, “Numerical analysis of composite systems by using interphase / interface models”, *Computational Mechanics*, v. 20, pp. 3 – 11.

CHEN, Z., *Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters and Beyond*. In: Technical Report, Adaptive Systems Laboratory, MacMaster University, Ontario, 2003.

CHIN, W.H., WARD, D.B., CONSTANTINIDES, A.G., 2002, “Semi- blind MIMO channel tracking using auxiliary particle filtering”. In: *Proceedings GLOBECOM*.

CRANDALL, S.H., DAHL, N.C., LARDNER, T.J., *An Introduction to the Mechanics of Solids*. 2 ed McGraw-Hill Book Company, 1979.

CYR, N., RITCHIE, R., 1989, “Estimating the adhesive quality of lignins for internal bond strength”. In: *Lignin: properties and materials*. Washington, DC: ACS; [Chapter 28].

DOHERTY, W.O.S., MOUSAVIOUN, P., FELLOWS, C.M., 2011, “Value-adding to cellulosic ethanol: lignin polymers”. *Industrial Crops and Products*, 33:259–76.

ESTUMANO, D.C., HAMILTON, F.C., COLAÇO, M.J., 2014, et al., “Bayesian Estimate of Mass Fraction of Burned Fuel in Internal Combustion Engines Using Pressure Measurements”. *4<sup>th</sup> International Conference on Engineering Optimization*, 5651, Lisboa, Portugal, 8-11 Setembro.

FORSS, K., FUHRMANN, A., 1979. “Finnish plywood, particleboard and fibreboard made with a lignin-base adhesive”. *Forest Products Journal*, v. 29, n. 7, pp. 25-29.

GHAFFAR, S.H., FAN, M., 2014, “Lignin in straw and its applications as an adhesive”. *International journal of Adhesion & Adhesives*, v. 48, pp. 92-101.

HAMILTON, F.C., COLAÇO, M.J., CARVALHO, R.N., et al., 2014, “Heat Transfer Coefficient Estimation of an Internal Combustion Engine Using Particle Filters”. *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 22, n. 3(Abril), pp. 483-506.

HAMMERSLEY, J.M., HANSCOMB, D.C.. *Monte Carlo Methods*, Chapman & Hall, 1964.

HIGUCHI, T., 1990, “Lignin biochemistry: biosynthesis and biodegradation.” *Wood Science and Technology* 24:23–63.

HIRO-KUNI, O., KENICHI, S., 1989, “Wood adhesives from phenolysis lignin”. In: Glasser W, Sarkanen S, editors. Lignin: properties and materials. Washington, DC: ACS; (Chapter 25).

HO, Y.C., LEE, R.C.K., 1964, “A Bayesian approach to problems in stochastic estimation and control,” *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 9, n. 4 (Outubro), pp. 333–339.

HUTCHINSON, J.W., JENSEN, H.K., 1990, “Models of fiber debonding and pull-out in brittle composites with friction”, *Mechanics of Materials*, v. 9, n.2 (Setembro), pp. 139-163.

JÖNSSON, A., WALLBERG, O., 2009. “Cost estimates of kraft lignin recovery by ultrafiltration”. *Desalination*, n. 237, pp. 254-267.

KAIPIO, J.P., FOX, C., 2011, “The Bayesian Framework for Inverse Problems in Heat Transfer”. *Heat Transfer Engineering*, v. 32, n. 9(Out.), pp. 718-753.

KAIPIO, J.P., SOMERSALO, E., *Computational and Statistical Methods for Inverse Problems*. 1 ed., Springer, Berlin, 2004.

KEAT, W.D., LARSON, M.C., VERGES, M.A., 1998, “Inverse Method of Identification for three-dimensional subsurface cracks in a half-space.

KHAN, M.A., ASHRAF, S.M., MALHOTRA, V.P., 2004, “Development and characterization of a wood adhesive using bagasse lignin”. *International Journal of Adhesion and Adhesives*, 24:485–93.

KIM, S., DALE, B.E., 2004, “Global potential bioethanol production from wasted crops and crop residues”. *Biomass and Bioenergy*; v. 26, n.4 (Abril), pp. 361-75.

KIRKMAN, A., GRATZL, J., EDWARDS, L., 1986. “Kraft lignin recovery by ultrafiltration: economic feasibility and impact on the kraft recovery system”. *Tappi Journal*, n. 69, pp. 110-114.

KWOK, C., FOX, D., MEILA, M., “Real-time particle filter,” in Adv. Neural Inform.

Process. Syst. 15, Cambridge, MA: MIT Press, 2003.

LEGUILLON, D., 1994, “Un exemple d’interaction singularité-couche limite pour la modélisation de la fracture dans les composites”, *C.R. Acad. Sci. Paris*, v. 319, n. 2, pp. 161 – 166.

LEWIS, N., LANTZY, T., BRANHM, S., “Lignin in adhesives: introduction and historical perspective”. In: Hemingway R, Conner A, editors. Adhesives from renewable resources. Oxford: Oxford University Press; 1989. P. 13-26.

LIN, S., DENCE, C.. *Methods in lignin chemistry*. Heidelberg: Springer, 1992.

LIN, T.T., YAU, S.S., 1967, “Bayesian approach to the optimization of adaptive systems”, *IEEE Transactions on Systems Science Cybernetics*, v. 3, n. 2, pp. 77–85.

MA, Y., ZHAO, X., CHEN, X., WANG, Z., 2011. “An approach to improve the application of acid-insoluble lignin from rice hull in phenol-formaldehyde resin”. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, v. 377, n. 1-3 pp. 284-289.

MARSHALL, D.B., 1984, “An indentation method for measuring matrix fiber frictional stresses in ceramic composites”. *J. Am. Soc.* 67(12) C259-C260.

MELLINGS, S., ALIABADI, M., 1993, “Crack identification using inverse analysis”. In: Brebia, C., Renics, J., *Boundary Elements XV Vol 2*, pp. 261-273.

METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A.W., ROSENBLUTH M.N., TELLER, A.H., TELLER, E., 1953, “Equations of state calculations by fast computing machines,” *Journal Chemical Physics*, v. 21, pp. 1087–1091.

METROPOLIS, N., ULAM, S., 1949, “The Monte Carlo method,” *Journal of the American Statistical Association*, v. 44, pp. 335–341.

ORLANDE, H.R.B., *The Use of Techniques within the Bayesian Framework of Statistics for the Solution of Inverse Problems*. In: Thermal Measurements and Inverse Techniques, Metti 6 Advanced School, Biarritz, 2015.

ÖZISIK, M.N., ORLANDE, H.R.B., *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. 1 ed, CRC Press, 2000.

PARK, Y., DOHERY, W.O.S., HALLEY, P.J., 2008, “Developing lignin-based resin coating and composites”, *Industrial Crops and Products*, v.27, n. 2, pp. 163-167.

RALPH, J., LUNDQUIST, K., BRUNOW, G., LU, F., KIM, H., SCHATZ P., et al., 2004, “Lignins: natural polymers from oxidative coupling of 4-hydroxyphenyl propanoids”. *Phytochemistry Reviews*, v. 3, n.1, pp. 29-60.

RAOUS, M.L., CANGÉMI, M., COCOU, 1999, “A consistent model coupling adhesion, friction and unilateral contact”. *Computational Methods Applied to Mechanical Engineering*, v.177, pp. 383-399.

SARKANEN, K., LUDWIG C.,1972, “Lignins: occurrence, formation, structure and reactions”. *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Letters*, v. 10, n. 3 (Março), pp. 228-230.

SAUER, R.A., 2016, “A Survey of Computational Models for Adhesion”, *The Journal of Adhesion*, v. 92, n. 2, pp. 81-120.

SPRAGINS, J., 1965, “A note on the iterative application of Bayes’ rule”. *IEEE Transactions on Information Theory*, v. 11, n. 4, pp. 544–549.

STEWART, D., 2008, “Lignin as a base material for material applications: chemistry, applications and economics”. *Industrial Crops and Products*, v. 27, n. 2 (Março), pp. 202-207.

STUPKIEWICZ, S., 1996, “Fiber Sliding Model accounting for interfacial micro-dilatancy”, *Mechanics of Materials*, v. 22, pp. 65-84.

SUN R., *Cereal straw as a resource for sustainable biomaterials and biofuels*, 1 ed. Amsterdam, Elsevier, 2010.

WIDSTEN, P., KANDELBAIER, A., 2008, “Adhesion improvement of lignocellulosic products by enzymatic pre-treatment”. *Biotechnology Advances*, v. 26, pp. 379-386.

YSBRANDY, R., SANDERSON, R., GERISCHER, G., 1992, “Adhesives from

autohydrolysis bagasse lignin, a renewable resource – Part II. DSC thermal analysis of novolac resins”. *Holzforschung*, v. 46, n.3 pp. 253-256.

ZHANG, W., MA, Y., XU, Y., WANG, C., CHU, F., 2013, “Lignocellulosic ethanol residue-based lignin-phenol-phormaldehyde”. *International journal of Adhesion & Adhesives*, v. 40 (Janeiro), pp. 11-18.

# APÊNDICE

## A. Resultados do Simulador Computacional do Modelo

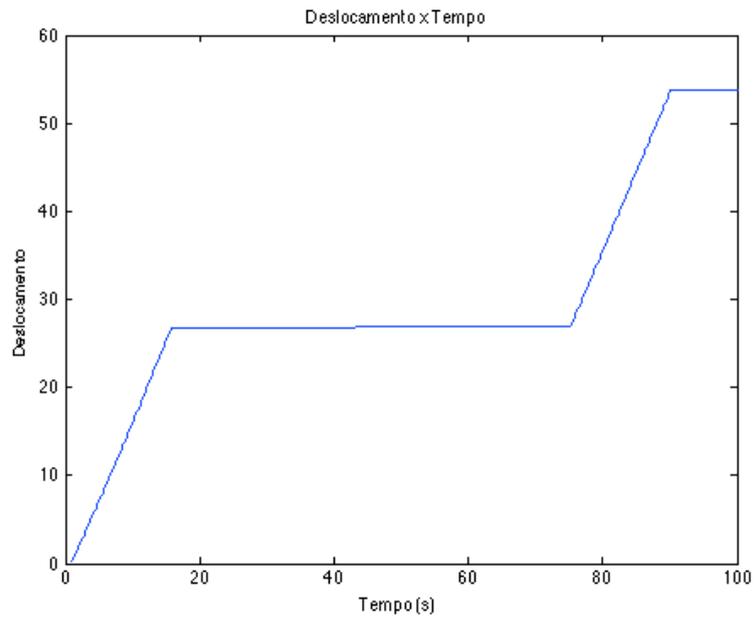


Figura 1 – Deslocamento da extremidade adesiva da viga em função do tempo.

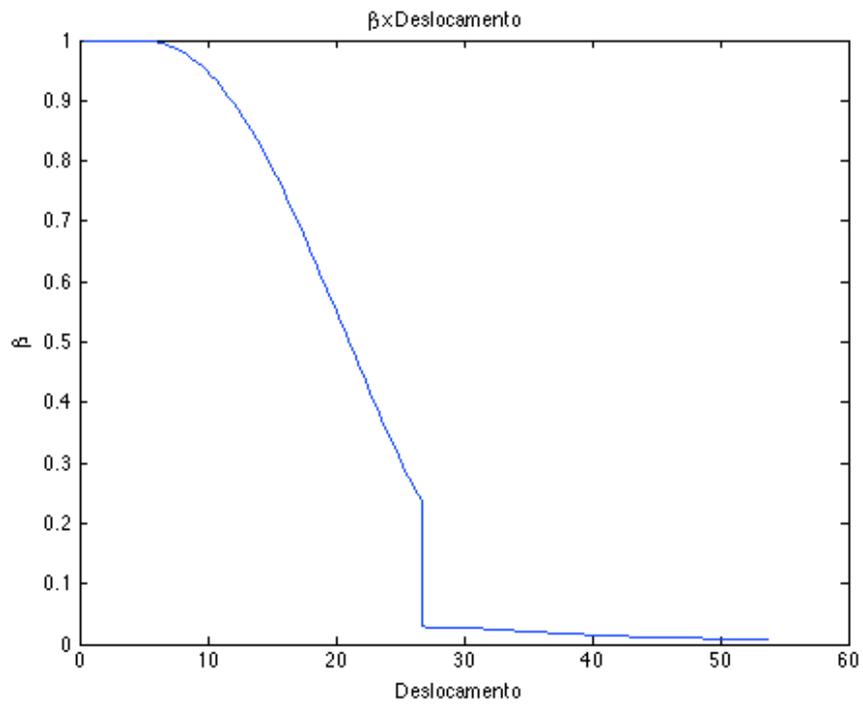


Figura 2 –  $\beta$  em função do deslocamento na extremidade adesiva da viga.

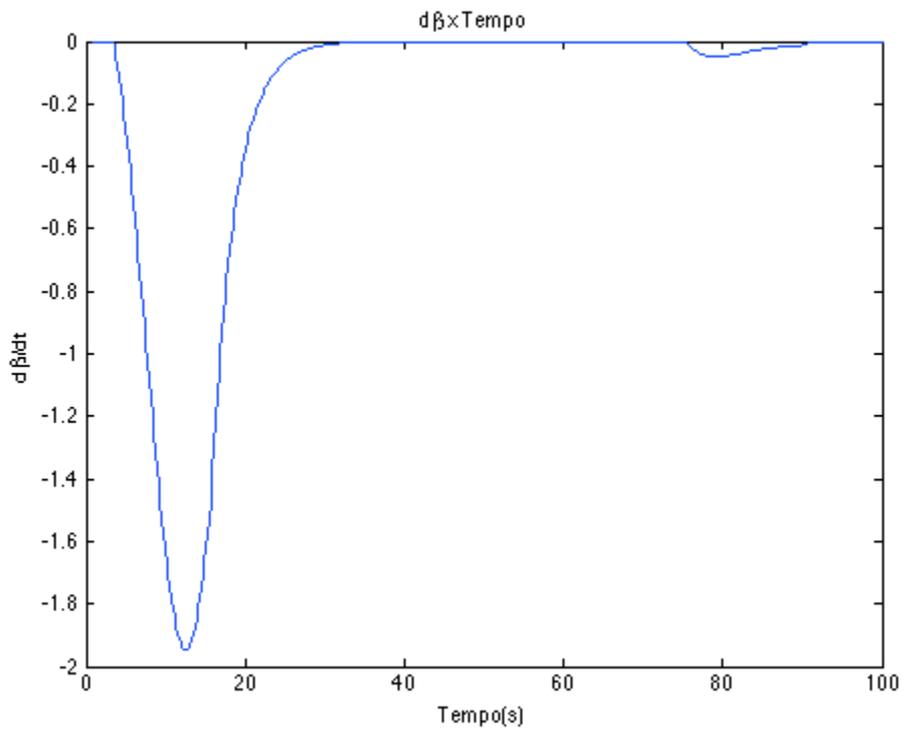


Figura 3 – Derivada de  $\beta$  em função do tempo.

## B. Resultados da análise de sensibilidade

Para  $\varepsilon = 10^{-7}$

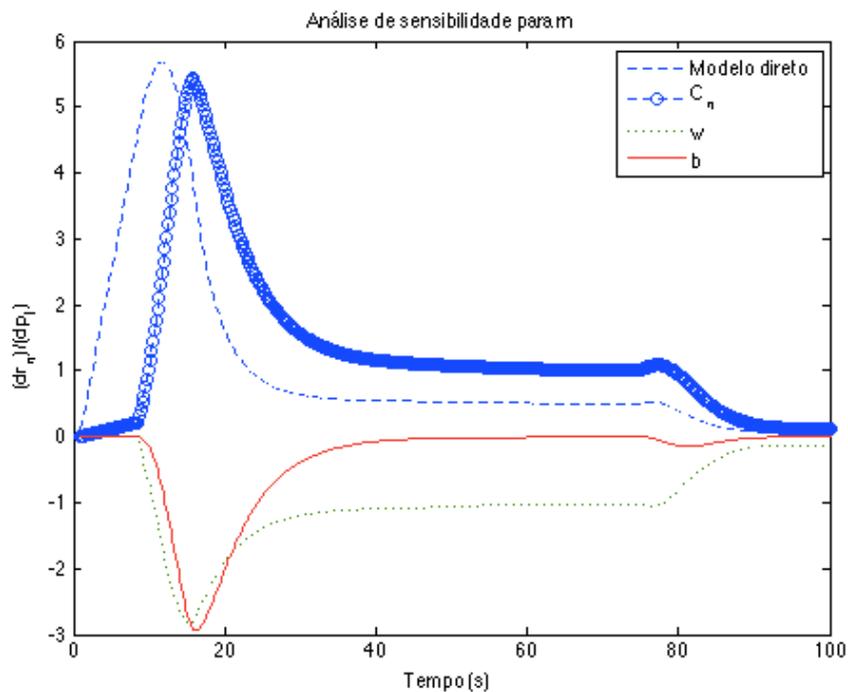


Figura 4 – Análise de sensibilidade de  $\bar{r}_n$  para  $\varepsilon = 10^{-7}$ .

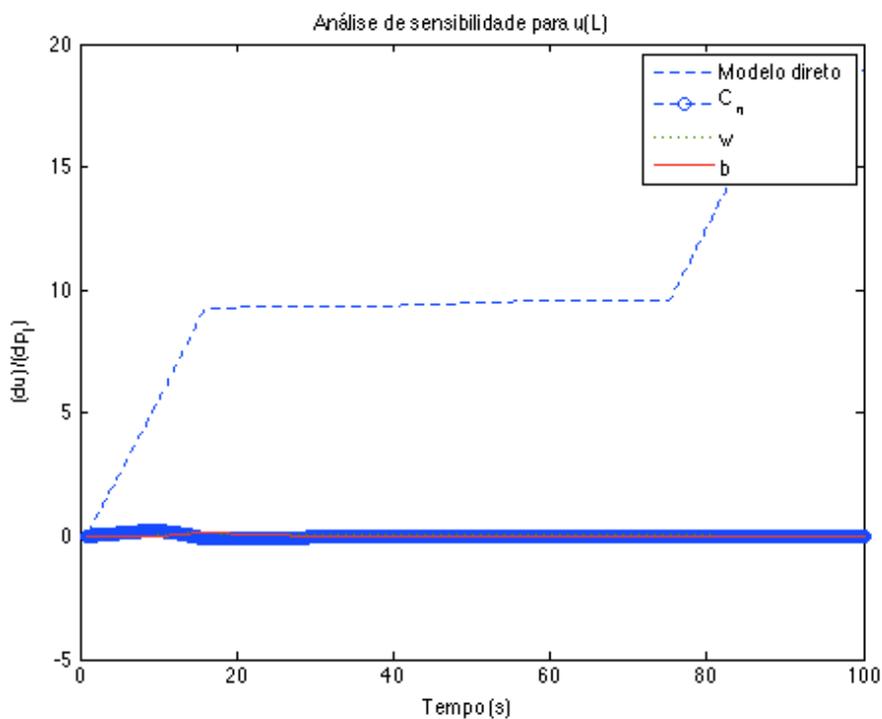


Figura 5 – Análise de sensibilidade de  $\bar{u}$  para  $\varepsilon = 10^{-7}$ .

Para  $\varepsilon = 10^{-10}$

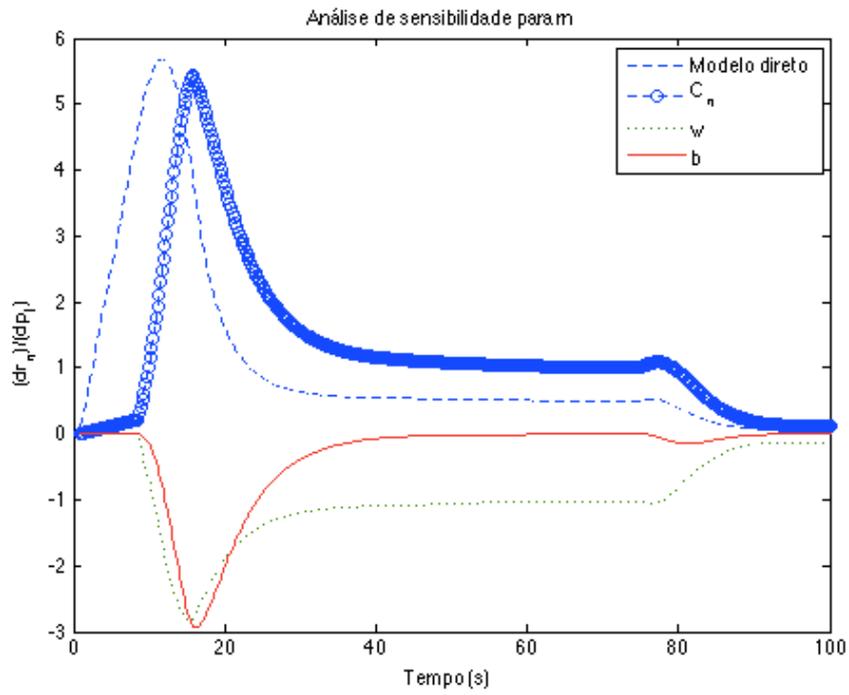


Figura 6 – Análise de sensibilidade de  $\bar{r}_n$  para  $\varepsilon = 10^{-10}$ .

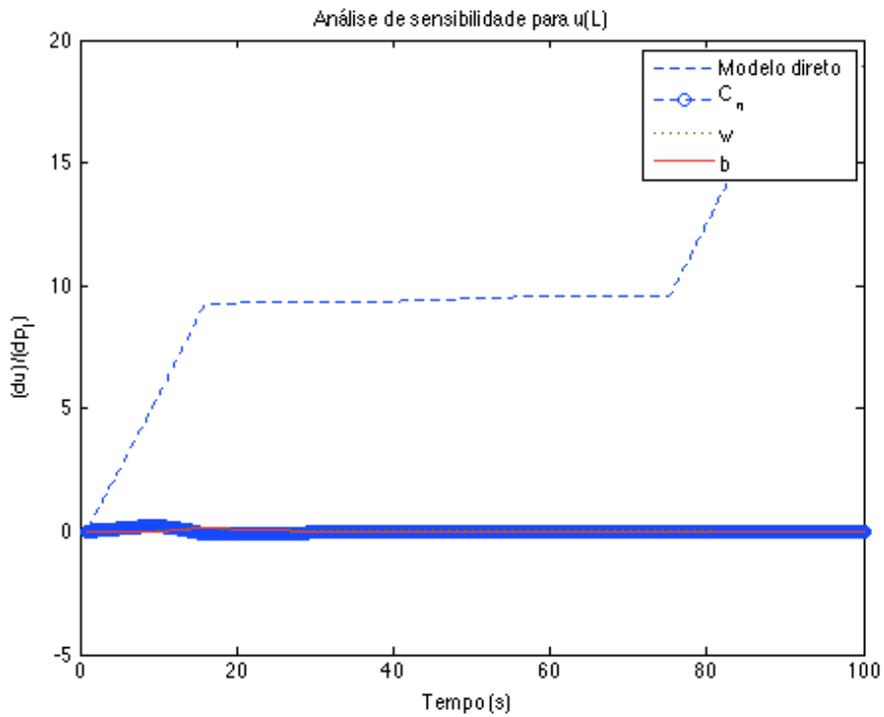


Figura 7 – Análise de sensibilidade de  $\bar{u}$  para  $\varepsilon = 10^{-10}$ .

## C. Resultados da estimativa para $\bar{w}$

### Caso 1

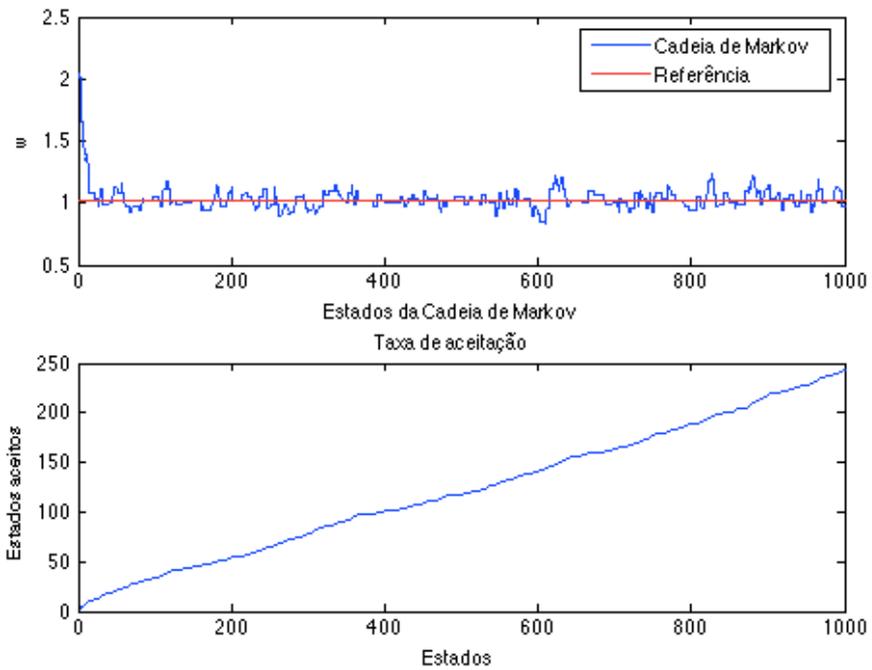


Figura 8 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 1.

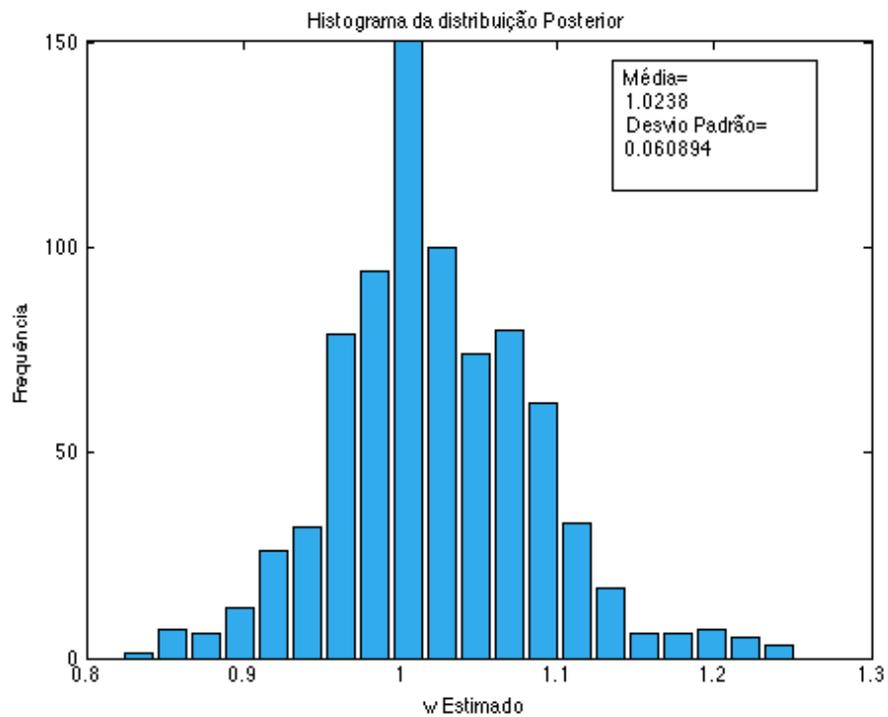


Figura 9 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 1.

## Caso 2

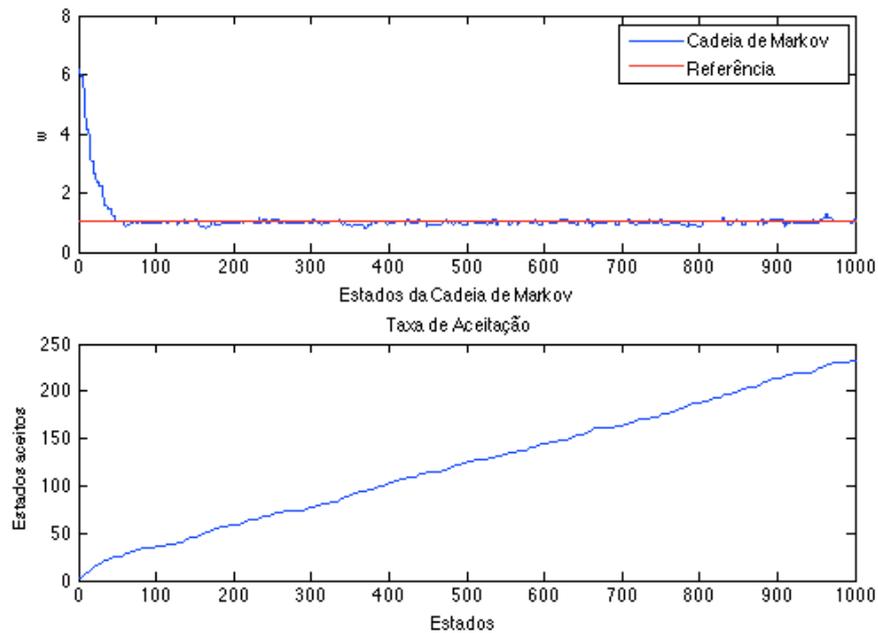


Figura 10 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 2.

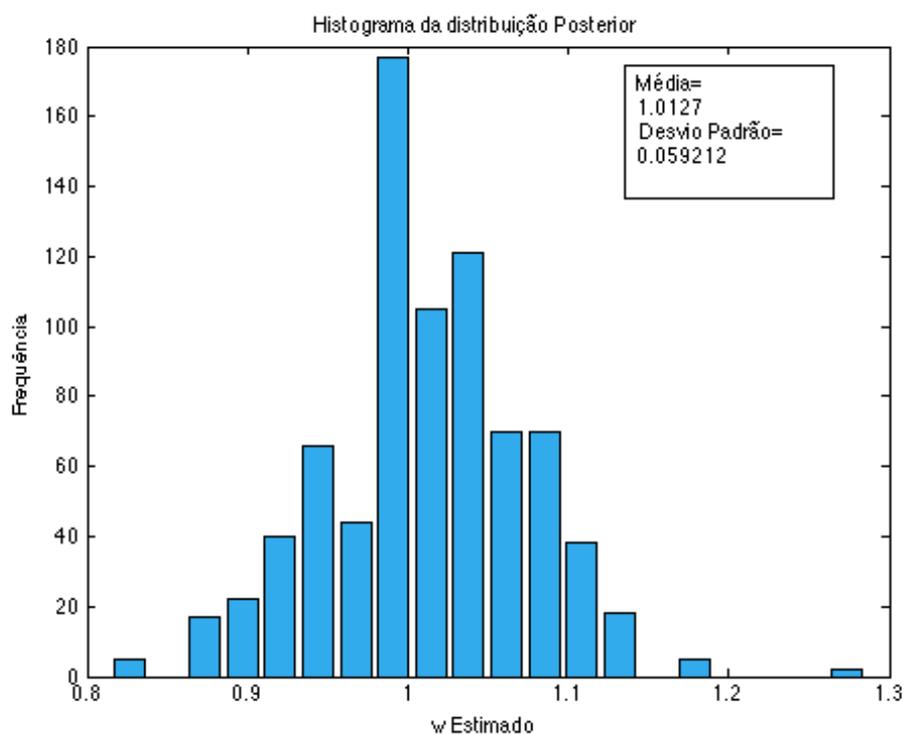


Figura 11 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 2.

### Caso 3

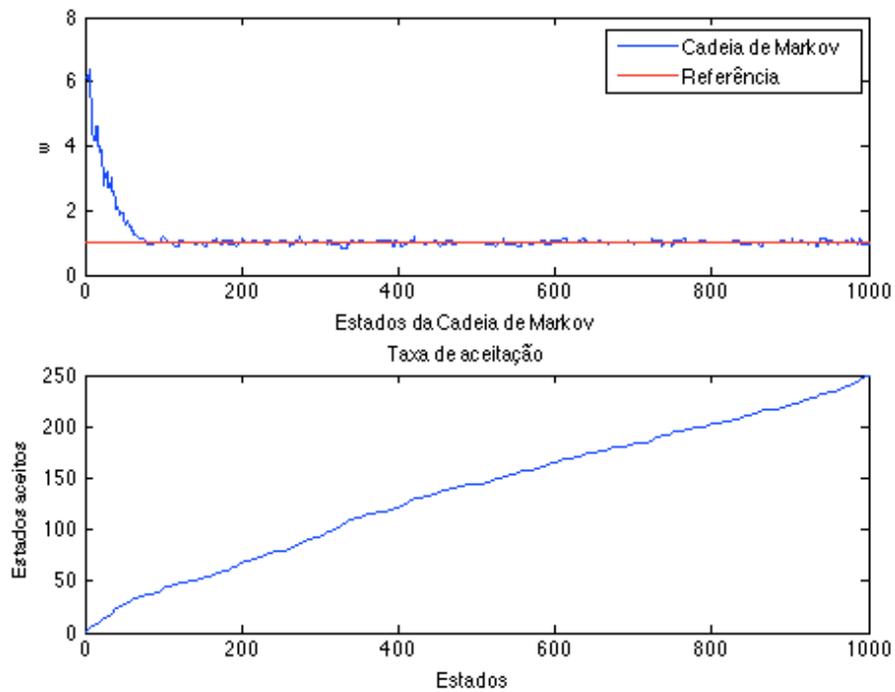


Figura 12 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 3.

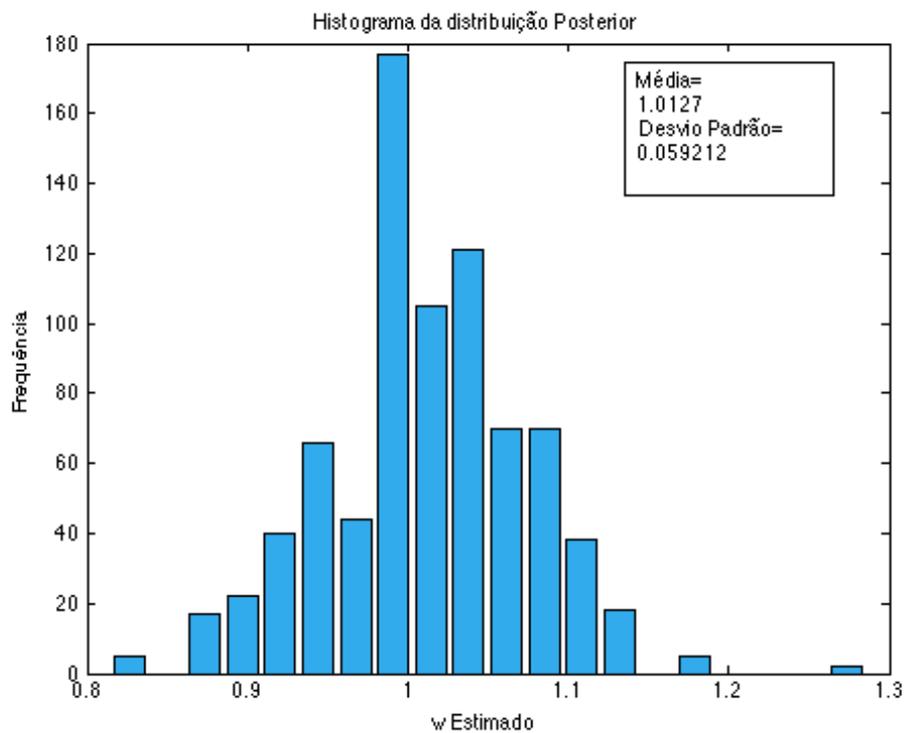


Figura 13 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 3.

### Caso 4

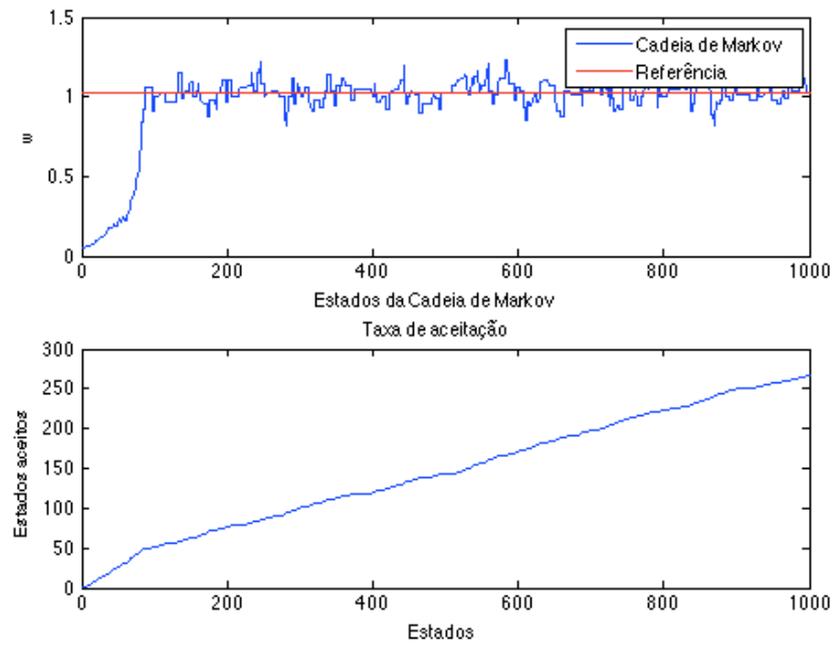


Figura 14 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 4.

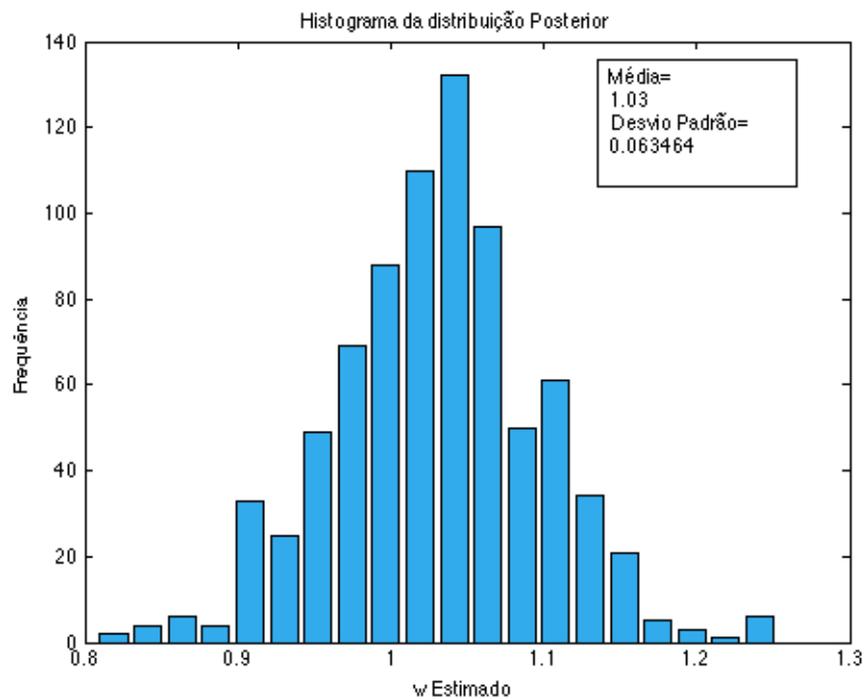


Figura 15 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 4.

### Caso 5

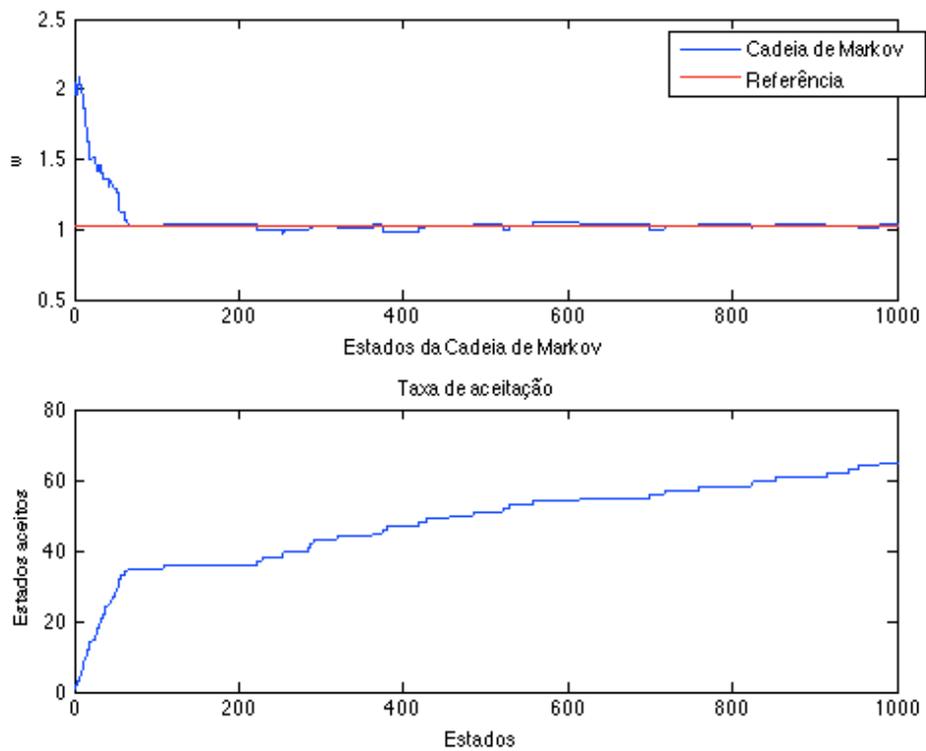


Figura 16 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 5.

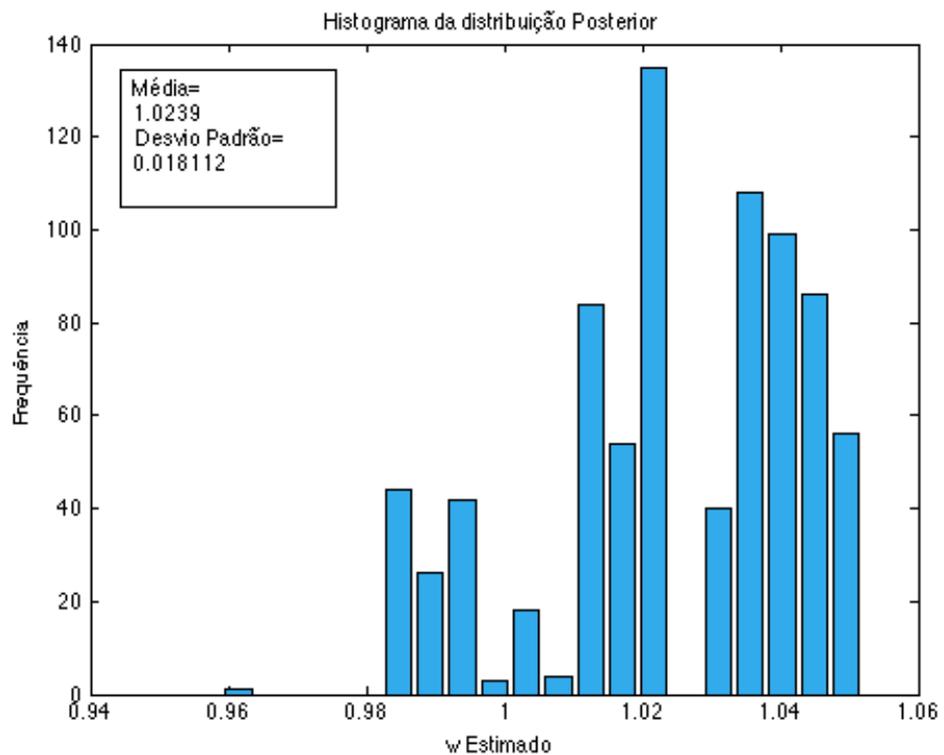


Figura 17 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 5.

### Caso 6

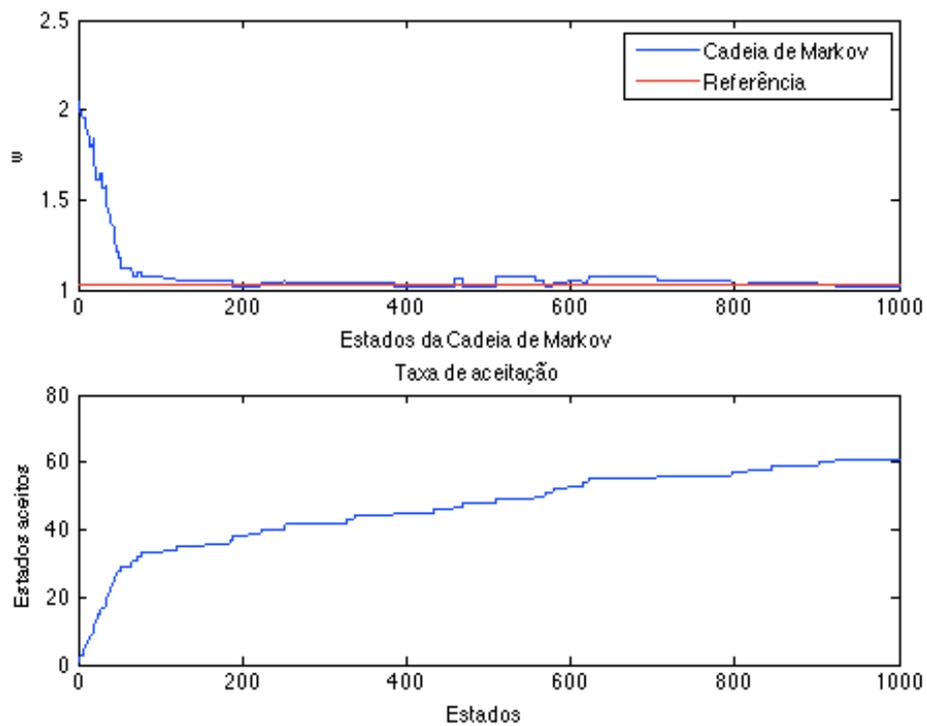


Figura 18 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 6.

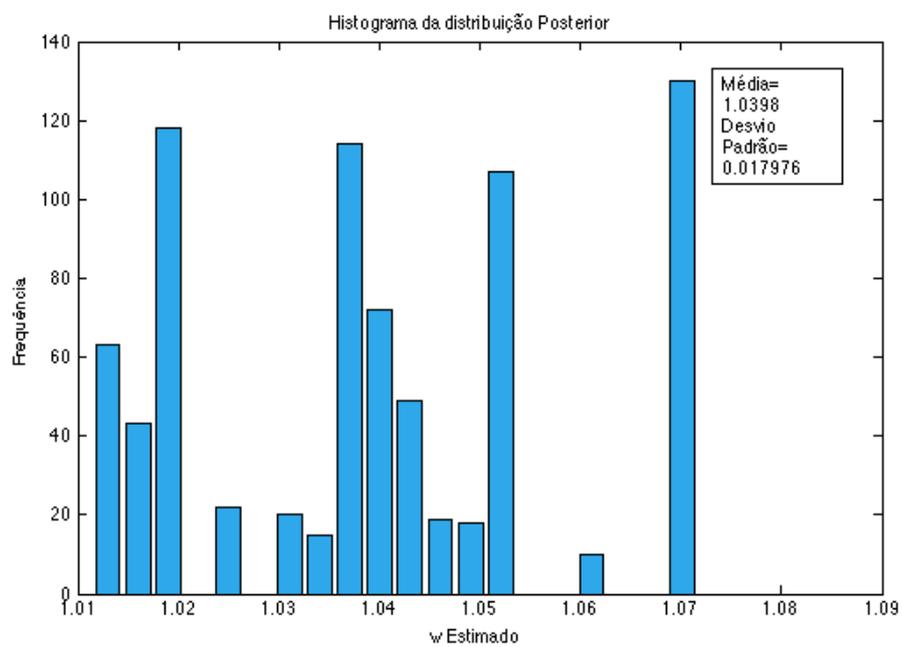


Figura 19 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 6.

### Caso 7

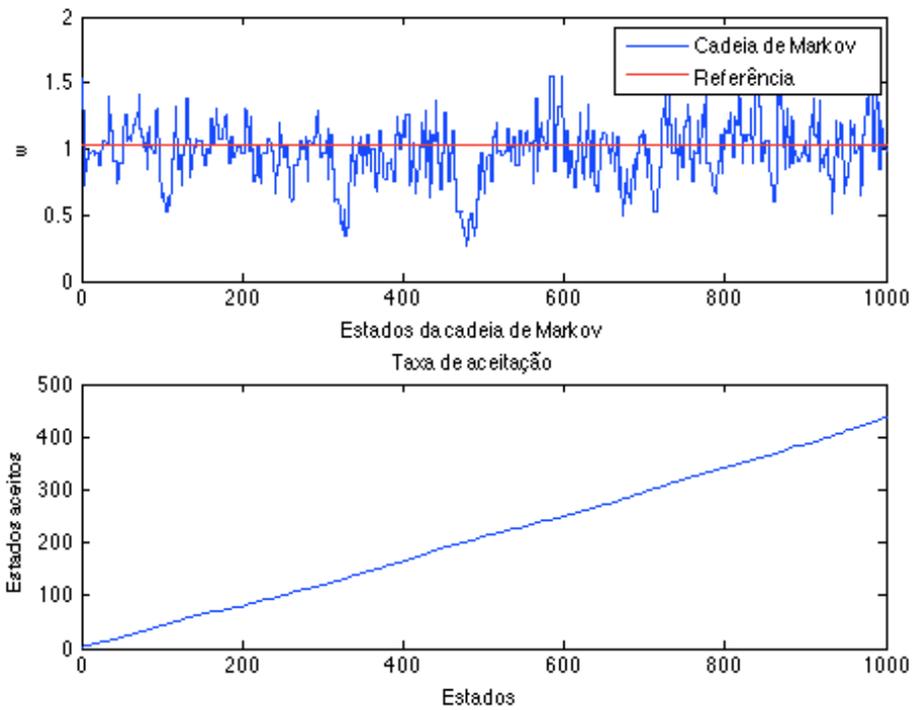


Figura 20 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 7.

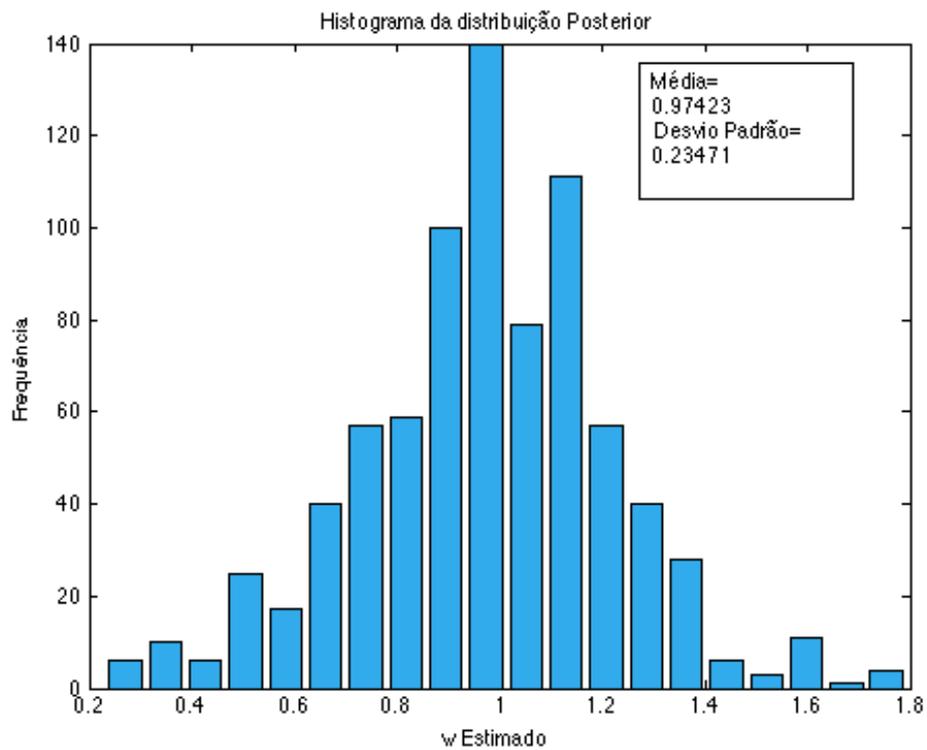


Figura 21 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 7.

### Caso 8

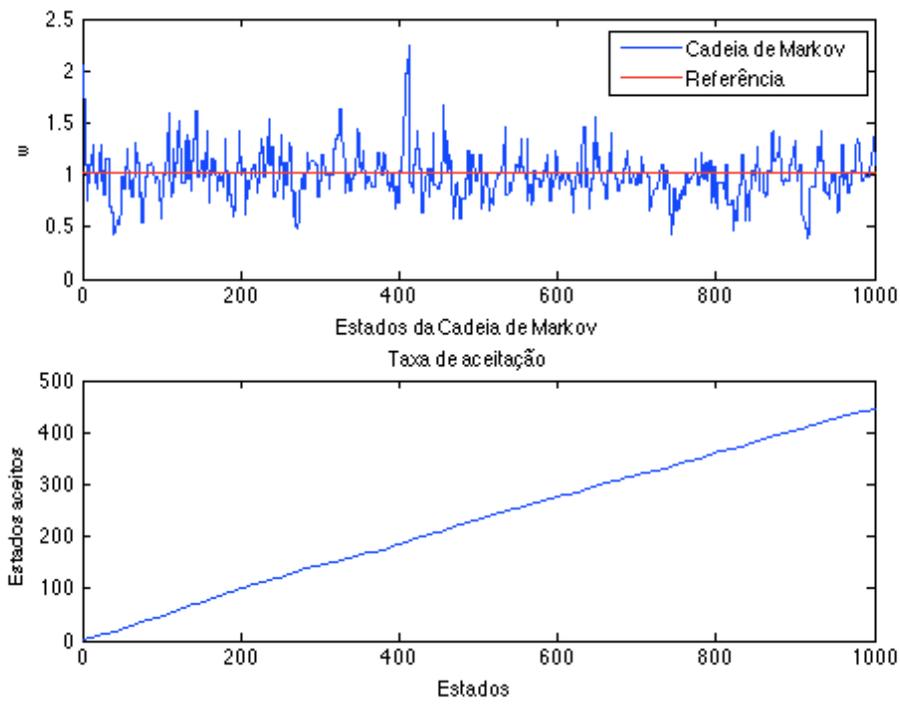


Figura 22 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{w}$ , Caso 8.

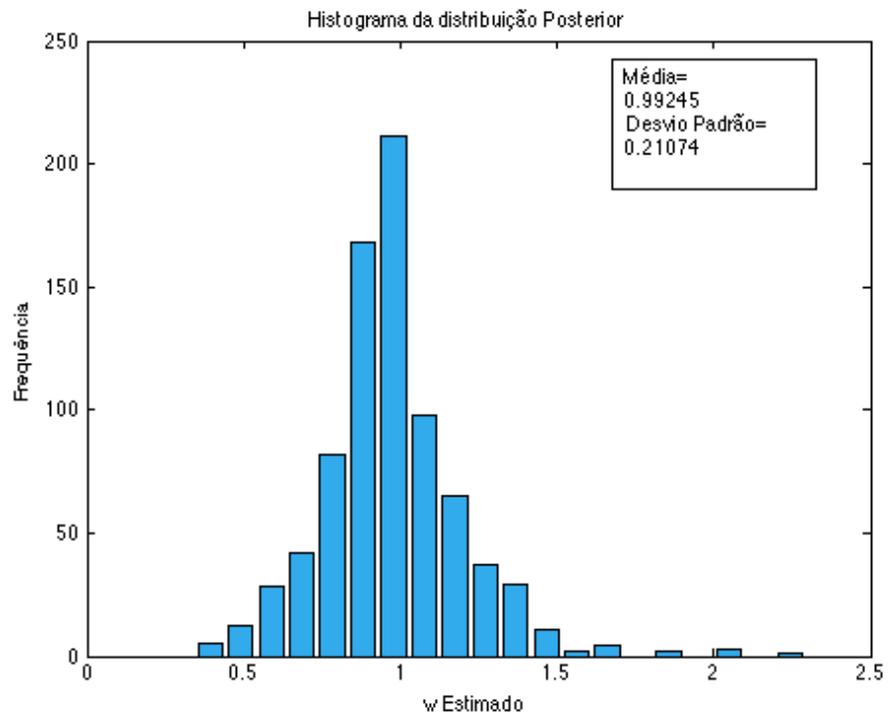


Figura 23 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 8.

## D. Resultados da estimativa para $\bar{b}$

### Caso 1

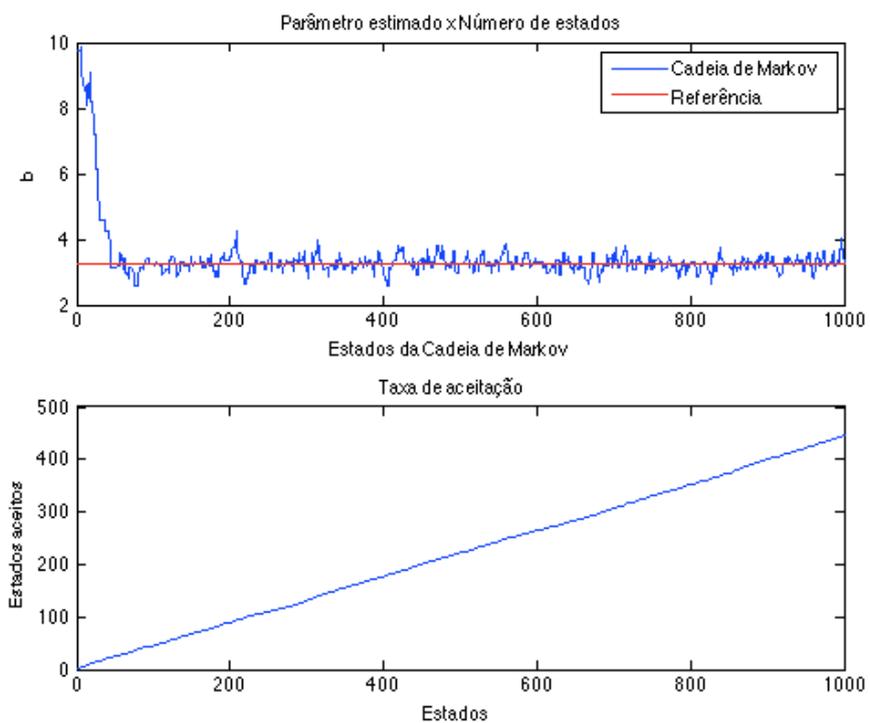


Figura 24 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 1.

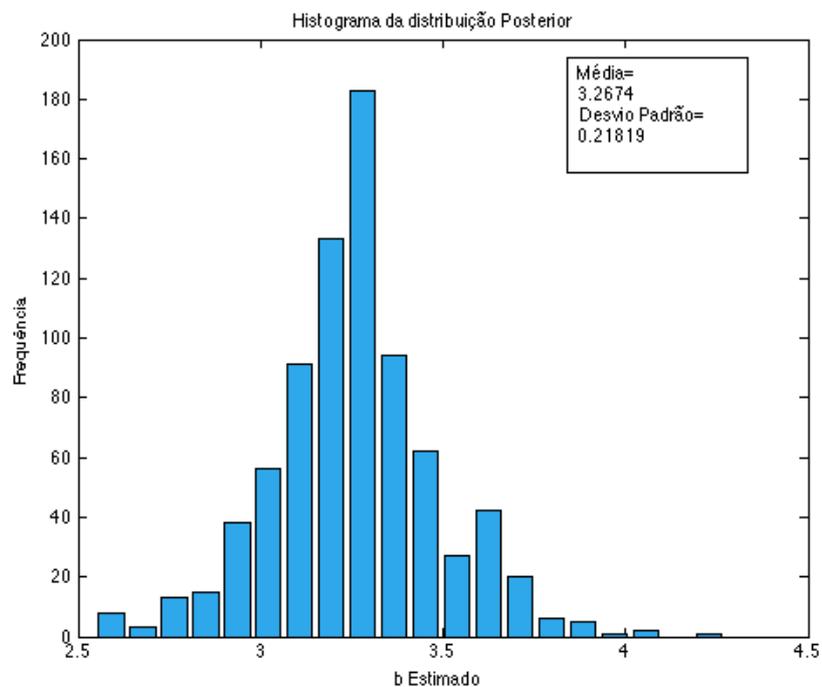


Figura 25 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 1.

## Caso 2

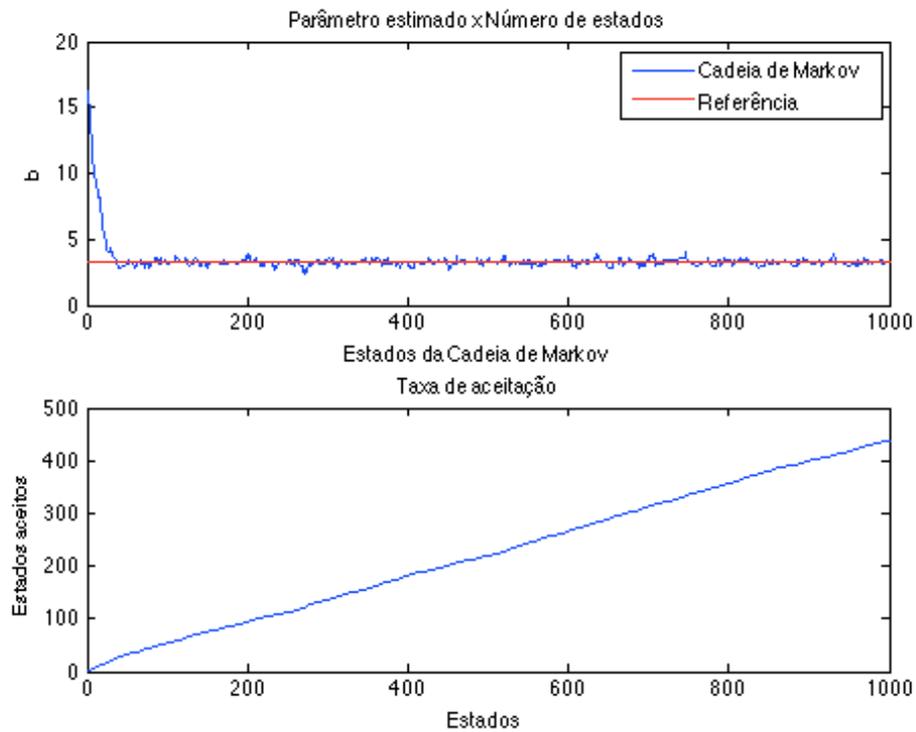


Figura 26 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 2.

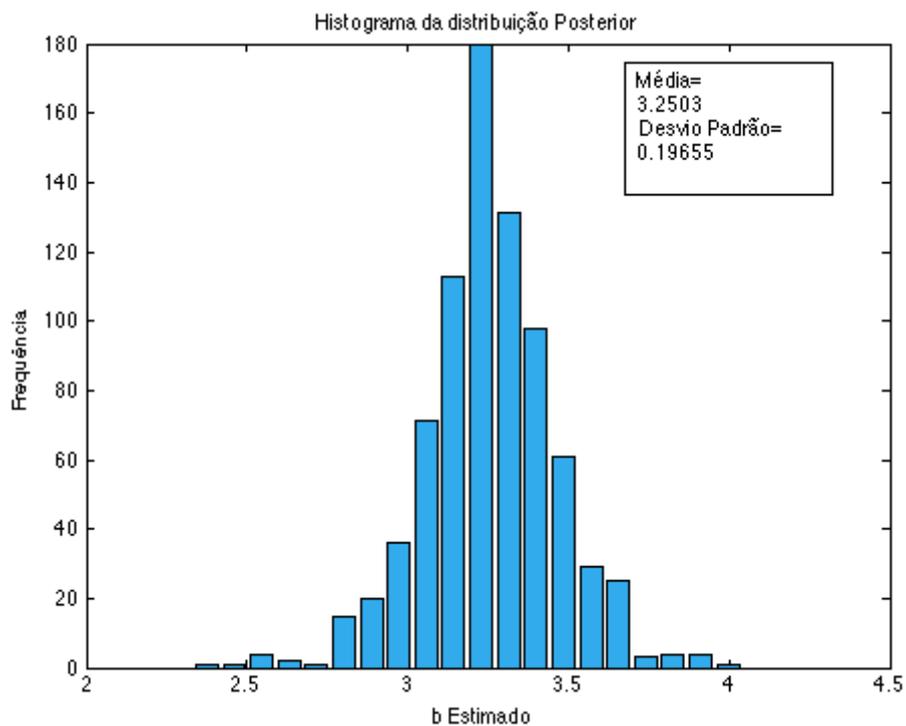


Figura 27 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 2.

### Caso 3

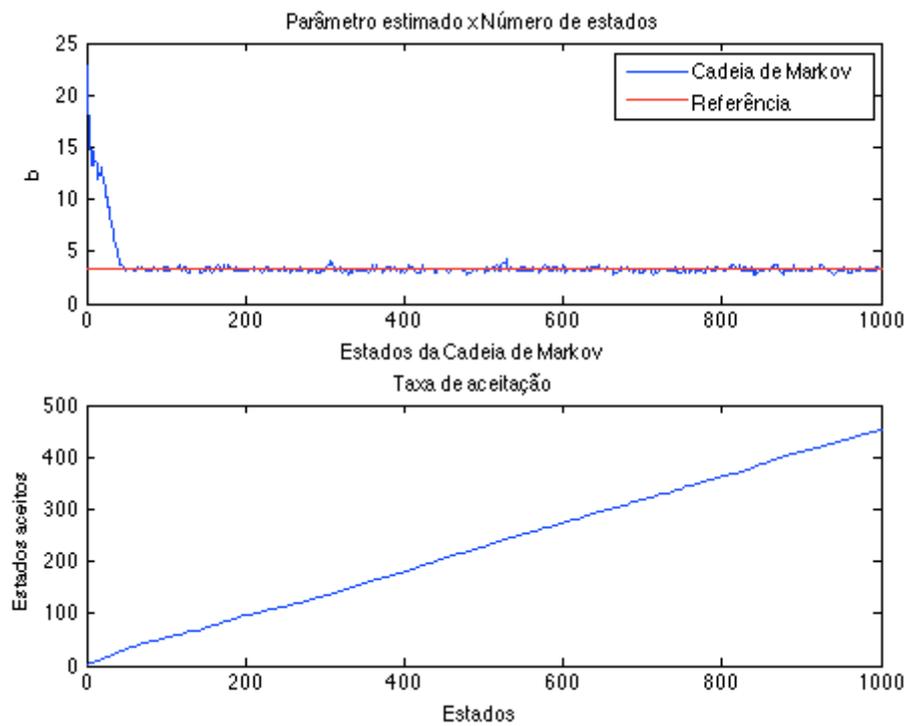


Figura 28 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 3.

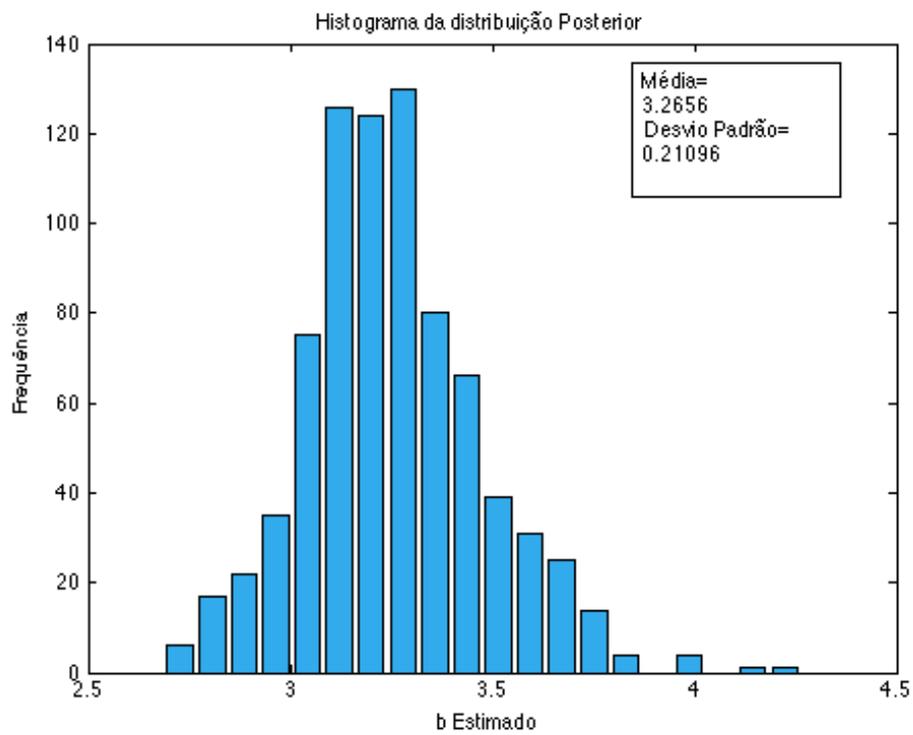


Figura 29 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 3.

### Caso 4

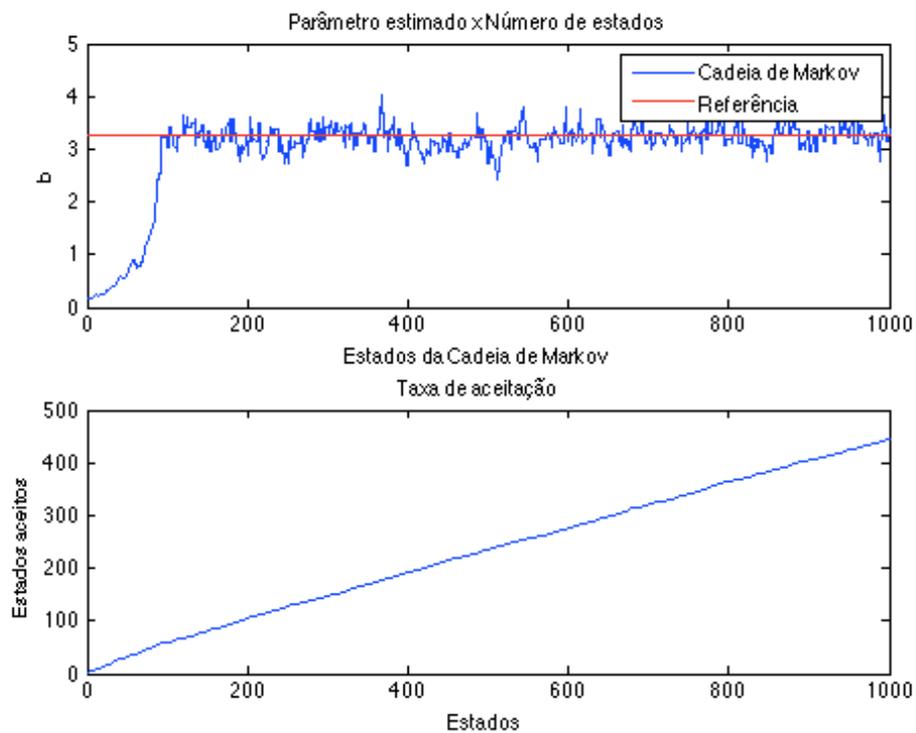


Figura 30 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 4.

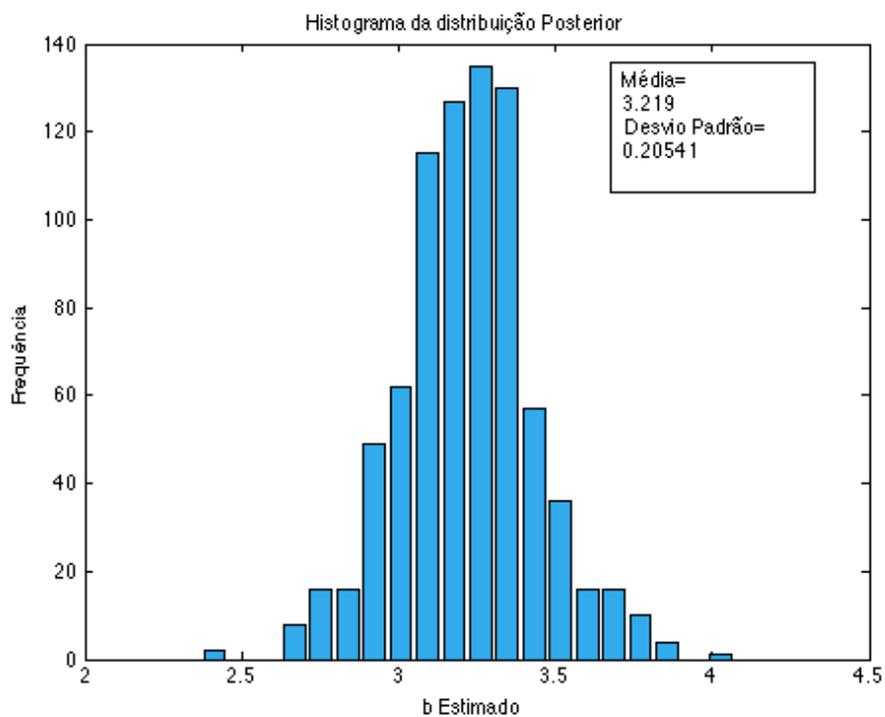


Figura 31 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 4.

### Caso 5

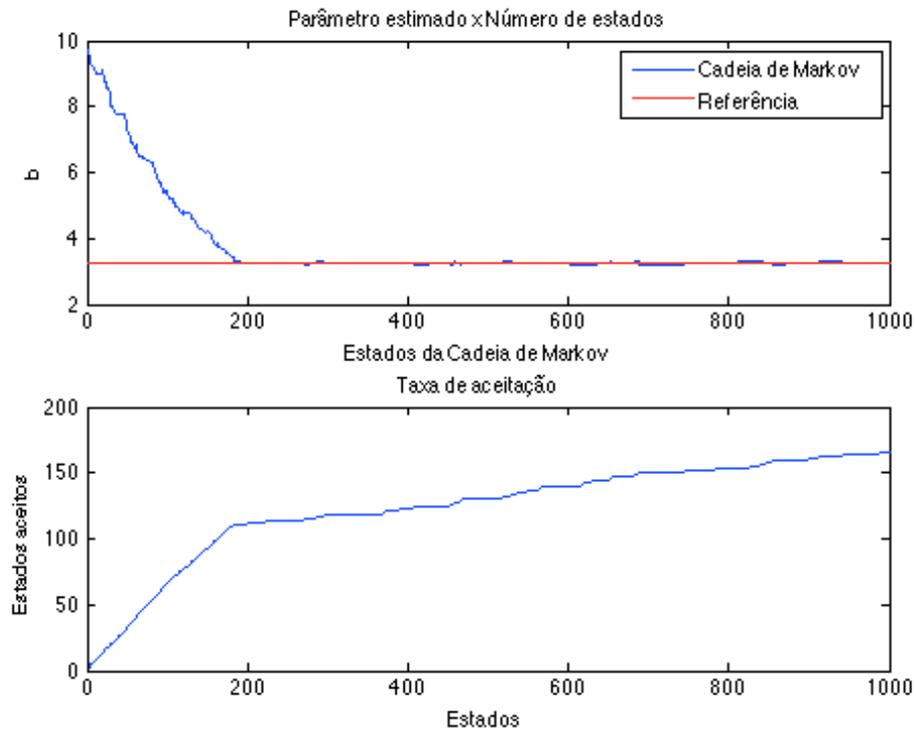


Figura 32 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 5.

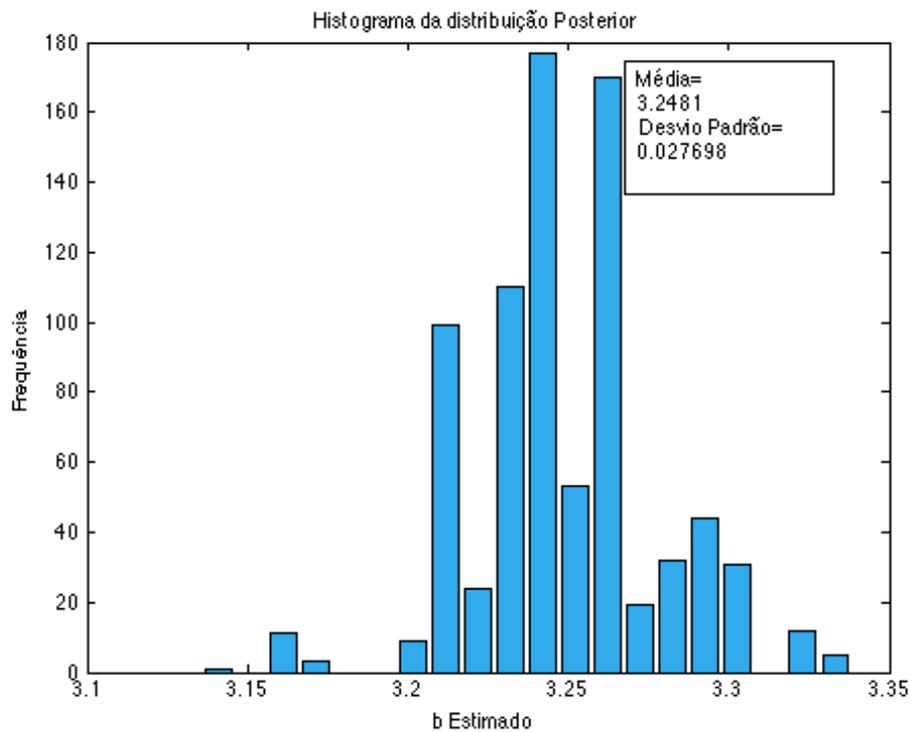


Figura 33 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 5.

## Caso 6

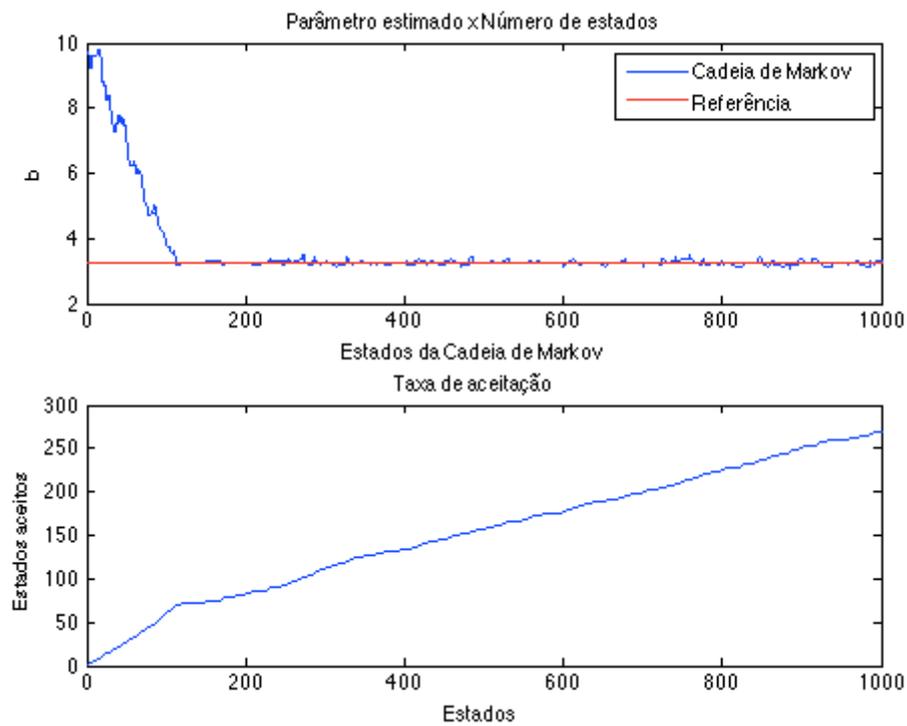


Figura 34 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 6.

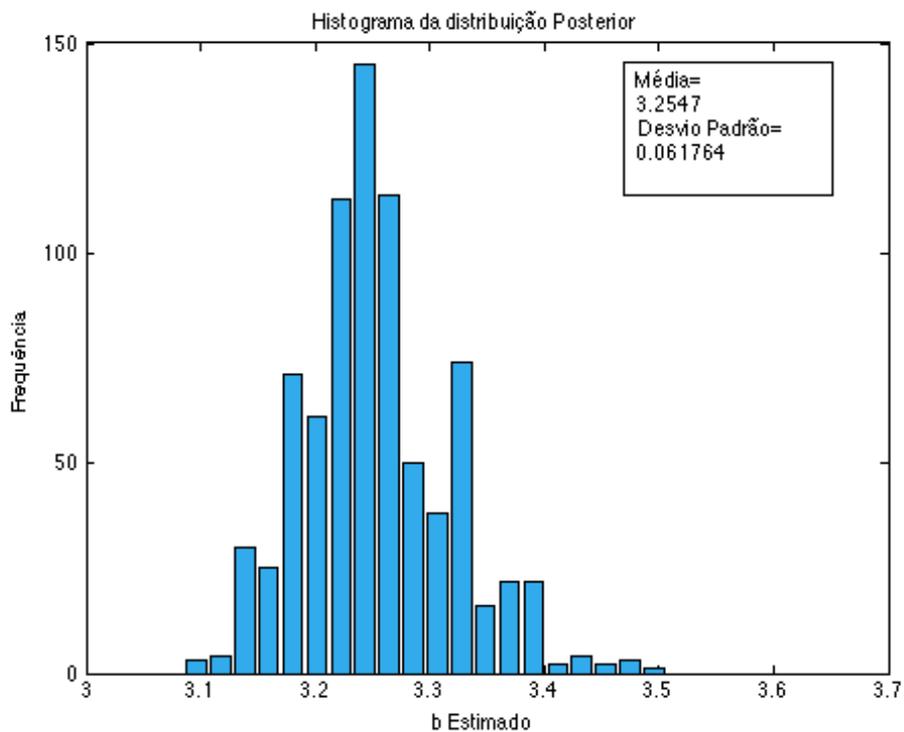


Figura 35 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 6.

### Caso 7

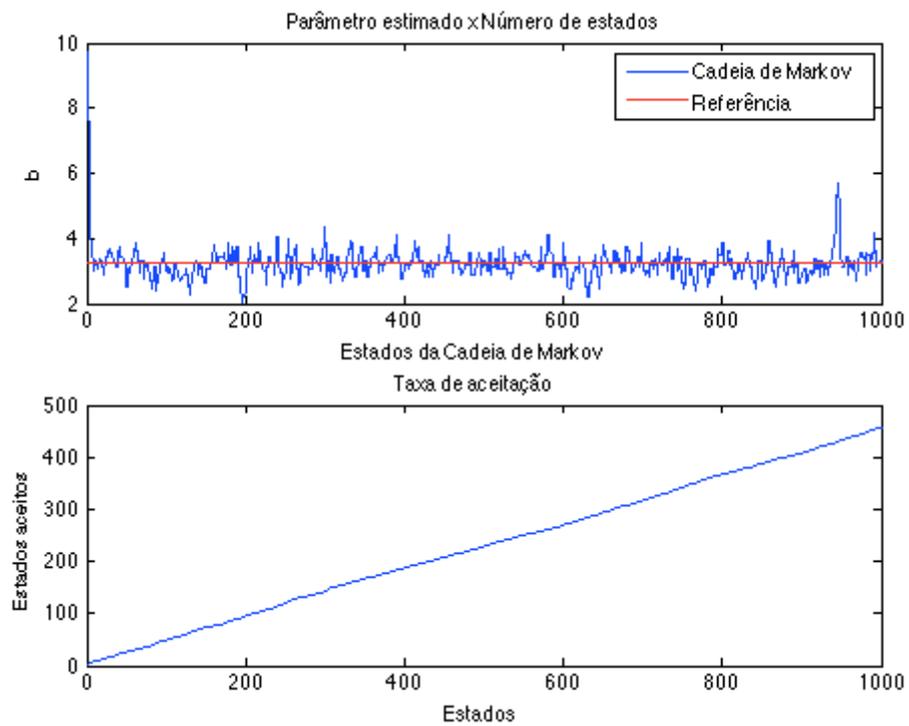


Figura 36 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 7.

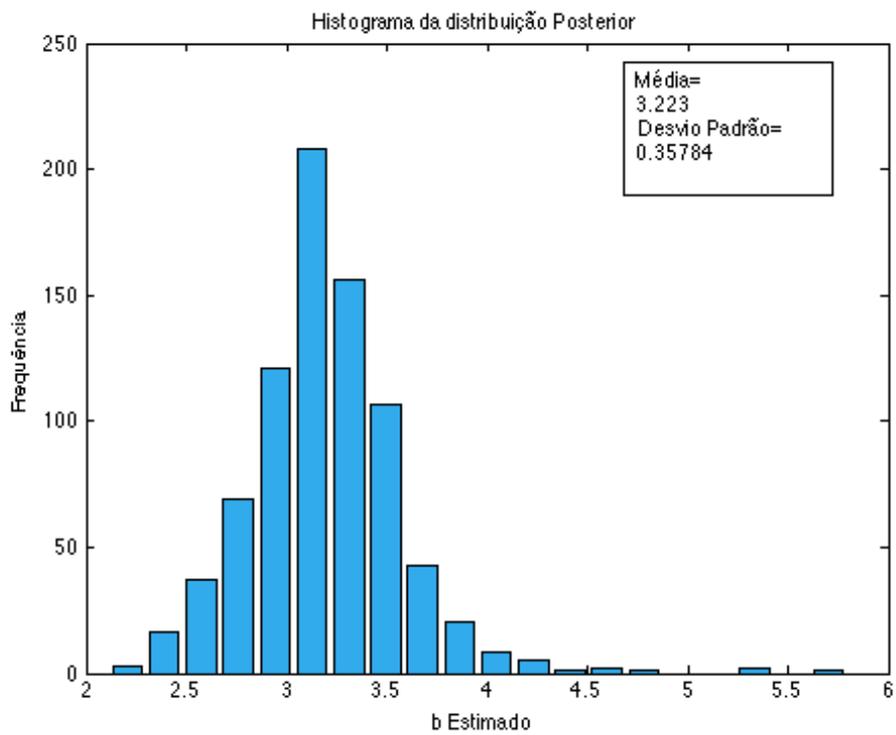


Figura 37 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 7.

### Caso 8

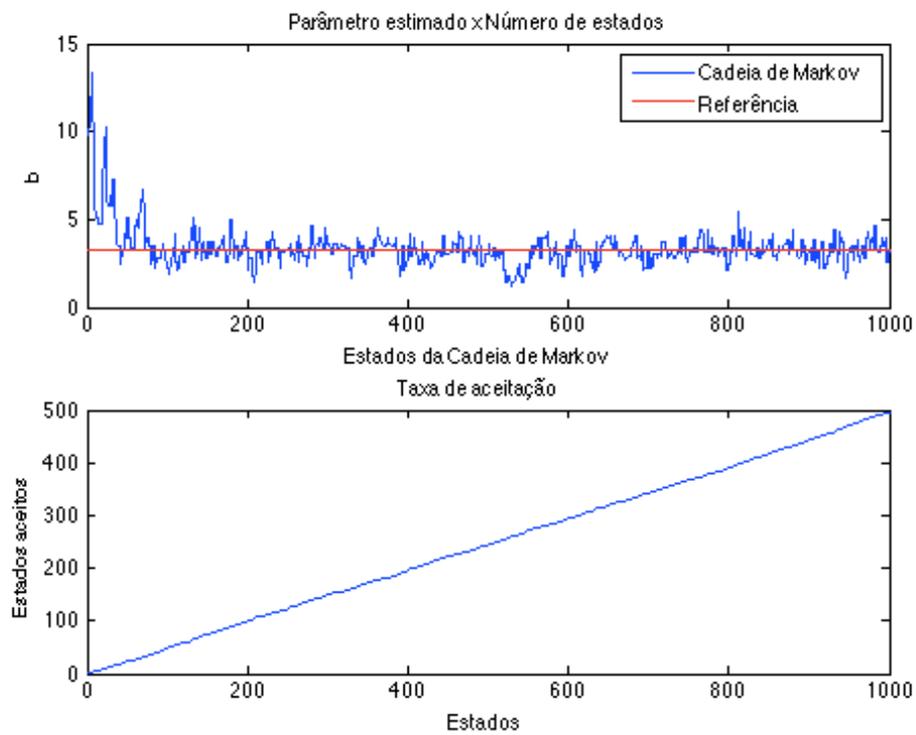


Figura 38 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{b}$ , Caso 8.

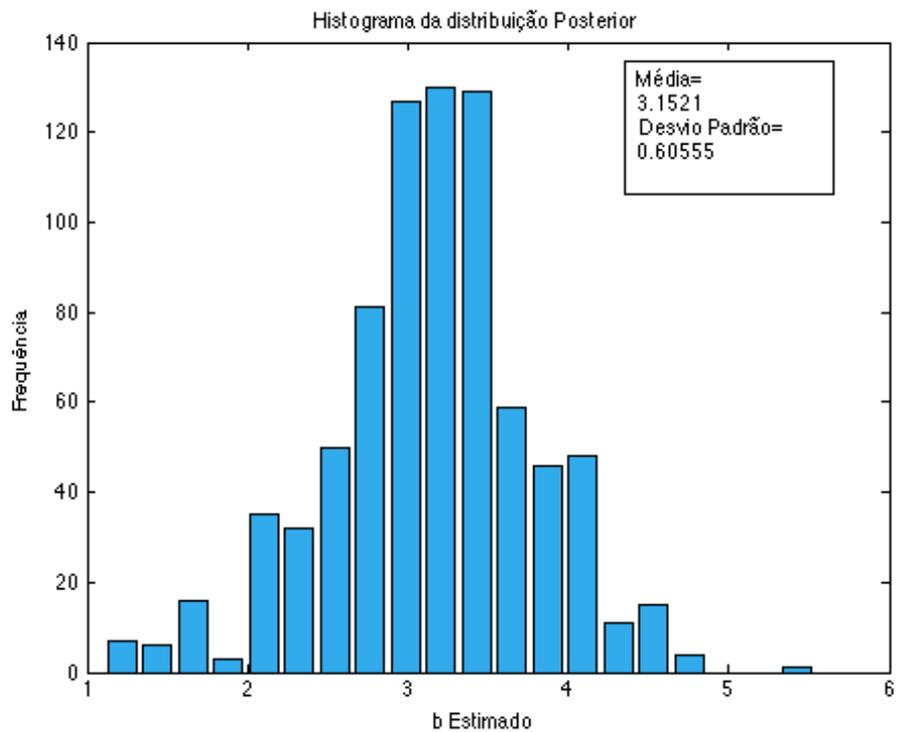


Figura 39 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 8.

## E. Resultados da estimativa para $\bar{c}$

### Caso 1

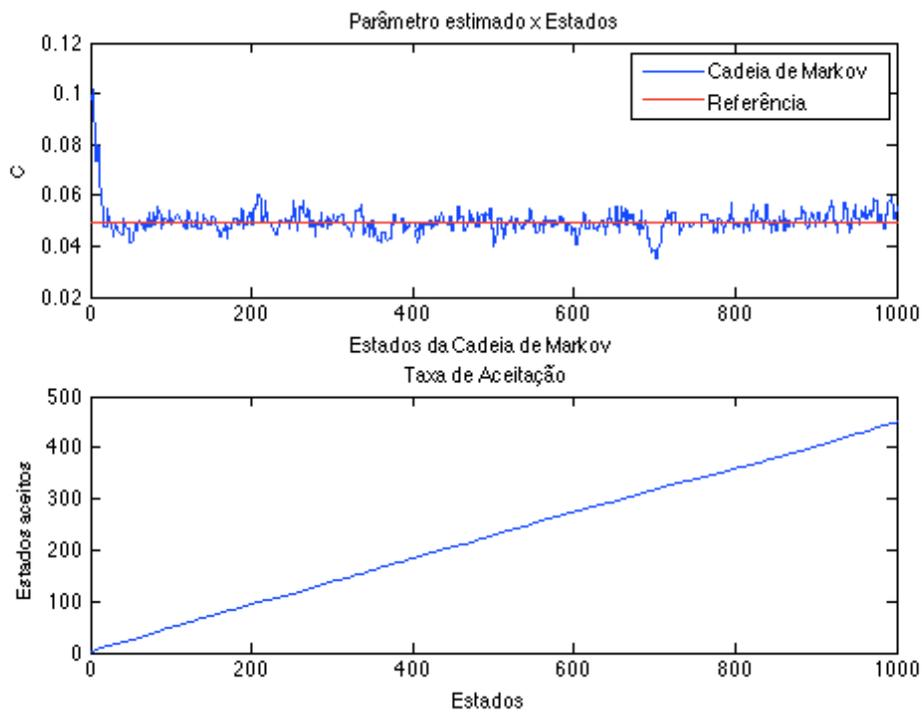


Figura 40 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 1.

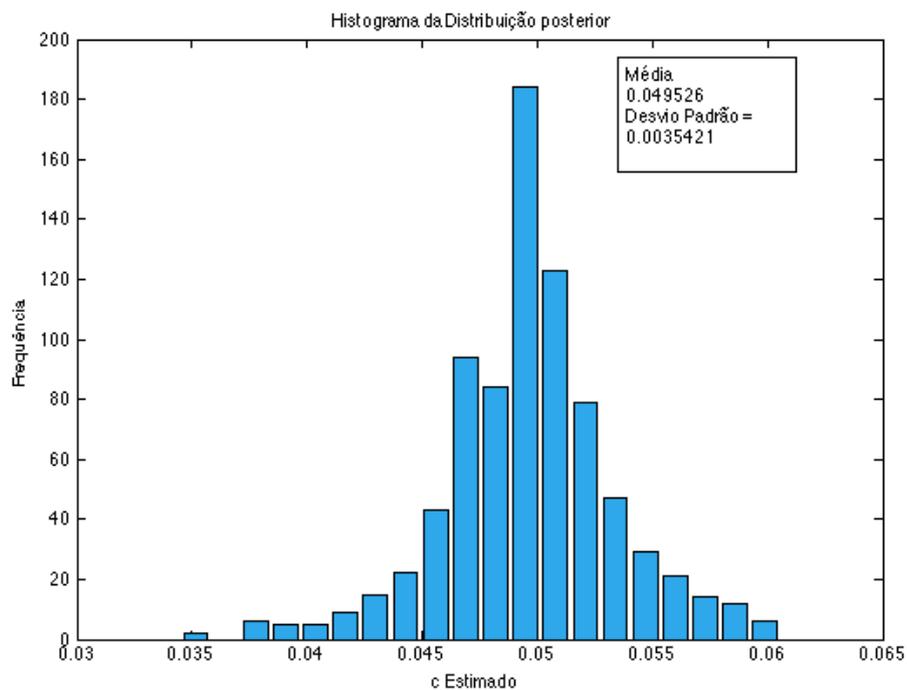


Figura 41 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 1.

## Caso 2

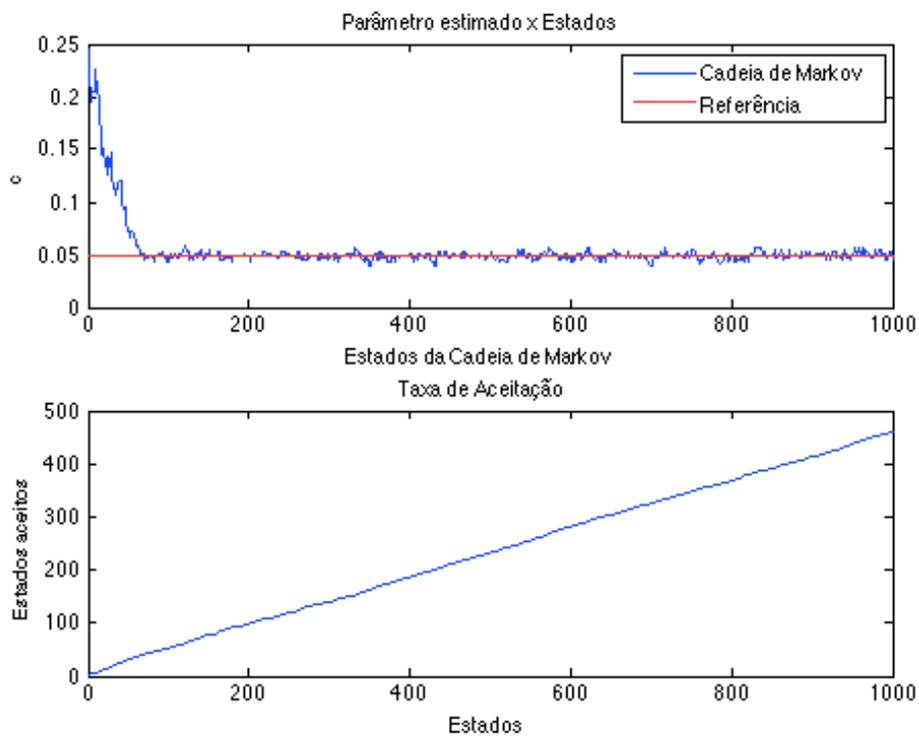


Figura 42 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 2.

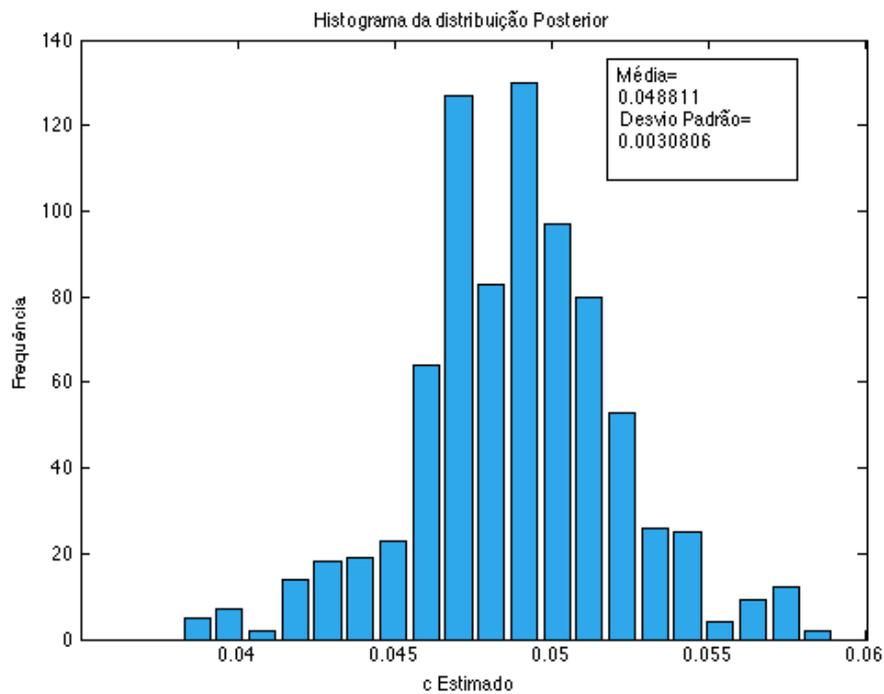


Figura 43 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 2.

### Caso 3

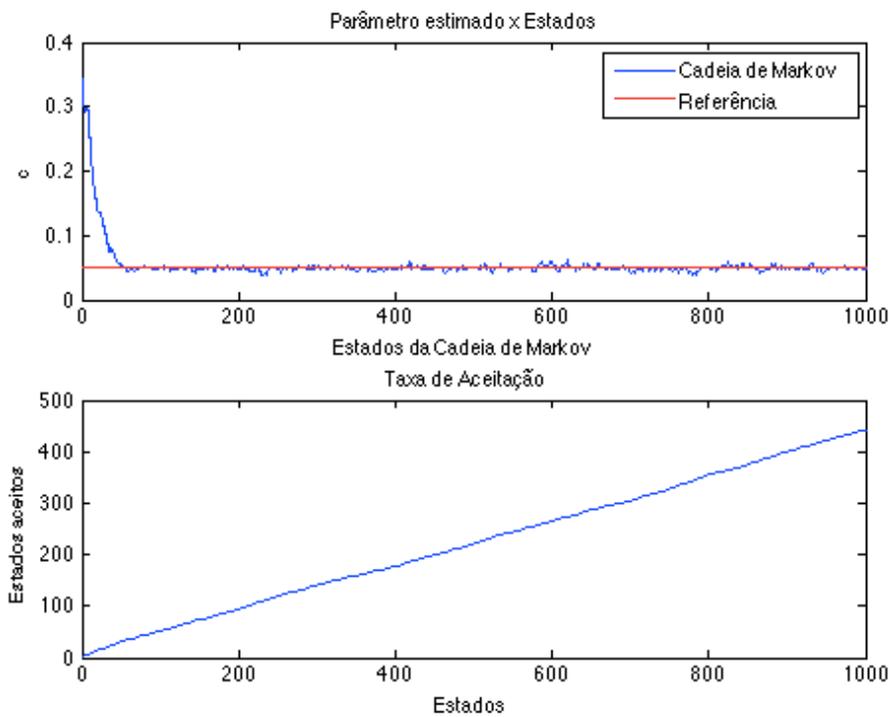


Figura 44 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 3.

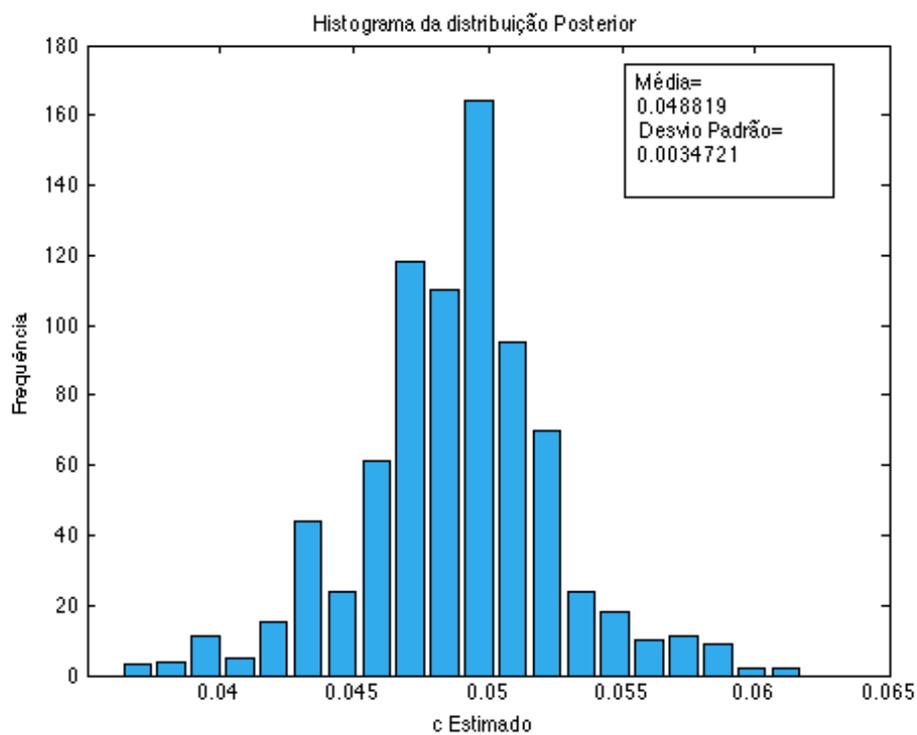


Figura 45 - Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 3.

#### Caso 4

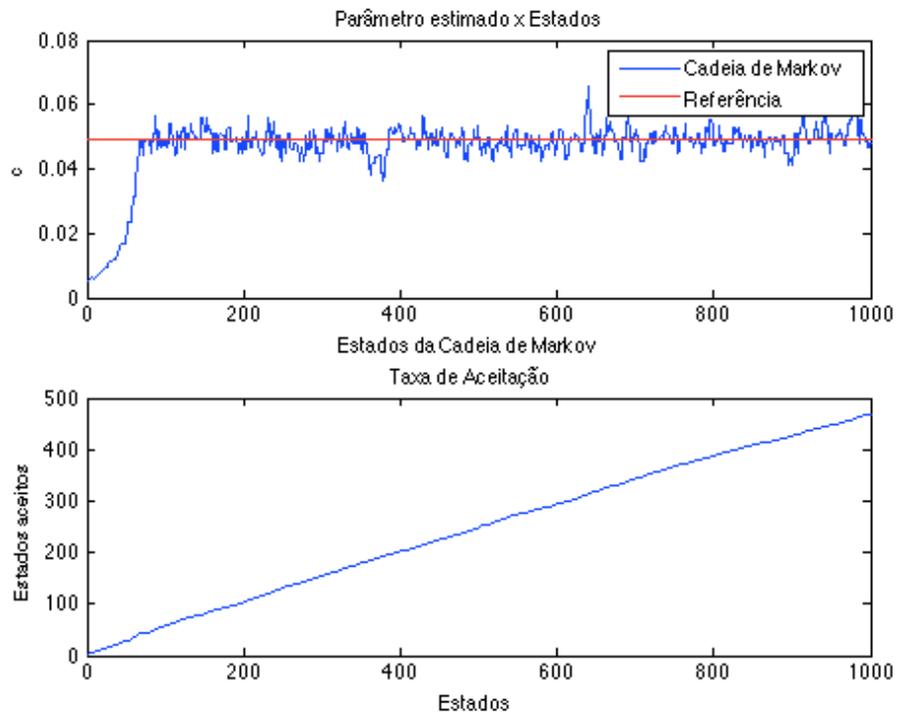


Figura 46 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 4.

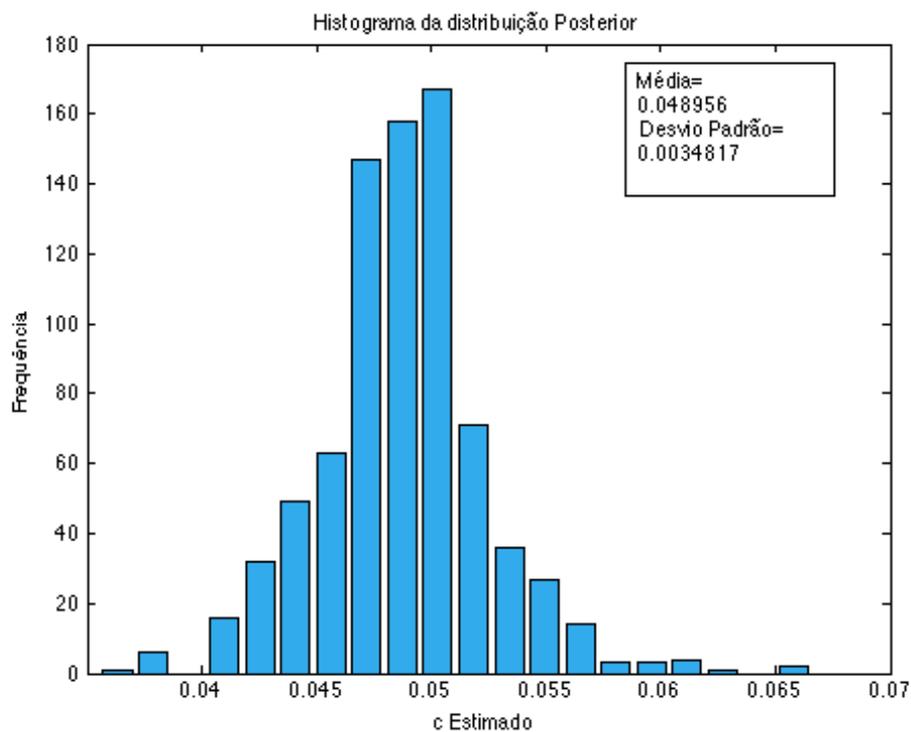


Figura 47 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 4.

## Caso 5

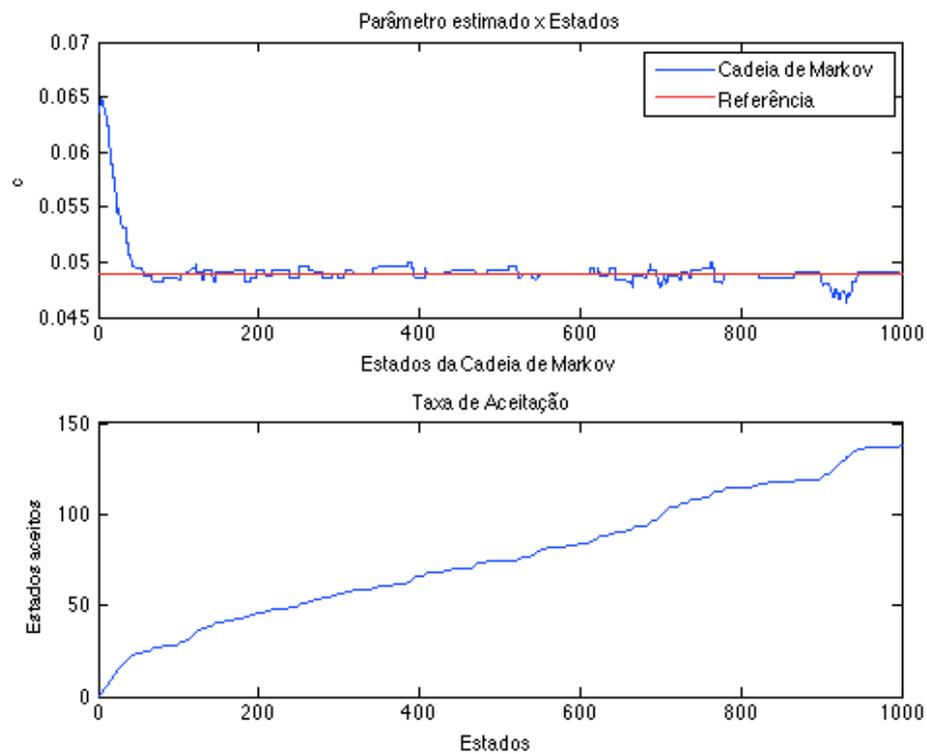


Figura 48 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 5.

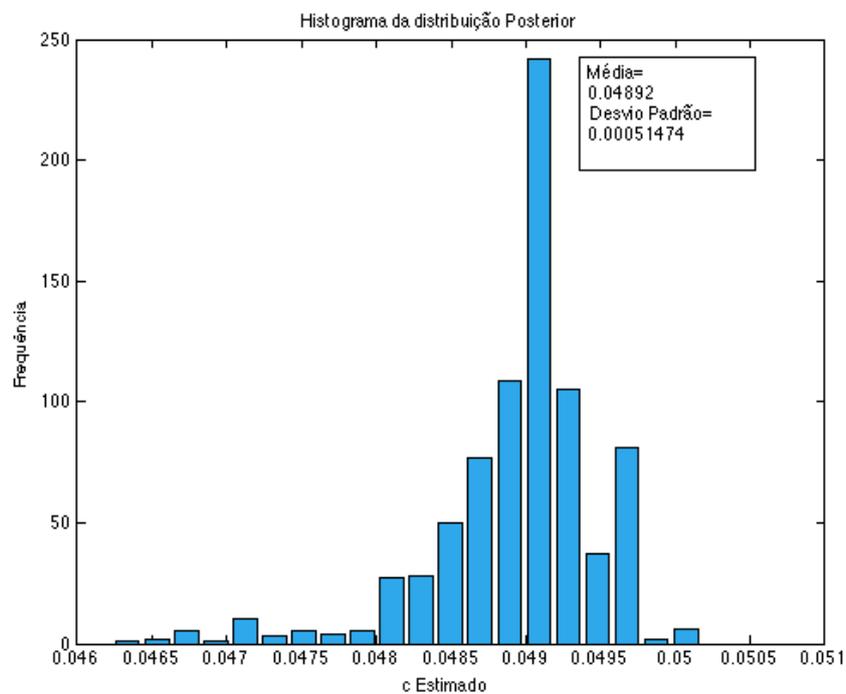


Figura 49 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 5.

## Caso 6

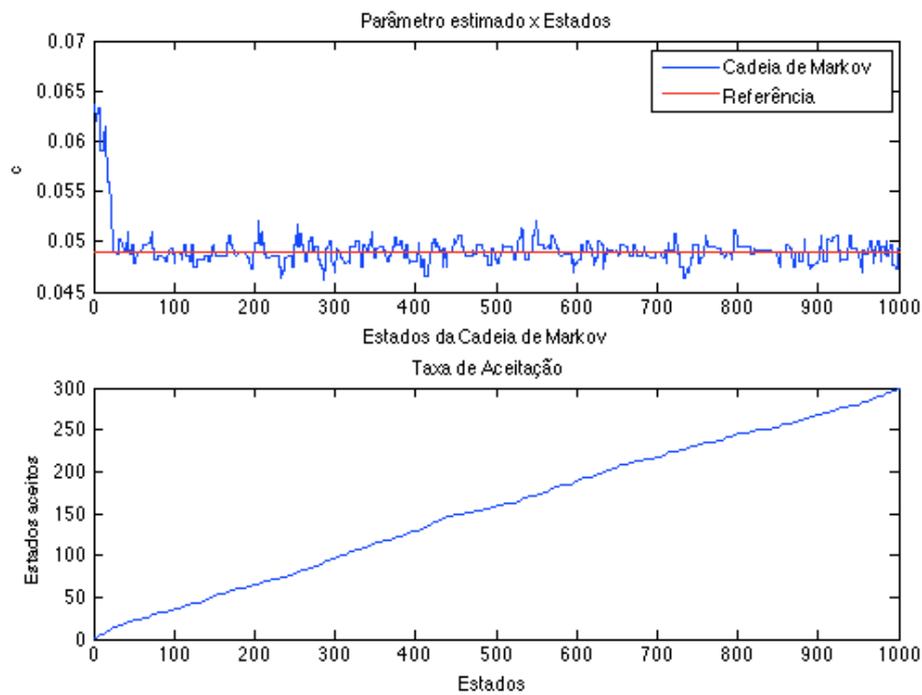


Figura 50 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 6.

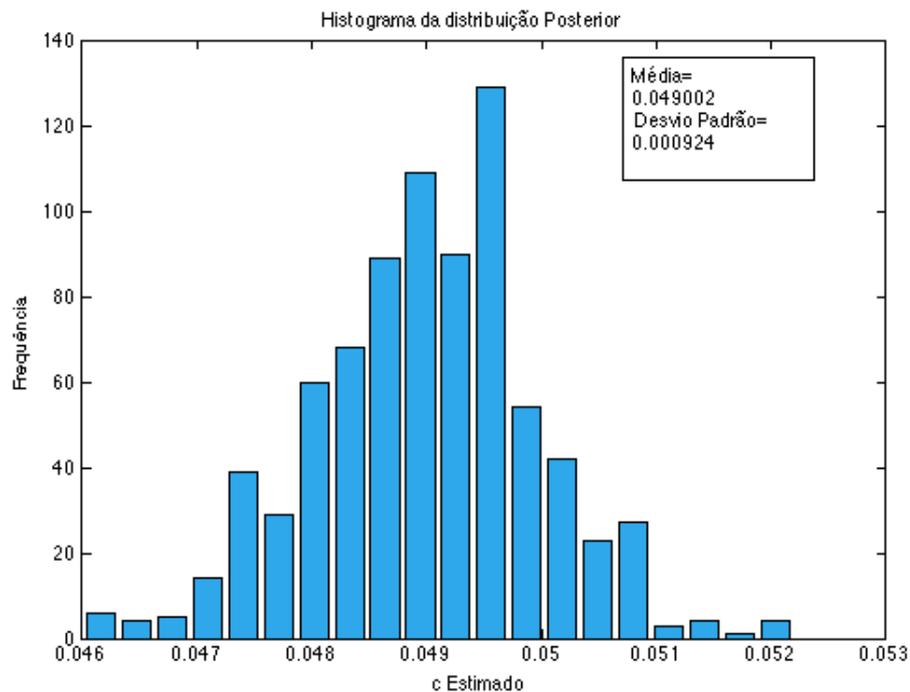


Figura 51 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 6.

### Caso 7

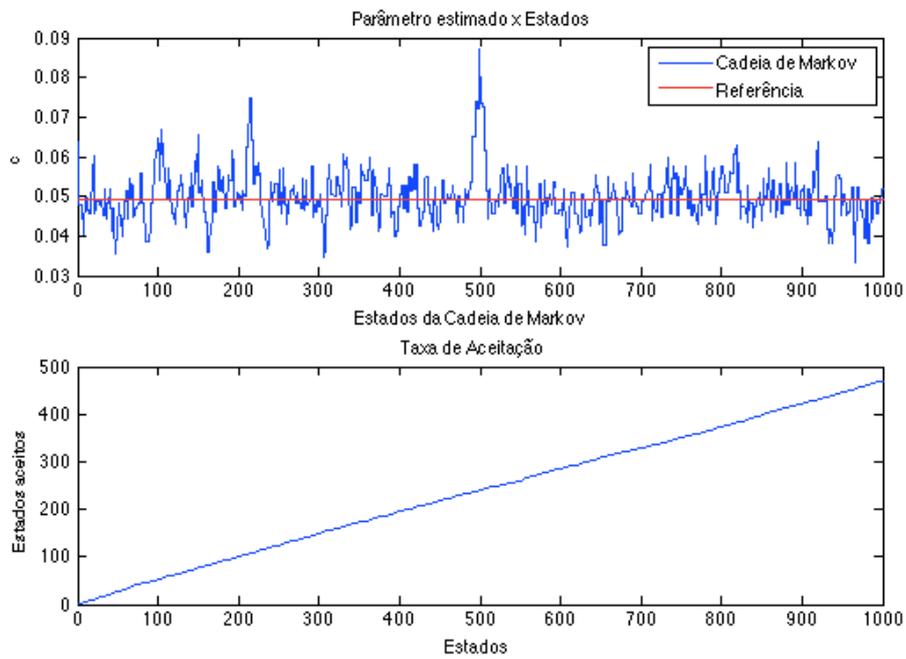


Figura 52 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 7.

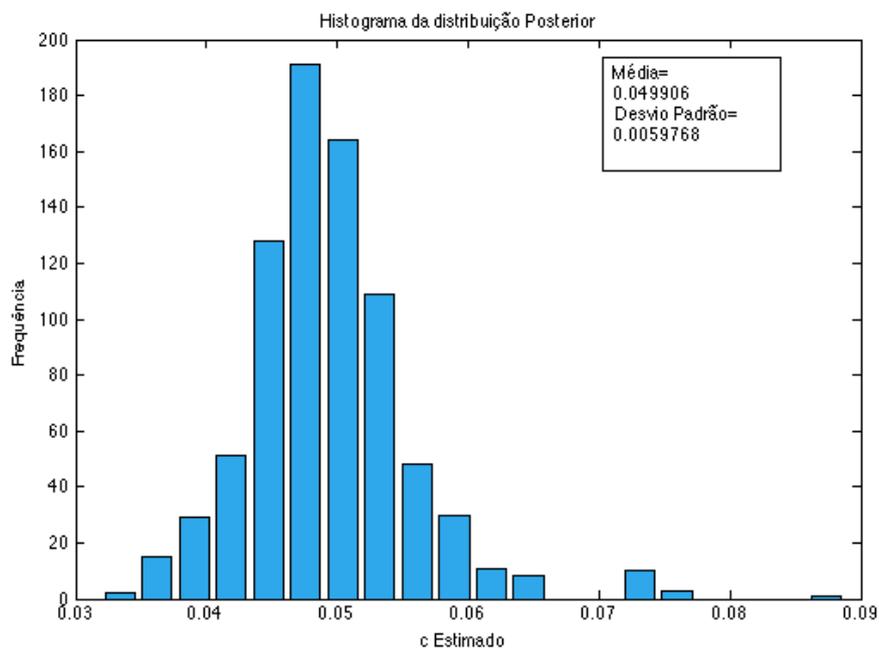


Figura 53 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 7.

### Caso 8

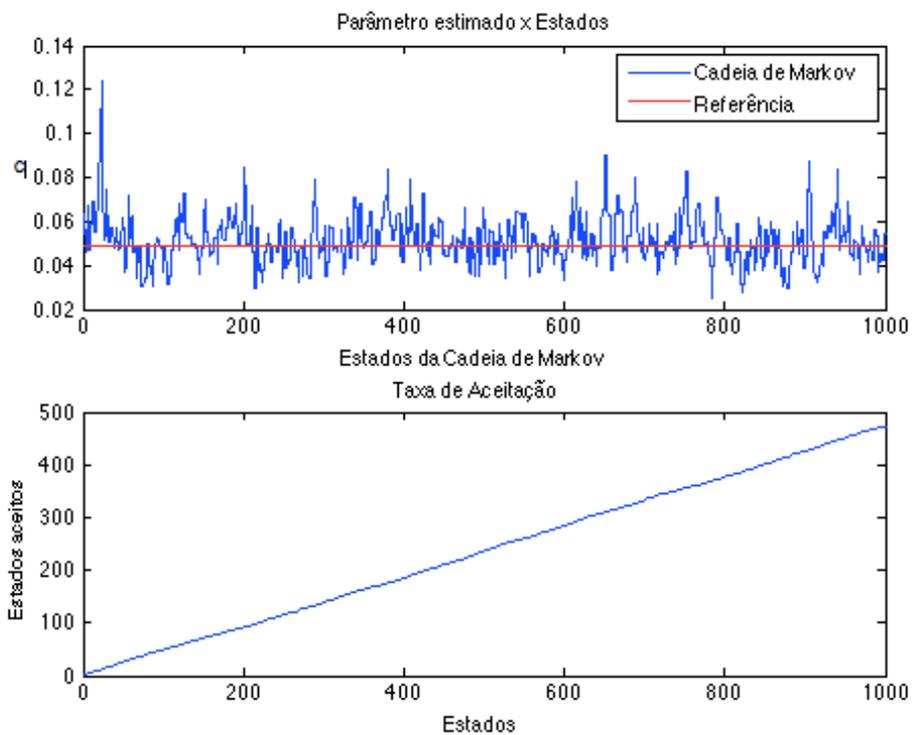


Figura 54 – Resultados da cadeia de markov e taxa de aceitação para  $\bar{c}$ , Caso 8.

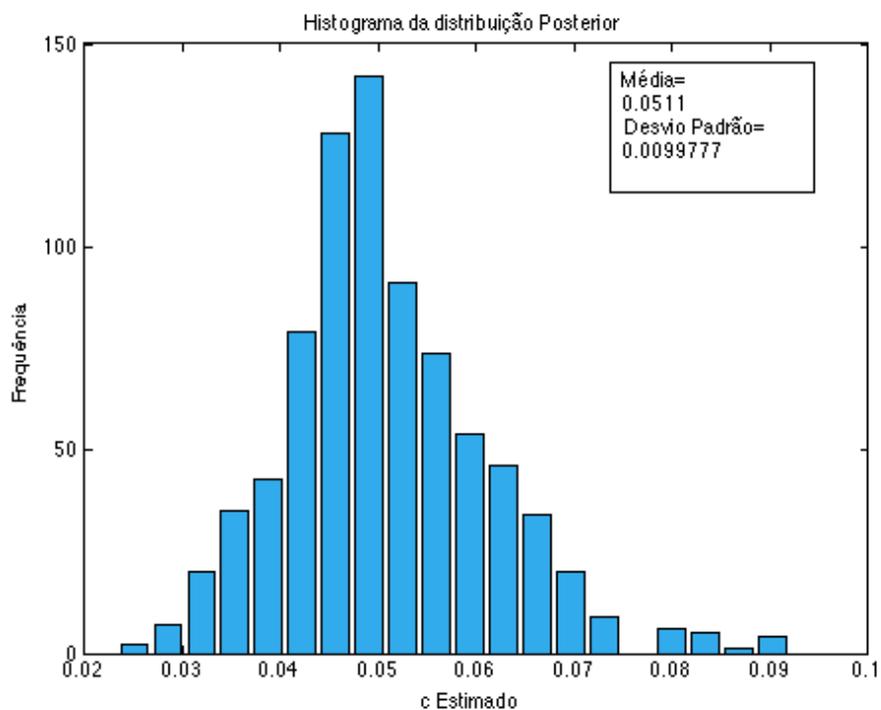


Figura 55 – Histograma da densidade de probabilidade posterior para o Caso 8.