

4

Inferência e Otimização de Nanoestruturas

4.1

Introdução

Conforme apresentado no capítulo 2, os pesquisadores participantes do *Workshop NanoFrontiers*, em fevereiro de 2006, discutiram o desenvolvimento de um grande banco de dados para o armazenamento das informações relativas à Nanociência e Nanotecnologia (Schmidt, 2007). Este banco de dados seria acompanhado por ferramentas matemáticas e computacionais capazes de manipular os dados, fornecendo as respostas desejadas pelos especialistas. Todo este conjunto foi chamado de “nanoinformática”.

O objetivo da nanoinformática é proporcionar aos pesquisadores a possibilidade de encontrar e usar dados relevantes às suas pesquisas científicas. Para ilustrar esta ideia, pode-se imaginar o seguinte exemplo fictício:

Imagine que um pesquisador pretenda sintetizar uma determinada estrutura semicondutora para ser usada, por exemplo, em um novo sensor. O pesquisador em questão possui todos os equipamentos necessários e tem uma vaga ideia de como construir o dispositivo. Logo, o primeiro passo da pesquisa é procurar as referências bibliográficas distribuídas em diversos artigos de revistas publicadas em vários países. O pesquisador lerá uma grande parte destes artigos, colhendo algumas informações. Aliando os dados obtidos nos artigos e o conhecimento e a experiência do pesquisador, este decide quais parâmetros usar na síntese da nanoestrutura.

A nanoinformática visa proporcionar uma dinâmica maior na obtenção dos dados usados neste tipo de pesquisa, evitando uma busca longa e, muitas vezes, ineficiente dos dados desejados.

Contudo, mesmo que o pesquisador obtenha os dados desejados de maneira rápida e eficiente, ele escolherá um conjunto de dados a ser usado na síntese dos nanodispositivos descritos acima através de uma heurística de “tentativa e erro”, baseada nos seus conhecimentos e nos dados existentes na literatura. Esta alternativa quase sempre produz bons resultados, mas não necessariamente os melhores.

O objetivo deste capítulo é descrever a utilização de algumas das técnicas de Inteligência Computacional para o desenvolvimento de ferramentas capazes de

substituir de forma eficiente a heurística de “tentativa e erro”. O primeiro objetivo é criar um sistema de inferência, capaz de prever as características da nanoestrutura sintetizada com relação aos parâmetros usados na síntese. Este sistema permite que o pesquisador possa investigar como determinados parâmetros influenciam no crescimento da nanoestrutura sem, necessariamente, realizar o experimento. Isto permite uma economia de tempo e de recursos. O segundo objetivo é usar um sistema de otimização, juntamente com o sistema de inferência mencionado, para encontrar o conjunto de parâmetros ideais para a síntese da nanoestrutura desejada.

A seguir, os experimentos realizados serão descritos e discutidos.

4.2

Pontos Quânticos - PQ

A síntese de poços quânticos no início da década de 70 pode ser definida como o ponto de partida para o estudo das nanoestruturas semicondutoras. Um poço quântico é uma camada muito fina de semicondutor entre duas outras camadas semicondutoras com “*gap*” de energia maior. A movimentação de elétrons em um poço quântico só é permitida em duas dimensões (Steiner, 2004).

Na década de 80, o interesse das pesquisas em semicondutores se concentrou em estruturas com dimensionalidade ainda mais reduzida: confinamento em uma dimensão (fios quânticos) (Petroff, 1982) e confinamento em zero dimensões (pontos quânticos). Diferentemente dos poços quânticos e fios quânticos, os níveis de energia dos pontos quânticos são discretos. A figura 4.1 mostra as densidades de estados nos materiais semicondutores. De cima para baixo: *bulk*, poço quântico, fio quântico e ponto quântico.

Dispositivos baseados em pontos quânticos têm mostrado um grande potencial para superar os dispositivos utilizando poços quânticos no desenvolvimento de fotodetectores de infravermelho baseados em transições ópticas entre bandas, devido ao confinamento nas três dimensões que gera uma maior discretização dos níveis de energia (Bimberg, 1999) (Ryzhii, 2004). Além disso, os pontos quânticos propiciam a criação de lasers com propriedades diferenciadas (Steiner, 2004).

Diversas metodologias já foram usadas para criar estruturas com PQs. A criação de uma máscara posteriormente gravada na estrutura semicondutora foi um dos primeiros métodos implementados (Reed, 1986). Os principais problemas deste método são a baixa resolução lateral e os defeitos criados. Outra possibilidade, também envolvendo o uso de máscaras, permite que a nucleação só ocorra em determinadas posições, resultando em pirâmides tetraédricas ou hexagonais (Fukui, 1991) (Tachibana, 2000).

Provavelmente, os métodos mais usados para a formação de nanoestruturas são aqueles que tiram proveito do fenômeno de auto-organização em superfícies

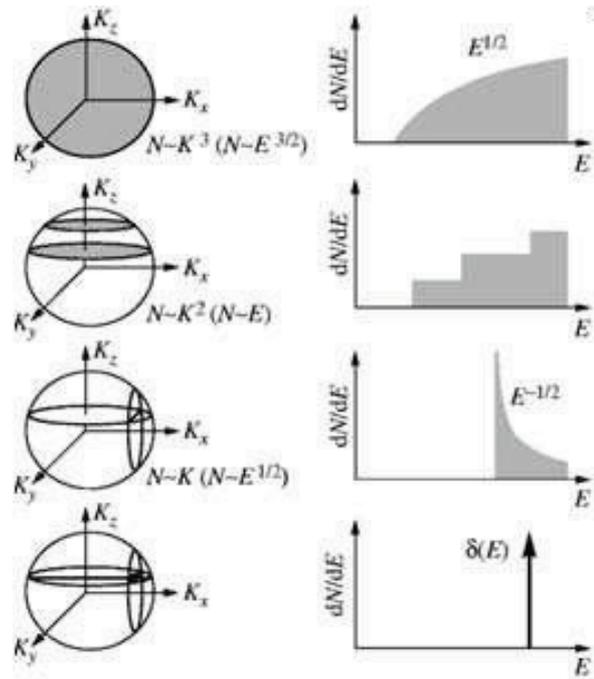


Figura 4.1: Densidade de estado nos materiais semicondutores. De cima para baixo: material *bulk*, poço quântico, fio quântico e ponto quântico.

crystalinas. O relaxamento da tensão provocada na interface entre diferentes materiais permite a formação dos pontos quânticos.

MBE e MOCVD são duas técnicas comumente usadas para o crescimento de vetores uniformes de PQs em três dimensões (Steiner, 2004). Tanto os sistemas com parâmetros de rede casados quanto aqueles descasados são usados para a formação das nanoestruturas. No caso de sistemas com parâmetros de rede casados, o crescimento é determinado pela relação entre as energias de duas superfícies e a energia da interface entre elas (Grundmann, 2002). Se a soma da energia da superfície da camada epitaxial (γ_f) com a energia da interface (γ_i) é menor que a energia da superfície do substrato (γ_s), ou seja, $\gamma_f + \gamma_i < \gamma_s$, o crescimento ocorre no modo Frank-van der Merwe, mostrado na figura 4.2(a). Alterando o valor da soma $\gamma_f + \gamma_i$, resulta em uma transição da forma de crescimento para o modo Volmer-Weber, onde ilhas 3D são formadas, como na figura 4.2(b).

No caso de parâmetros de rede descasados, tal como heteroestruturas GaAs/InAs, somente as primeiras poucas monocamadas depositadas formam camadas tensionadas com o parâmetro de rede igual àquele do substrato. Quando a espessura crítica é excedida, a tensão no topo da camada permite a formação espontânea de ilhas 3D aleatoriamente distribuídas. A fase de transição entre a estrutura epitaxial e o arranjo aleatório de ilhas é chamada de transição Stranski-Krastanov (Steiner, 2004). Este processo é mostrado na figura 4.2(c). Já a figura 4.3 mostra a imagem real de um ponto quântico.

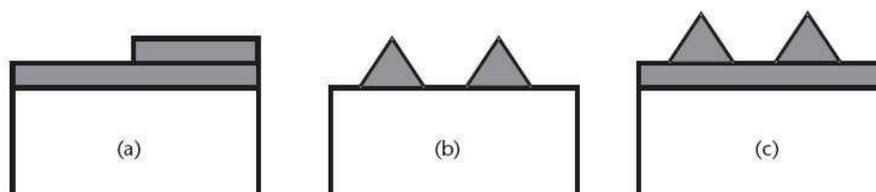


Figura 4.2: Diagrama de três formas de crescimento: Frank-van der Merwe (a), Volmer-Weber (b), Stranski-Krastanov (c).

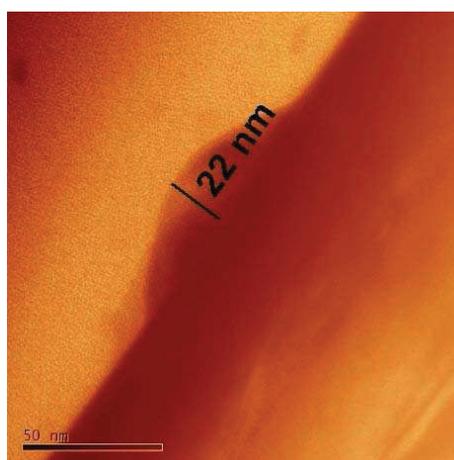


Figura 4.3: Imagem de um ponto quântico. Créditos Maurício Pamplona

As amostras usadas neste trabalho contêm uma camada de pontos quânticos de InAs automontados e aleatoriamente distribuídos. Tais PQs foram depositados por técnica *metalorganic vapor phase epitaxy* (MOVPE) a 100 mbar no topo de InP, InGaAs ou InGaAlAs, onde todas as ligas possuem parâmetros de rede semelhantes ao substrato de InP. Tais estruturas foram sintetizadas para serem usadas no desenvolvimento de fotodetectores de infravermelho (Souza, 2007). Normalmente, os pontos quânticos para este tipo de aplicação são crescidos sobre substratos de GaAs, devido aos custos reduzidos. Porém, o crescimento sobre um substrato de InP permite uma integração com dispositivos óticos de alta velocidade (Souza, 2007). A altura média e densidade dos pontos quânticos foram determinadas por um microscópio de força atômica (AFM). Difração de raios-X e fotoluminescência foram usadas para determinar a composição das ligas.

A seguir, a inferência e a otimização dos pontos quânticos crescidos por MOVPE serão discutidas.

4.2.1 Inferência

O controle do crescimento dos pontos quânticos é fundamental para o máximo desempenho dos dispositivos baseados nestas nanoestruturas. O crescimento de pontos quânticos com altura e dispersão bem definidas é essencial. A altura

dos pontos quânticos determina a diferença de energia entre os níveis permitidos e, conseqüentemente, o comprimento de onda de emissão ou detecção. Também é importante que todos os pontos quânticos crescidos no substrato tenham aproximadamente a mesma altura, limitando o comprimento de onda a um valor próximo do desejado. No caso de fotodetectores, quanto maior a densidade dos pontos quânticos melhor o funcionamento dos dispositivos, desde que os pontos tenham a altura desejada. Porém, a escolha do conjunto de parâmetros ideais para o crescimento dos pontos quânticos desejados é um dos grandes obstáculos enfrentados pelos pesquisadores.

A alternativa do uso de um método de “tentativa e erro” demanda uma quantidade significativa de tempo e recursos. Logo, o desenvolvimento de um sistema de inferência é extremamente valioso, diminuindo o número de experimentos e, conseqüentemente, o custo de fabricação.

O uso de Redes Neurais Artificiais já foi proposto para melhorar o desempenho do crescimento epitaxial, porém os autores não publicaram nenhum resultado (Bland, 2002).

Neste trabalho uma Rede Neural Artificial do tipo *MultiLayer Perceptron* (MLP) foi utilizada para inferir o resultado do crescimento de pontos quânticos. Foram usados dados de dezenas de experimentos realizados no laboratório de semicondutores (LABSEM) da PUC-Rio. A tabela com os valores dos experimentos são mostrados no anexo A.

Os seis parâmetros de entrada, relacionados ao crescimento em cada experimento, usados como entradas pela Rede Neural são: o fluxo de índio no reator, a temperatura de crescimento, o tempo de deposição, a espessura da camada sobre a qual os PQs são crescidos e as concentrações de índio e alumínio na camada citada. Os experimentos considerados usaram três materiais diferentes para a camada da base (InP, InGaAs, InAlGaAs). Como saídas obtêm-se a altura média dos pontos quânticos, o desvio padrão da altura e a densidade dos pontos quânticos. Obviamente, outros parâmetros também são importantes para o crescimento dos pontos quânticos, tais como a pressão e o tempo de aquecimento. Porém, na base de dados utilizada, estes parâmetros são constantes, sendo desnecessário usá-los como entrada para a rede neural.

Ao total três Redes Neurais diferentes foram criadas:

1. Rede para inferir altura média dos pontos quânticos, contendo 67 dados;
2. Rede para inferir a densidade dos pontos quânticos, contendo 61 dados;
3. Rede para inferir o desvio padrão da altura dos pontos quânticos, contendo 58 dados;

Para o caso 1 foi criada uma rede Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP) (Haykin, 1999) e os resultados são discutidos a seguir: esta Rede Neural utilizou os seis parâmetros de entrada previamente citados e contém três camadas distintas (entrada, escondida e saída). Todos os parâmetros de entrada foram normalizados de 0,1 a 0,9. A rede foi treinada com diferentes quantidades de neurônios na camada escondida. Porém, a melhor configuração possui seis neurônios na camada de entrada, a camada escondida possui onze neurônios e, finalmente, a camada de saída possui apenas um neurônio. A arquitetura da rede é mostrada na figura 4.4.

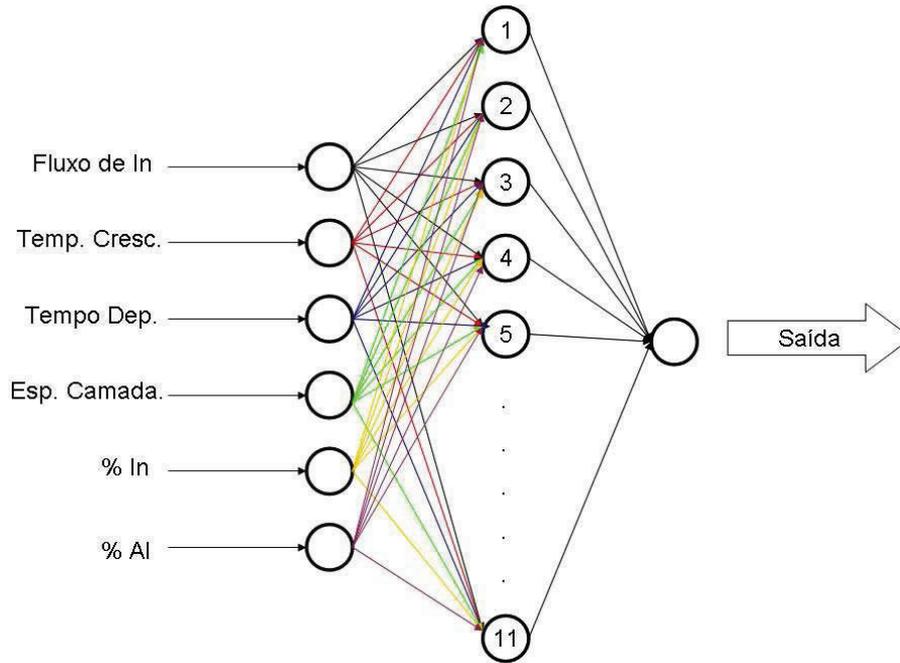


Figura 4.4: Arquitetura da Rede Neural para inferir a altura média dos pontos quânticos.

Para avaliar a rede neural criada foi utilizado o erro médio absoluto percentual (MAPE). Esta medida define o quanto os dados inferidos se aproximam dos dados reais. Por exemplo, um MAPE igual a 5 corresponde a um erro de 5% na inferência obtida pela rede. A fórmula do MAPE é apresentada na equação 4-1

$$MAPE = \frac{\sum_{t=1}^n |(s_t - s'_t)/s_t|}{n} \quad (4-1)$$

onde, s_t é o valor desejado, s'_t é o valor obtido pelo modelo e n é o número de elementos.

A figura 4.5 mostra a comparação entre os dados previstos pela Rede Neural e os valores obtidos pela imagem fornecida por um AFM. Os valores previstos pela rede neural estão destacados em vermelho e estão bem próximos aos dados experimentais. Os dados usados para treinamento e validação da rede estão na região branca. Os valores na região cinza foram usados para testar a rede após o treinamento. Estes últimos valores não foram apresentados à rede durante o

treinamento ou validação. O erro médio percentual obtido pelo conjunto de teste foi de apenas 8,3%, o que pode ser considerado um resultado excepcional devido ao conjunto reduzido de dados usados para o treinamento da rede neural.

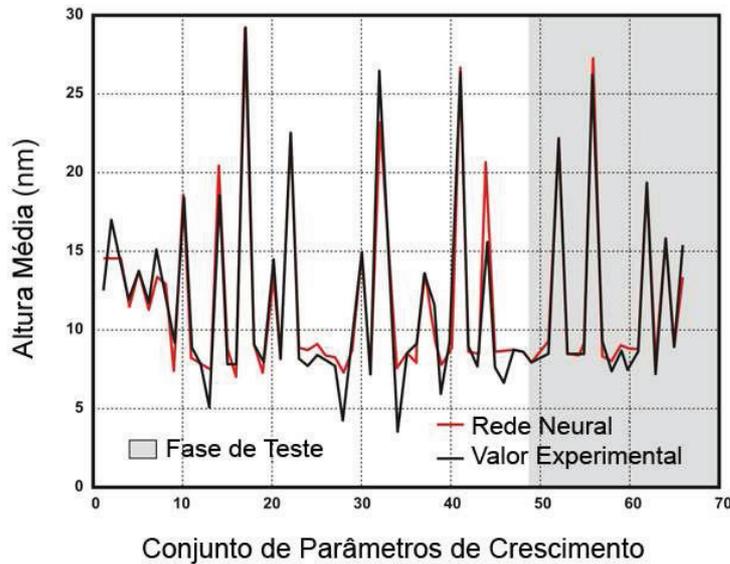


Figura 4.5: Comparação entre as medidas feitas por um AFM e as previsões obtidas pela RNA.

Devido à capacidade de generalização da Rede Neural, após a sua criação, esta pode ser usada para investigar a influência dos parâmetros de entrada no crescimento dos pontos quânticos. Isto pode ser obtido variando dois parâmetros de entrada e fixando os outros quatro. A figura 4.6 mostra a variação da altura média dos pontos quânticos em razão do tempo de deposição e composição de alumínio. Os demais parâmetros foram fixados com os valores apresentados na tabela 4.1.

Parâmetro	Valor
Fluxo de In	60 sccm
Espessura da Base	500 nm
Temperatura de Crescimento	500°C
Composição de In	52,3%

Tabela 4.1: Valores fixados para gerar a figura 4.6.

Observe na figura 4.6 que quando a concentração de Al aumenta até 13%, há uma clara tendência na redução da altura média dos PQs. A partir deste patamar, a altura cresce continuamente. Este comportamento já foi observado experimentalmente e a altura mínima foi obtida quando a concentração de Al atingiu 16% em uma liga de InGaAlAs crescida em InP (Borgstrom, 2003). Na mesma figura, pode-se observar que a altura média dos pontos quânticos aumenta com o tempo de deposição. Isto é esperado, já que o PQ tem mais tempo para crescer. A comparação com os resultados experimentais já publicados confirmam que os valores

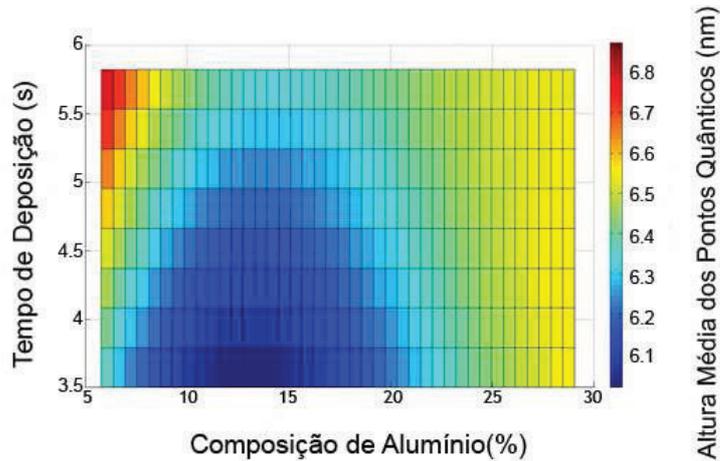


Figura 4.6: Variação da altura média dos pontos quânticos com relação ao tempo de deposição e à composição de alumínio.

obtidos neste trabalho são excelentes, mesmo usando um conjunto pequeno de dados experimentais.

Para o caso 2, ou seja, a inferência da densidade dos pontos quânticos, também foi criada uma rede MLP. Após a limpeza dos dados (eliminação de “outliers”, tratamento de dados duplicados, eliminação de dados incompletos, etc.) foram utilizadas as informações de 61 experimentos diferentes. A rede criada utilizou as mesmas 6 informações de entrada. Contudo, devido à pouca quantidade de dados diferentes, as entradas relacionadas ao fluxo de índio e espessura da camada foram classificadas em 3 e 4 categorias diferentes, respectivamente. Os demais dados de entrada continuam sendo normalizados entre 0,1 e 0,9. Diferentemente da rede obtida no caso 1, a melhor rede encontrada para a inferência da densidade dos pontos quânticos possui treze neurônios na camada escondida.

A figura 4.7 apresenta o resultado da inferência da densidade dos pontos quânticos. Os dois primeiros gráficos são referentes aos conjuntos de treinamento e validação, respectivamente. O último gráfico apresenta o resultado do conjunto de teste, ou seja, o conjunto de dados que não foi apresentado à rede neural durante a sua criação. Observe que o MAPE resultante foi de 21,47%. Claramente, o valor obtido é bastante superior ao apresentado pela rede responsável pela inferência da altura dos pontos quânticos. As principais razões para este aumento significativo do erro são: a redução do número de dados disponíveis e a características dos dados experimentais.

Apesar do aumento do erro de previsão, o resultado obtido é satisfatório e pode ser usado pelos especialistas na previsão da densidade dos pontos quânticos. Outro dado importante apresentado no gráfico diz respeito ao valor da correlação entre os dados experimentais e os dados previstos. Este dado mede o quão bem a

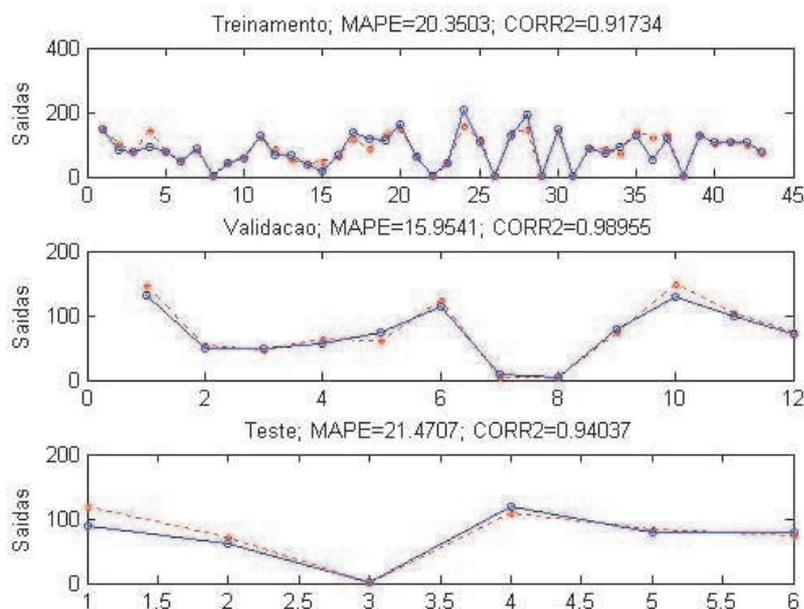


Figura 4.7: Resultado da inferência da densidade de pontos quânticos. De cima para baixo: conjuntos de treinamento, validação e teste.

variação dos dados de saída é explicada pela Rede Neural, ou seja, a tendência de aumento ou diminuição da densidade dos pontos quânticos. Valores de correlação acima de 0,9 indicam uma boa concordância entre os dados experimentais e previstos. Na figura 4.7 pode-se observar uma correlação de 0,94 para os dados de teste e a figura mostra claramente que a rede neural é capaz de prever com sucesso a tendência na variação da densidade.

Finalmente, o caso 3 trata da inferência do desvio na altura dos pontos quânticos. Esta rede possui uma configuração bastante semelhante à rede do caso 2. Porém, possui apenas oito neurônios na camada escondida e 58 dados experimentais foram utilizados. O resultado da inferência pode ser observado na figura 4.8.

O MAPE do conjunto de teste da melhor rede encontrada é de 17,24% e a correlação é igual a 0,9. Estes valores indicam que a rede neural criada é eficiente para prever o comportamento do desvio de altura dos pontos quânticos.

Os resultados acima apresentam três redes neurais diferentes para inferir diferentes propriedades da síntese de pontos quânticos. Todos os três resultados são satisfatórios, porém a rede neural para a inferência da altura obteve os melhores resultados. Apesar das outras duas redes apresentarem resultados inferiores, estes ainda podem ser considerados valiosos, auxiliando os especialistas na síntese de novas nanoestruturas.

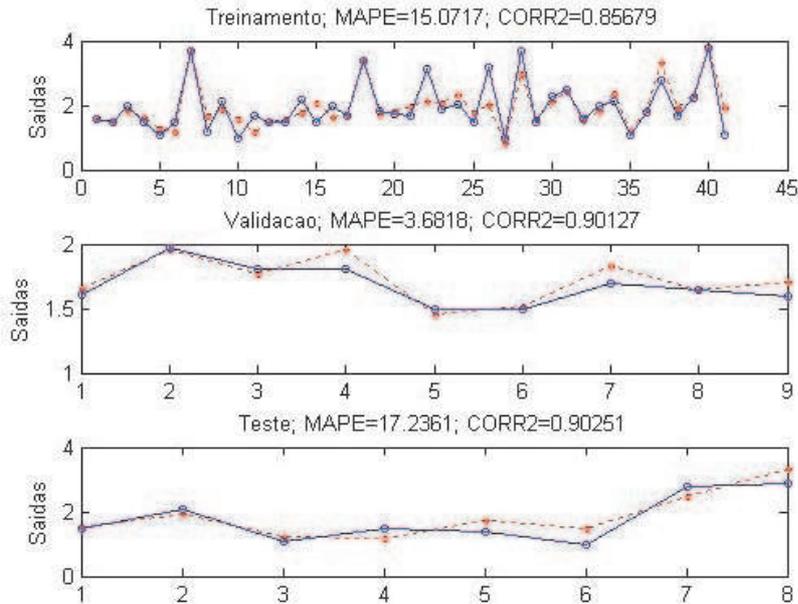


Figura 4.8: Resultado da inferência do desvio da altura dos pontos quânticos. De cima para baixo: conjuntos de treinamento, validação e teste.

4.2.2 Otimização

Após a criação, validação e teste da Rede Neural do caso 1, um Algoritmo Genético (AG) é usado para encontrar o conjunto de parâmetros de entrada que minimizam a altura média dos PQs. Neste caso, a RNA funciona como um simulador e avalia os conjuntos de parâmetros gerados pelo AG. A figura 4.9 ilustra este procedimento.

O cromossomo utilizado possui seis genes (um para cada parâmetro) e cada um deles pode assumir valores entre 0,1 e 0,9, devido à normalização dos parâmetros para o treinamento da RNA. O critério de parada do AG foi atingir um total de 500 gerações, porém o algoritmo convergiu com 200 gerações. A figura 4.10 mostra a curva de evolução do AG. A melhor configuração encontrada foi uma liga de In-GaAlAs, cuja altura média dos PQs prevista foi de 4,5nm. O conjunto de parâmetros ótimo que levou a tal resultado é mostrado na tabela 4.2.

4.3 Nanocompósitos

Os materiais podem ser divididos em quatro categorias diferentes: metais, polímeros, cerâmicos e compósitos (Gibson, 1994). Um compósito é composto de dois ou mais materiais individuais das outras três categorias. O objetivo da formação de um compósito é obter uma combinação de propriedades que não

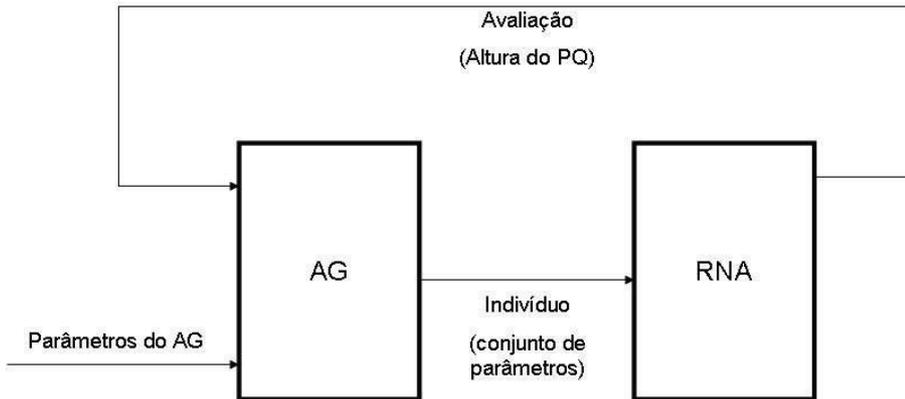


Figura 4.9: Procedimento de otimização dos parâmetros para síntese de pontos quânticos.

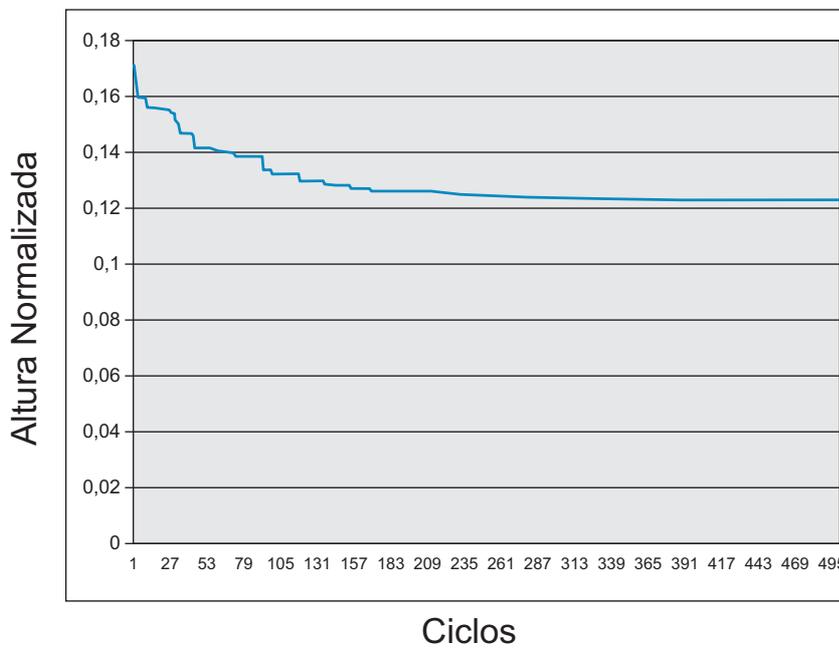


Figura 4.10: Curva da evolução da otimização dos PQ.

Parâmetro	Valor
Fluxo de In	60 sccm
Espessura da Base	1,5 nm
Temperatura de Crescimento	519, 8°C
Tempo de deposição	2,4 s
Composição de In	53,44%
Composição de Al	21,79%

Tabela 4.2: Conjunto ótimo de parâmetros encontrado pelo AG.

podem ser encontradas em nenhum material isoladamente, além de aproveitar as melhores características dos materiais componentes. Alguns materiais que ocorrem naturalmente também são considerados compósitos, dentre eles podemos citar a madeira e o osso (Callister, 1993).

Um material compósito, tal como será considerado neste trabalho, é um material de múltiplas fases que é criado artificialmente e não ocorre naturalmente. Além disso, as fases constituintes devem ser quimicamente dissimilares e separadas por uma interface distinta. Logo, as ligas metálicas e os materiais cerâmicos não se encaixam nesta definição porque suas múltiplas fases são formadas como consequência de fenômenos naturais.

Ao projetar um material compósito, cientistas e engenheiros tem engenhosamente combinado vários metais, cerâmicos e polímeros para produzir uma nova geração de materiais extraordinários. Os compósitos têm sido criados para melhorar a combinação de características mecânicas, tais como tensão, dureza e flexibilidade, além de outras propriedades.

Muitos dos materiais poliméricos são formados por apenas duas fases. A primeira é chamada de matriz, que é contínua e contorna a segunda fase, frequentemente chamada de fase dispersa ou carga. As propriedades dos compósitos são obtidas em função das propriedades dos materiais constituintes e suas concentrações.

Um dos compósitos mais comuns é a fibra de vidro, onde fibras de vidro puras e pequenas são misturadas a um material polimérico (normalmente um epóxi ou poliéster). A fibra de vidro pura é relativamente resistente e dura, mas quebradiça. Já o polímero é dúctil, mas pouco resistente e flexível. O compósito de fibra de vidro resultante da mistura dos materiais é resistente, forte, flexível e dúctil. Além disso, possui baixa densidade.

Outro material tecnologicamente importante é a fibra de carbono misturada com polímero (CFRP). Este material é mais resistente e forte que a fibra de vidro, porém é mais caro. Os compósitos CFRP são usados em aviões, foguetes, carros, etc.

Quando a carga usada para a formação do compósito é constituída por partículas na escala nanométrica, o material é conhecido como nanocompósito. Neste caso, a porcentagem por massa da carga que deve ser inserido para a formação do compósito é muito menor que a porcentagem necessária quando utilizadas partículas normais, em escala maior. Isto se deve, principalmente, à grande área de superfície obtida pelas nanopartículas, como foi discutido no capítulo 2. Além disso, as nanopartículas podem propiciar a formação de materiais com propriedades diferenciadas. A adição de nanotubos em uma matriz polimérica, por exemplo, pode aumentar significativamente a condutividade térmica e elétrica do material.

Em termos taxonômicos os nanocompósitos mantêm a mesma lógica de

classificação dos compósitos tradicionais, podendo ser: esféricos, baculiformes ou lamelares, tendo como exemplo a sílica, o nanotubo de carbono e a montemorrilonita, respectivamente.

Modelos numéricos e analíticos são ferramentas essenciais para estudar o controle de parâmetros responsáveis pelas propriedades de compósitos e nanocompósitos. Muitos modelos existentes mostram que o módulo das partículas, a razão de aspecto e a fração volumétrica são fatores que influenciam as propriedades mecânicas de compósitos e nanocompósitos (Fornes, 2003, Wang, 2004a, Wang, 2004b). Porém, apesar dos vários trabalhos sobre as propriedades dos nanocompósitos, o entendimento da relação entre o comportamento macroscópico e as propriedades das nanoestruturas é uma questão ainda indefinida. Atualmente, diversos modelos analíticos são baseados na regra de misturas (Pal, 2008). Tais modelos funcionam para algumas combinações específicas de matrizes e cargas, mas não funcionam corretamente quando a concentração de carga aumenta. Além disso, sabe-se que a relação entre o volume de carga e as propriedades mecânicas de um nanocompósito tem um comportamento não-linear.

A seguir a inferência e a otimização de nanocompósitos serão descritas e discutidas.

4.3.1 Inferência

A inferência de nanocompósitos pode se feita de maneira semelhante ao já descrito sobre a inferência de pontos quânticos. Neste caso, também foi usada uma rede Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP). O número de neurônios nas camadas escondidas foi variado para obter a melhor configuração da rede, ou seja, aquela com o menor erro na validação. A melhor rede apresenta 2 camadas escondidas, além das camadas de entrada e saída. O número de neurônios na primeira e segunda camadas escondidas é igual a oito e dois, respectivamente. A figura 4.11 mostra a arquitetura da rede para este caso.

Os parâmetros de entrada utilizados para a inferência dos nanocompósitos são: o tipo da matriz, o tipo da carga, a concentração em massa da carga (%wt), o diâmetro e a razão de aspecto da carga. Os dois primeiros parâmetros são qualitativos, enquanto os demais são quantitativos. Os parâmetros foram normalizados conforme é mostrado na tabela 4.3. A concentração da carga e o módulo de Young relativo foram normalizados de maneira diferente com o intuito de permitir uma pequena extrapolação dos valores da base de dados.

Ao contrário do modelo sobre os pontos quânticos, cujos dados usados foram obtidos de um único laboratório, os valores utilizados para a inferência dos nanocompósitos foram obtidos de diversos trabalhos publicados na literatura.

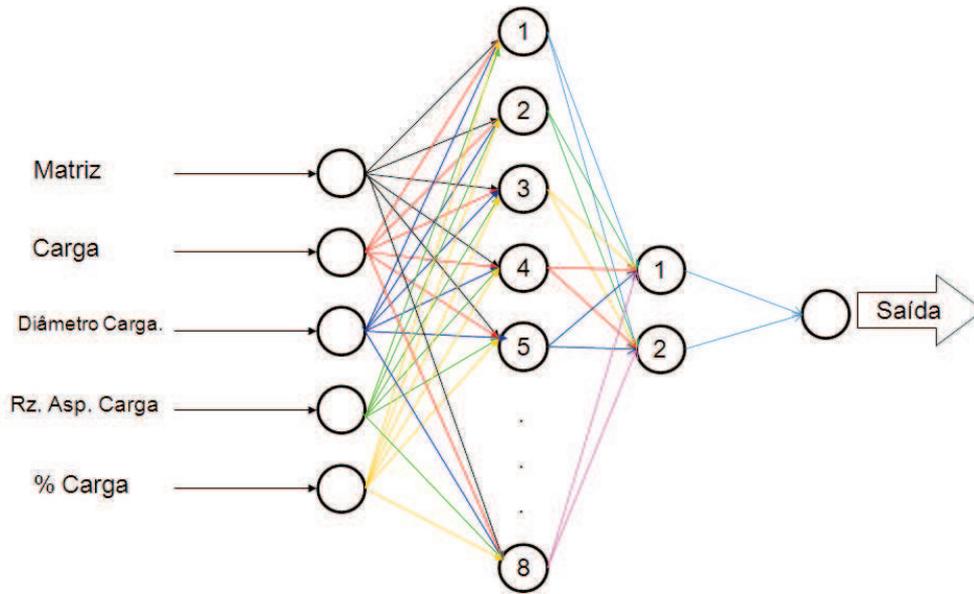


Figura 4.11: Arquitetura da Rede Neural para inferir o módulo de Young de Nanocompósitos.

Propriedade	Normalização
Classe da Matriz	[0, 1]
Classe da Carga	[0, 1]
Diâmetro da Carga	[0, 1]
Razão de Aspecto da Carga	[0, 1]
Concentração da Carga	[0, 0,9]
Módulo de Young Relativo	[0,1, 0,9]

Tabela 4.3: Normalização dos dados para a RNA.

Alguns dos parâmetros usados foram obtidos de gráficos e, conseqüentemente, possuem um ruído associado. Tal ruído não é suficiente para levar a RNA a ter um mau funcionamento. O apêndice B apresenta uma tabela com todos os dados utilizados e suas respectivas origens.

A obtenção de dados na literatura não é uma tarefa trivial, devido às diferentes abordagens nas diversas pesquisas. A propriedade escolhida para ser inferida neste trabalho é o módulo de Young, por ser a mais encontrada na literatura. O módulo de Young é um parâmetro mecânico que proporciona uma medida da rigidez de um material sólido. O valor é obtido da razão entre a tensão exercida e a deformação unitária do material, como mostrado na equação 4-2. A unidade de medida é o Pascal.

$$E = \frac{Tenso}{Deformao} \quad (4-2)$$

Os dados utilizados são muito heterogêneos, totalizando treze diferentes tipos de matrizes e dezoito de cargas, conforme pode ser visto no apêndice B.

A figura 4.12 apresenta o resultado da melhor rede encontrada. O primeiro

gráfico corresponde ao conjunto de treinamento, o segundo ao conjunto de validação e o terceiro ao conjunto de testes.

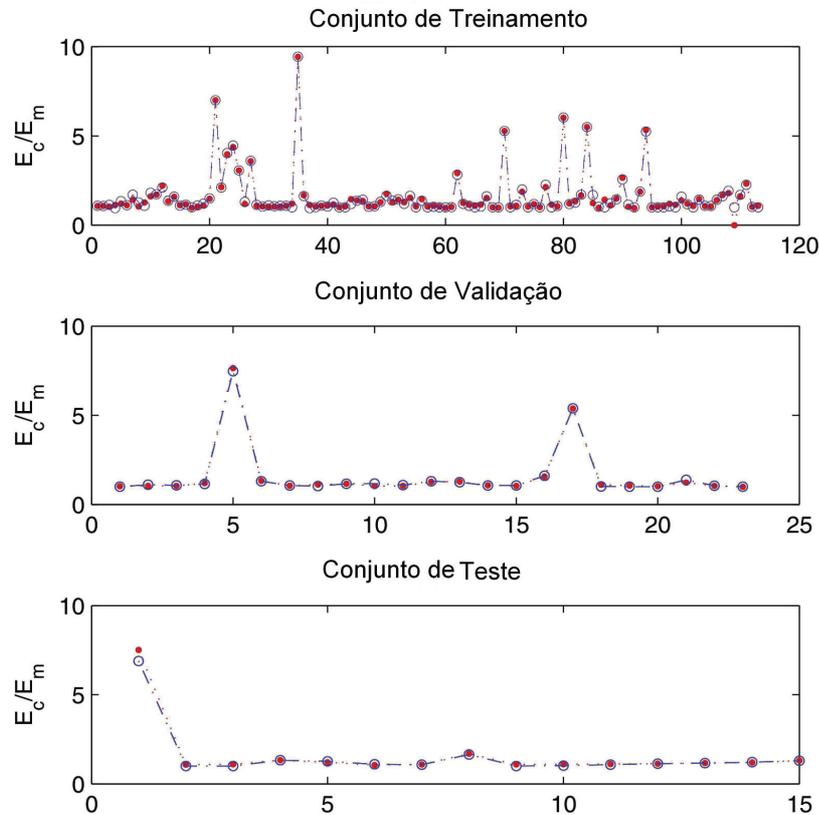


Figura 4.12: Comparação entre os valores da literatura e as previsões obtidas pela RNA.

Os dados em vermelho são os previstos pela Rede Neural. É importante ressaltar, mais uma vez, que o conjunto de teste não é apresentado à rede durante a fase de treinamento. O MAPE obtido pelo conjunto de teste é de 3,93 % e a correlação é igual a 0,999. Portanto, pode-se concluir que o comportamento previsto pela RNA é muito semelhante ao comportamento experimental. Além disso, os últimos sete dados do conjunto de teste possuem uma combinação de matriz e carga que nunca foi apresentada à rede. Contudo, a RNA criada foi capaz de inferir os valores de uma combinação desconhecida com um erro muito pequeno. Isto permite que os pesquisadores possam prever o comportamento de uma combinação de dois materiais que ainda não foi realizado experimentalmente.

Finalmente, de posse de uma RNA bem treinada, pode-se ter ideia da variação do módulo de Young relativo (E/E_c) em relação a qualquer parâmetro de entrada usado na criação da rede. Por exemplo, a figura 4.13 apresenta a saída da rede para uma combinação contendo poli(metil metacrilato) (PMMA) com nanofibras

de carbono com *razão de aspecto* igual a 100. Neste caso, apenas o diâmetro e a concentração da carga foram variados. A figura mostra que quanto menor a partícula, menor a concentração de carga necessária para obter um alto valor do módulo de Young relativo. Além disso, quando as partículas menores alcançam altas concentrações o módulo de Young diminui. Isto pode ser explicado pela agregação destas partículas, gerando partículas maiores e, portanto, agindo como micro partículas e não mais como nanopartículas.

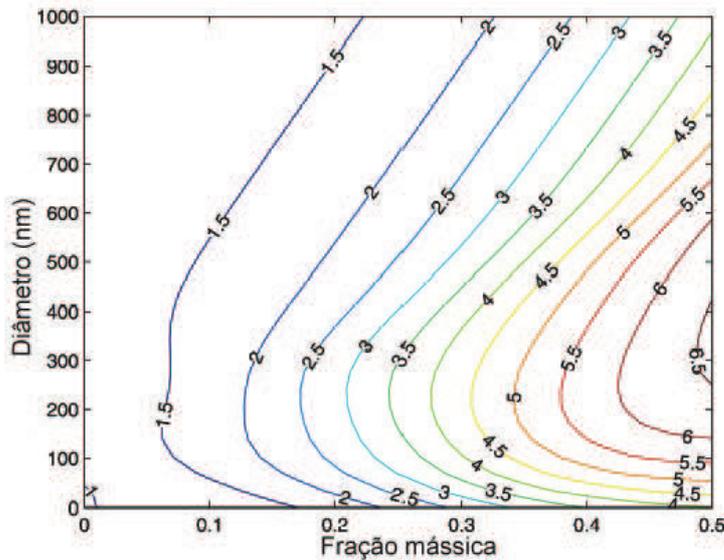


Figura 4.13: Inferência de um compósito de PMMA/CNF

A Rede Neural criada foi comparada a diferentes modelos apresentados na literatura. Em (Pal, 2008), os autores usam quatro conjuntos diferentes de compósitos para discutir seis modelos. Dois destes modelos são as regras de mistura de Voigt e Reuss e os outros quatro modelos são descritos em função dos módulos de cisalhamento e do material maciço dos compósitos. As figuras 4.14-4.17 apresentam a comparação entre os seis modelos apresentados em (Pal, 2008) e a RNA criada neste trabalho. Neste caso, o resultado da RNA é apresentado nas figuras como modelo V.

Na figura 4.14, um nanocompósito de argila orgânica (bis(hydroxyl ethyl)-(methyl)) com “nylon-6” (Fornes, 2003) é usado para comparar os modelos. Neste caso, uma concentração muito baixa de carga (máximo de 3% de fração volumétrica) é usada. Como pode ser visto, neste intervalo de concentração a variabilidade de dados é aproximadamente linear e o modelo III apresenta o melhor resultado.

A Figura 4.15 apresenta um compósito de montemorilonita com SBR (“Styrene Butadiene Rubber”) (Zhang, 2004). Neste caso uma fração volumétrica maior é considerada, apresentando um comportamento não linear. Claramente, a RNA é superior aos outros 6 modelos apresentados por (Pal, 2008).

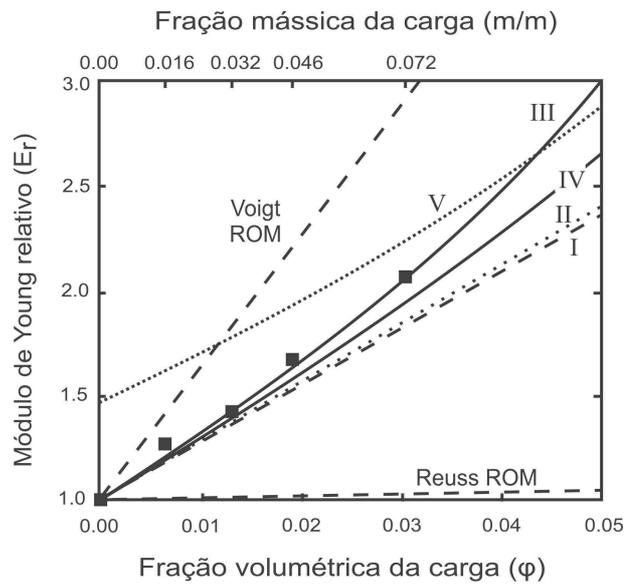


Figura 4.14: Comparação de Modelos para o compósito de argila orgânica (bis(hydroxyl ethyl)-(methyl)) com “nylon-6”

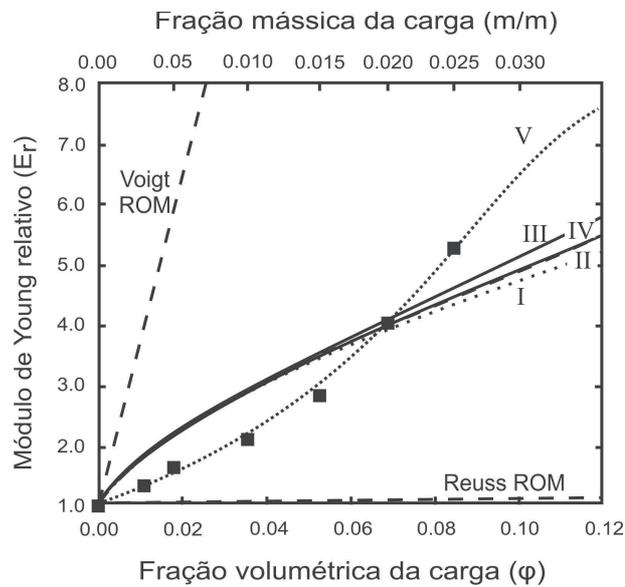


Figura 4.15: Comparação de Modelos para o compósito de montmorilonita com SBR

Já nas figuras 4.16 e 4.17, compósitos de argila montemorilonita com matrizes de NBR (“Nitrile Rubber”) (Zhang, 2004) e CNBR (“Carboxylated Acrylonitrile Butadiene Rubber”) (Wu, 2004) são mostradas, respectivamente. Novamente, um comportamento não linear é observado e a RNA é claramente superior aos outros modelos apresentados por (Pal, 2008).

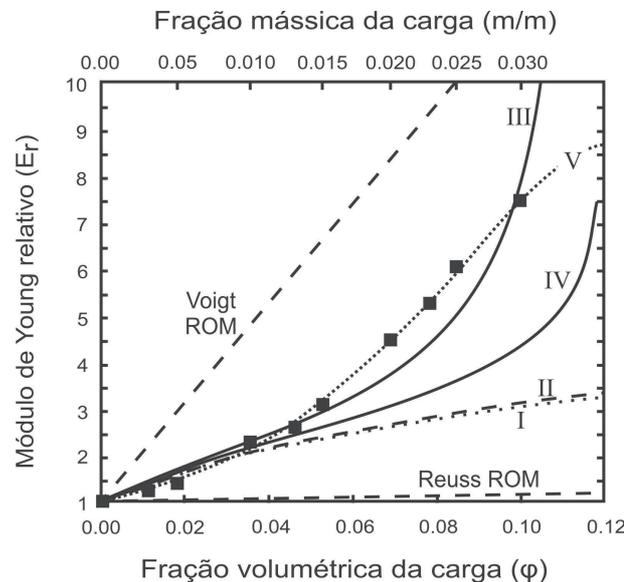


Figura 4.16: Comparação de Modelos para o compósito de montemorilonita com NBR

Os resultados descritos indicam que, em geral, a RNA é melhor que os modelos apresentados em (Pal, 2008) para inferir os resultados experimentais da variação do módulo de Young. Os modelos em (Pal, 2008) apenas apresentam melhor resultado para compósitos com baixa razão volumétrica de cargas. O pior desempenho da RNA, neste caso, pode ter sido causado pela baixa quantidade de dados usados em sua criação.

4.3.2 Otimização

De posse da melhor RNA obtida, um AG foi usado para encontrar a melhor configuração de modo a maximizar o módulo de Young relativo do nanocompósito.

A tabela 4.4 apresenta o resultados da execução do AG.

No processo de evolução do AG, o melhor resultado utiliza a matriz EGlass-PP juntamente com o nanotubo de carbono de parede dupla aminofuncionalizado. O diâmetro obtido para essa partícula é próximo ao mínimo possível (2,52 nm). A razão de aspecto da partícula obtida pelo AG é igual a 1065. A fração mássica não foi a máxima possível (0,11), pois o seu aumento produz uma diminuição na avaliação final do indivíduo.

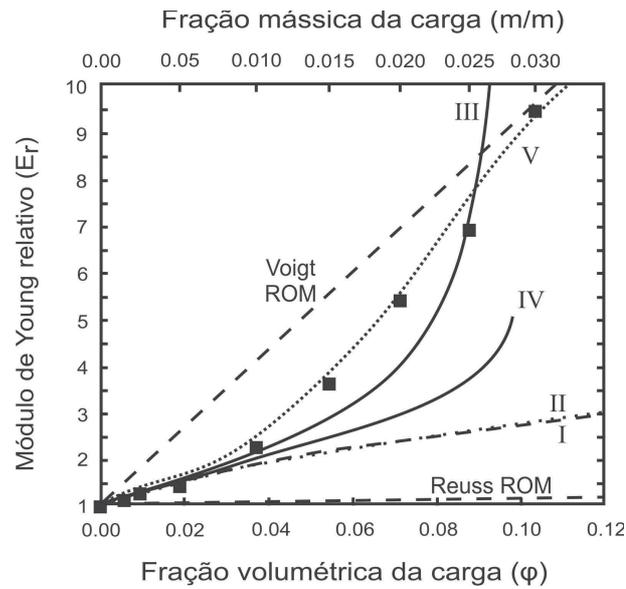


Figura 4.17: Comparação de Modelos para o compósito de montemorilonita com CNBR

Parâmetro	Valor
Matriz	EGlass-PP
Carga	nanotubo de carbono aminofuncionalizado
Fração mássica da Carga	0,11
Diâmetro	2,62 nm
Razão de Aspecto	1065
Módulo Relativo	22,26

Tabela 4.4: Resultado obtido pelo AG para o melhor nanocompósito.

O resultado obtido propõe a criação de um novo nanocompósitos, já que a combinação entre a matriz e a carga sugerida não existe no conjunto de dados usado. Tal resultado deve ainda ser validado experimentalmente, mas já fornece ao especialista uma boa sugestão de parâmetros para a criação de um bom material.