

Volume 51, 2011

Editores

Célia A. Zorzo Barcelos

Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Uberlândia, MG, Brasil

Eliana X.L. de Andrade

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

Maurílio Boaventura

Universidade Estadual Paulista - UNESP

São José do Rio Preto, SP, Brasil

A Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC publica, desde as primeiras edições do evento, monografias dos cursos que são ministrados nos CNMAC.

Para a comemoração dos 25 anos da SBMAC, que ocorreu durante o XXVI CNMAC, foi criada a série **Notas em Matemática Aplicada** para publicar as monografias dos minicursos ministrados nos CNMAC, o que permaneceu até o XXXIII CNMAC em 2010.

A partir de 2011, a série passa, também, a publicar livros nas áreas de interesse da SBMAC. Os autores que submeterem textos à série Notas em Matemática Aplicada devem estar cientes de que poderão ser convidados a ministrarem minicursos nos eventos patrocinados pela SBMAC, em especial nos CNMAC, sobre assunto a que se refere o texto.

O livro deve ser preparado em **Latex (compatível com o Miktex versão 2.7)**, as figuras em **eps** e deve ter entre **80 e 150 páginas**. O texto deve ser redigido de forma clara, acompanhado de uma excelente revisão bibliográfica e de **exercícios de verificação de aprendizagem** ao final de cada capítulo.

Veja outros títulos publicados em formato e-book na página

<http://www.sbmac.org.br/notas.php>



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

2011

PROBLEMAS INVERSOS EM TRANSFERÊNCIA DE CALOR

Hélcio Rangel Barreto Orlande
helcio@mecanica.ufrj.br

Marcelo José Colaço
colaco@mecanica.ufrj.br

Carolina Palma Naveira Cotta
cpncotta@hotmail.com

Departamento/Programa de Engenharia Mecânica, Politécnica/COPPE
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Gilmar Guimarães
gguima@mecanica.ufu.br

Valério Luiz Borges
vlborges@mecanica.ufu.br

Faculdade de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Uberlândia



Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional

São Carlos - SP, Brasil
2011

Coordenação Editorial: Elbert Einstein Nehrer Macau

Coordenação Editorial da Série: Eliana Xavier Linhares de Andrade

Editora: SBMAC

Capa: Matheus Botossi Trindade

Patrocínio: SBMAC

Copyright ©2011 by Hécio Rangel Barreto Orlande, Marcelo José Colaço, Carolina Palma Naveira Cotta, Gilmar Guimarães, Valério Luiz Borges. Direitos reservados, 2011 pela SBMAC. A publicação nesta série não impede o autor de publicar parte ou a totalidade da obra por outra editora, em qualquer meio, desde que faça citação à edição original.

Catálogo elaborado pela Biblioteca do IBILCE/UNESP
Bibiotecária: Maria Luiza Fernandes Jardim Froner

Orlande, Hécio R. B. Colaço, Marcelo J. Cotta, Carolina P. N. Guimarães, Gilmar Borges, Valério L.
Problemas Inversos em Transferência de Calor - São Carlos, SP : SBMAC, 2011, 113 p., 20.5 cm - (Notas em Matemática Aplicada; v. 51)

e-ISBN 978-85-86883-53-8

1. Problemas Inversos 2. Transferência de Calor 3. Aplicações
I. Orlande, H. R. B. II. Colaço, M. J. III. Cotta, C. P. N.
IV. Guimarães, G. V. Borges, V. L. VI. Título. VII. Série

CDD - 51

Conteúdo

Prefácio	7
1 Introdução	9
2 Técnicas de Solução de Problemas Inversos	13
2.1 Método de Levenberg-Marquardt	13
2.2 MGC para Estimativa de Parâmetros	16
2.3 MGC com Problema Adjunto	18
2.4 MGC para Estimativa de Funções via Adjunto	22
2.5 Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov	24
2.6 Identificação de Propriedades Termofísicas	26
2.7 Exercícios	40
3 Aplicação do MGC para Estimativa de Fluxos de Calor	43
3.1 Problema Direto	43
3.2 Problema Inverso	47
3.3 Problema de Sensibilidade	49
3.4 Problema Adjunto	51
3.5 Equações do Gradiente	53
3.6 Procedimento Iterativo	55
3.7 Critério de Parada	56
3.8 Resultados	57
3.9 Conclusões	65
4 Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov	67
4.1 Introdução	67
4.2 Problema Físico e Formulação Matemática	68
4.3 Dados Simulados	70
4.4 Problema Inverso via Inferência Bayesiana	72
4.5 Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov	73

4.6	Algoritmo Metropolis-Hastings	74
4.7	Amostrador de Gibbs	75
4.8	Metodologia de Solução	76
4.9	Resultados e Discussões	76
4.10	Conclusões	80
5	Identificação de Propriedades Termofísicas	93
5.1	Determinação de α e κ para o Aço Inox AISI 304	93
5.2	Determinação de α e κ para o PVC	99
	Bibliografia	105

Prefácio

O texto destas Notas em Matemática Aplicada contém, em sua grande parte, o material apresentado em um minicurso durante o Congresso de Matemática Aplicada e Computacional - CMAC-SUDESTE, realizado de 20 a 23 de Setembro de 2011, na Universidade Federal de Uberlândia. Este minicurso resulta de um gentil convite do Prof. Alessandro Alves Santana, Coordenador do Núcleo de Matemática Aplicada da Faculdade de Matemática da Universidade Federal de Uberlândia.

Problemas inversos em transferência de calor envolvem a estimativa de parâmetros ou funções desconhecidos que aparecem na formulação matemática de processos físicos em ciências térmicas, utilizando-se medidas de temperatura, fluxo de calor, intensidade de radiação, etc. Originalmente, problemas inversos em transferência de calor foram associados com a estimativa do fluxo de calor na superfície de um corpo, tomando-se medidas de temperatura em seu interior. No entanto, o desenvolvimento tecnológico atual requer, de um modo geral, o uso de experimentos complexos e de medidas indiretas, dentro do paradigma de problemas inversos. Assim, este tipo de análise é comumente encontrado em problemas que lidam com um ou múltiplos modos de transferência de calor, em fenômenos que podem abranger múltiplas escalas das variáveis independentes. Aplicações práticas vão desde a estimativa de parâmetros constantes, até a identificação de funções que variam espacialmente bem como ao longo do tempo. De fato, em uma busca recente no ISI Web of Knowledge, quase 12000 artigos aparecem sob o tópico *inverse problems* e cerca de 1300 artigos sob o tópico *inverse heat transfer*. Neste último tópico, aproximadamente 50% dos artigos publicados são classificados na área *engineering*. Portanto, o uso de problemas inversos é hoje uma ferramenta prática em engenharia térmica.

No texto são apresentados conceitos básicos sob problemas inversos, bem como técnicas robustas para sua solução. Não se teve por intenção fazer uma revisão de todas as técnicas de solução disponíveis, nem mesmo de compará-las. Ao contrário, procurou-se apresentar as técnicas com as quais os autores têm maior familiaridade e vêm obtendo excelentes resultados em diferentes problemas de interesse prático.

Exemplos de aplicação são apresentados e discutidos.

Rio de Janeiro, 18 de junho de 2011.

Hélcio Rangel Barreto Orlande
Gilmar Guimarães
Valério Luiz Borges
Marcelo José Colaço
Carolina Palma Naveira Cotta

Capítulo 1

Introdução

Problemas diretos em transferência de calor/massa têm por objetivo a determinação do campo de temperaturas/concentrações, sendo conhecidas a geometria em questão, as propriedades físicas que aparecem na formulação do problema, termos-fonte, bem como as condições de contorno e condição inicial.

Por outro lado, os *problemas inversos* em transferência de calor/massa visam determinar uma ou mais de uma das seguintes características: (i) propriedades físicas, por exemplo, condutividade térmica e coeficiente de difusão molecular; (ii) condições de contorno, tal como o fluxo de calor em uma superfície na qual sensores não podem ser localizados, por exemplo, em um pistão em motor de combustão interna; (iii) a geometria do problema, por exemplo, na otimização de perfis aerodinâmicos ou aletas; (iv) termos-fontes; e (v) condição inicial. Para tanto, é necessário conhecer-se medidas experimentais de temperatura/concentração. Sendo assim, os problemas inversos podem ser genericamente definidos como aqueles que têm por objetivo determinar "causas", à partir de medidas experimentais dos "efeitos" (por exemplo, temperatura). Na verdade, o estudo de problemas inversos faz parte de um novo paradigma de pesquisa, onde as simulações computacional e experimental não são realizadas isoladamente, mas sim de forma interativa, a fim de que o máximo de informação sobre o problema físico em questão seja obtido com as duas análises.

Problemas inversos são matematicamente classificados como mal-postos. Para um problema envolvendo uma equação diferencial ser considerado bem-posto, sua solução deve existir, ser única e ser estável [1, 2]. Em muitos casos, a solução do problema inverso existe e tal fato é justificado através da existência do fenômeno físico no qual o problema aparece. No entanto, só existe demonstração matemática da unicidade da solução do problema inverso para alguns casos especiais e geralmente este critério não é satisfeito. Além disso, a solução do problema inverso é

normalmente instável, o que significa que pequenas oscilações nos dados de entrada (por exemplo, temperaturas contendo erros experimentais) causam grandes oscilações na solução final. Desta forma, o desenvolvimento de métodos de solução de problemas inversos coincide com o avanço de métodos de análise de problemas mal-postos, o que ocorreu aproximadamente à partir dos anos 60. Na realidade, o problema inverso mal-posto é de um modo geral reformulado em termos de um problema bem-posto para que sua solução seja possível. Normalmente, o problema inverso é reformulado em termos de um problema de minimização. Atualmente, existem vários livros-texto que abordam diferentes métodos de solução de problemas inversos [7].

A solução de problemas inversos pode ser classificada como estimativa de parâmetros ou estimativa de função. Considere, como exemplo, um problema físico envolvendo uma placa plana de espessura adimensional unitária, com extremidades isoladas e inicialmente na temperatura nula. Para tempos $t > 0$, energia é liberada por uma fonte de calor plana localizada em $x = 0.5$, com intensidade desconhecida $g_p(t)$ e medidas de temperatura, tomadas por um sensor localizado em x_{meas} são usadas para a estimativa de $g_p(t)$. Se é sabido que $g_p(t)$ varia de acordo com um polinômio, isto é,

$$g_p(t) = P_1 + P_2t + P_3t^2 + \dots + P_Nt^{N-1} \quad (1.1)$$

a solução do problema inverso se reduz à estimativa dos parâmetros P_1, \dots, P_N . Neste caso, a solução é obtida através da minimização em um espaço de dimensão finita N , que é o número de parâmetros desconhecidos. Note que $g_p(t)$ pode ser representada na seguinte forma linear geral

$$g_p(t) = \sum_{j=1}^N P_j C_j(t) \quad (1.2)$$

onde $C_j(t)$ são funções de base conhecidas. A forma polinomial da equação (1.1) é um caso particular da forma geral (1.2). Outro exemplo de estimativa de parâmetros é aquele envolvendo a estimativa de propriedades físicas constantes, como condutividade térmica ou coeficiente de difusão molecular.

Por outro lado, se não existe informação à respeito da forma funcional de $g_p(t)$, a estimativa desta função é obtida através da minimização em um espaço de funções.

No próximo capítulo serão apresentados: (i) o *Método de Levenberg-Marquardt* de estimativa de parâmetros; (ii) o *Método do Gradiente Conjugado* de estimativa de parâmetros e funções; (iii) o *Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov*, dentro de uma abordagem Bayesiana; e (iv) o *Método de Identificação de Propriedades Termofísicas no Domínio da Frequência*, que utiliza a fundo a física do problema para a identificação adequada dos parâmetros [1-44]. O método do

gradiente conjugado de estimativa de parâmetros pode ser desenvolvido em duas versões, a saber: com matriz de sensibilidade ou com problemas adjunto e de sensibilidade. Desta forma, para melhor apresentação do texto utiliza-se a seguinte classificação dos métodos a serem descritos:

Técnica I: Método de Levenberg-Marquardt de Estimativa de Parâmetros;

Técnica II: Método do Gradiente Conjugado de Estimativa de Parâmetros;

Técnica III: Método do Gradiente Conjugado de Estimativa de Parâmetros com Problema Adjunto;

Técnica IV Método do Gradiente Conjugado de Estimativa de Funções com Problema Adjunto;

Técnica V: Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov;

Técnica IV: Método de Identificação de Propriedades Termofísicas no Domínio da Frequência;

Tais técnicas foram escolhidas para apresentação neste texto por serem suficientemente gerais, robustas, de fácil programação computacional e por serem facilmente adaptadas à diferentes situações físicas. Um ponto comum entre as técnicas abordadas aqui é a utilização de um procedimento de minimização de uma função-objetivo. Tal função-objetivo normalmente envolve a soma do quadrado das discrepâncias entre variáveis medidas e estimadas, como a norma de mínimos-quadrados, e algum tipo de termo de regularização. Cabe aqui, então, uma palavra de cautela ao leitor com relação à escolha desta função-objetivo. Apesar da norma de mínimos-quadrados ser indiscriminadamente utilizada como função-objetivo, ela só resulta em estimativas de máxima verossimilhança se as seguintes hipóteses estatísticas forem válidas [2, 4, 27, 28]: os erros nas variáveis medidas forem aditivos, não-correlacionados, com distribuição normal, média zero e desvio-padrão constante e conhecido; erros forem levados em consideração somente nas variáveis medidas que aparecem na função-objetivo; e não houverem informações a priori sobre os parâmetros a serem estimados, as quais são traduzidas na forma de distribuições estatísticas.

Embora popular e útil em muitas situações, a minimização da norma de mínimos-quadrados não é um estimador Bayesiano, o qual envolve a análise da densidade posterior de probabilidade. Essa é a densidade condicional de probabilidade dos parâmetros dadas as medidas, enquanto a verossimilhança é a densidade condicional das medidas dados os parâmetros [2, 4, 27, 28]. Supondo que os parâmetros e os erros de medida são variáveis randômicas independentes, com distribuições Gaussianas, médias e matrizes de covariâncias conhecidas, e que os erros de medida são aditivos, uma expressão analítica pode ser obtida para a densidade posterior

de probabilidade. Nesse caso, a estimativa dos parâmetros pode ser obtida através da maximização desta densidade de probabilidade, através da minimização de uma função objetivo que é chamada de maximum a posteriori [2, 4, 27, 28]. Por outro lado, em muitos casos a distribuição a priori para os parâmetros não possibilita um tratamento analítico para a distribuição a posteriori. Nesses casos, métodos de Monte Carlo com cadeias de Markov (MCMC) são usados em um processo de amostragem dos possíveis parâmetros, de modo que a inferência sobre a densidade posterior é obtida através de inferência sobre as amostras [2, 27, 28]. O número de amostras normalmente requerido para aproximar a distribuição de probabilidade é grande. Como resultado tem-se um custo computacional proibitivo para muitas aplicações práticas em que a solução do problema direto, necessária para o cálculo da distribuição de verossimilhança, requer grandes tempos computacionais. Uma possibilidade de redução de tempo computacional na aplicação de MCMC é a utilização de uma superfície de resposta aproximada, obtida a partir da interpolação da função de verossimilhança em alguns pontos criteriosamente escolhidos, conforme examinado na referência [40]. Na referência [40] utilizou-se funções de base radial para a interpolação da função de verossimilhança em todo espaço possível dos parâmetros. A função interpolada foi então utilizada no método MCMC, ao invés da função exata, resultando em redução do custo computacional de até 30 vezes.

Capítulo 2

Técnicas de Solução de Problemas Inversos

2.1 Técnica I: Método de Levenberg-Marquardt de Estimativa de Parâmetros

Este método foi desenvolvido em épocas diferentes por Levenberg [8] e por Marquardt [9]. Enquanto Levenberg [8] partiu de uma modificação da norma de mínimos-quadrados, a intenção de Marquardt [9] era obter um método que se aproximasse do método de Gauss na vizinhança do ponto de mínimo da função objetivo e se aproximasse do método do gradiente (steepest-descent) na vizinhança da estimativa inicial do processo iterativo. Considere que a intensidade do termo fonte, conforme o exemplo usado no capítulo anterior, seja representada segundo a forma dada pela equação (1.2). Considere também que I medidas de temperatura, $Y_i = Y(t_i)$, sejam disponíveis na posição x_{meas} nos tempos $t_i, i = 1, \dots, I$. Os N parâmetros $P_j, j = 1, \dots, N$, podem então ser estimados através da minimização da norma de mínimos-quadrados (supondo válidas as hipóteses estatísticas enumeradas acima), dada por

$$S(P) = \sum_{i=1}^I [Y_i - T_i(P)]^2 \quad (2.1)$$

onde

- S = norma de mínimos-quadrados;
- $P^t \equiv [P_1, P_2, P_3, \dots, P_N]$ = vetor com os parâmetros a serem estimados;

- $T_i \equiv T(P, t_i) =$ temperatura estimada no tempo t_i ;
- $Y_i \equiv Y(t_i) =$ temperatura estimada no tempo t_i ;
- $N =$ número de parâmetros desconhecidos;
- $I =$ número de medidas ($I \geq N$).

As temperaturas estimadas $T_i(P)$ são obtidas da solução do problema direto utilizando estimativas para os parâmetros P_j , $j = 1, \dots, N$. No problema físico ilustrado no capítulo anterior, a formulação matemática do problema direto, em termos de variáveis adimensionais, é dada por:

$$\frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + g_p(t)\delta(x - 0.5) = \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} \quad x \in (0, 1) \quad t > 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (2.3a)$$

$$\frac{\partial T(1, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 1 \quad t > 0 \quad (2.3b)$$

$$T(x, 0) = 0 \quad x \in (0, 1) \quad t = 0 \quad (2.3c)$$

A norma de mínimos quadrados dada pela equação (2.1) pode ser escrita na forma vetorial como

$$S(P) = [Y - T(P)]^T [Y - T(P)] \quad (2.4)$$

O processo iterativo do método de Levenberg-Marquardt para minimização das equações (2.1) ou (2.4) é dado por [4,7-14]:

$$P^{k+1} = P^k + (J^T J + \mu^k \Omega^k)^{-1} J^T [Y - T(P^k)] \quad (2.5)$$

onde

- $[Y - T(P)]^T = [Y_1 - T_1(P), Y_2 - T_2(P), \dots, Y_N - T_N(P)]$;
- k é o número de iterações;
- μ^k é um escalar positivo e;
- Ω^k é uma matriz diagonal que pode ser igual à matriz identidade ou à diagonal de $J^T J$.

A matriz J , denominada matriz de sensibilidade, é definida por

$$J(P) = \left[\frac{\partial T^T(P)}{\partial P} \right]^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_1}{\partial P_1} & \frac{\partial T_1}{\partial P_2} & \frac{\partial T_1}{\partial P_3} & \cdots & \frac{\partial T_1}{\partial P_N} \\ \frac{\partial T_2}{\partial P_1} & \frac{\partial T_2}{\partial P_2} & \frac{\partial T_2}{\partial P_3} & \cdots & \frac{\partial T_2}{\partial P_N} \\ \frac{\partial T_3}{\partial P_1} & \frac{\partial T_3}{\partial P_2} & \frac{\partial T_3}{\partial P_3} & \cdots & \frac{\partial T_3}{\partial P_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial T_I}{\partial P_1} & \frac{\partial T_I}{\partial P_2} & \frac{\partial T_I}{\partial P_3} & \cdots & \frac{\partial T_I}{\partial P_N} \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Os elementos da matriz de sensibilidade são denominados coeficientes de sensibilidade. Eles representam variações nas temperaturas com relação à variações nos parâmetros. É desejável que os coeficientes de sensibilidade tenham valores absolutos altos, de modo que pequenas variações nos parâmetros causem grandes variações na variável medida. Caso contrário, basicamente o mesmo valor de temperatura seria obtido para uma faixa grande de valores dos parâmetros e o problema de estimativa seria difícil. Além disso, a matriz $J^T J$ é singular e, portanto, o processo de estimativa de parâmetros é impossível, caso suas colunas sejam linearmente dependentes. Portanto, antes da solução do problema de estimativa de parâmetros, é necessário realizar-se uma análise da variação com o tempo dos coeficientes de sensibilidade. Assim, variáveis experimentais tais como localização e número de sensores, frequência de medidas, duração da experiência, etc., serão escolhidas de modo que os *coeficientes de sensibilidade sejam grandes em magnitude e linearmente independentes*. O determinante da matriz $J^T J$ é geralmente maximizado nesta pré-análise, no que é conhecido como D-optimal design [4, 6, 7].

O objetivo do termo $\mu^k \Omega^k$ no processo iterativo (2.5) é reduzir os efeitos do mal-condicionamento do problema inverso, que são matematicamente traduzidos pela matriz $J^T J$ ser praticamente singular. De um modo geral o problema é mal condicionado no início do processo iterativo e, portanto, o fator μ^k é relativamente grande nesta região, de tal forma que um passo bem pequeno é tomado na direção contrária à do gradiente de $S(P)$. À medida que o processo iterativo avança em direção ao mínimo de $S(P)$, e o problema torna-se melhor condicionado, o valor de μ^k é gradualmente reduzido e o método de Levenberg-Marquardt tende para o Método de Gauss ($\mu^k = 0$). Várias rotinas robustas, baseadas no , são disponíveis comercialmente, como por exemplo UNLSF, UNLSJ, BCLSF e BCLSJ do IMSL

[13].

Considerando que a temperatura medida é a única variável contendo erros experimentais e que tais erros são aditivos, com média zero, desvio-padrão constante, com distribuição normal e não correlacionados, pode-se demonstrar que a matriz de covariância dos parâmetros estimados é dada por [4]:

$$V \equiv \begin{bmatrix} \text{cov}(P_1, P_1) & \text{cov}(P_1, P_2) & \cdots & \text{cov}(P_1, P_N) \\ \text{cov}(P_2, P_1) & \text{cov}(P_2, P_2) & \cdots & \text{cov}(P_2, P_N) \\ \text{cov}(P_3, P_1) & \text{cov}(P_3, P_2) & \cdots & \text{cov}(P_3, P_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}(P_N, P_1) & \text{cov}(P_N, P_2) & \cdots & \text{cov}(P_N, P_N) \end{bmatrix} = (J^T J)^{-1} \sigma^2 \quad (2.7)$$

onde σ é o desvio padrão dos erros de medida.

Os desvios-padrão para os parâmetros estimados podem então ser obtidos da diagonal de V como

$$\sigma_{P_j} = \sqrt{\text{cov}(P_j, P_j)} = \sqrt{V_{jj}} \quad \text{para } j = 1, \dots, N \quad (2.8)$$

onde V_{jj} é o elemento de ordem j na diagonal de V , i.e.,

$$\sigma_{P_j} = \sigma \sqrt{[J^T J]_{jj}^{-1}} \quad \text{para } j = 1, \dots, N \quad (2.9)$$

Os intervalos de 99% de confiança são dados por

$$P_j \pm 2.576\sigma_{P_j} \quad \text{para } j = 1, \dots, N \quad (2.10)$$

O desenvolvimento apresentado acima, envolvendo medidas de um único sensor, pode ser facilmente estendido para análises envolvendo medidas de vários sensores [4, 7].

2.2 Técnica II: Método do Gradiente Conjugado para Estimativa de Parâmetros

Uma técnica alternativa ao uso do Método de Levenberg-Marquardt é aquela envolvendo o Método do Gradiente Conjugado de minimização da norma de mínimos-quadrados. O processo iterativo deste método é dado por [6, 7, 14–16]:

$$P^{k+1} = P^k - \beta^k d^k \quad (2.11)$$

onde β^k é o *passo de procura*, d^k é a *direção de procura* e o superescrito k indica o número de iterações. A direção de procura é dada por uma conjugação da direção

do gradiente, $\nabla S(P^k)$, e da direção de procura da iteração anterior, d^{k-1} . Ela é dada por

$$d^k = \nabla S(P^k) + \gamma^k d^{k-1} \quad (2.12)$$

O coeficiente de conjugação, γ^k , pode ser dado pela expressão de Polak-Ribiere :

$$\gamma^k = \begin{cases} 0 & , \quad k = 0 \\ \frac{\sum_{j=1}^N \{ [\nabla S(P^k)]_j [\nabla S(P^k) - \nabla S(P^{k-1})]_j \}}{\sum_{j=1}^N [\nabla S(P^{k-1})]_j^2} & , \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.13)$$

ou pela expressão de Fletcher-Reeves :

$$\gamma^k = \begin{cases} 0 & , \quad k = 0 \\ \frac{\sum_{j=1}^N [\nabla S(P^k)]_j^2}{\sum_{j=1}^N [\nabla S(P^{k-1})]_j^2} & , \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.14)$$

embora outras expressões possam ser encontradas na literatura [14].

Na referência [14] é feita uma comparação das diferentes versões do método do gradiente conjugado com o método de Levenberg-Marquardt, aplicados à estimativa das componentes de condutividade térmica de um sólido ortotrópico.

Ambas expressões para o coeficiente de conjugação apresentadas acima garantem que o ângulo entre a direção de procura e a direção positiva do gradiente é maior do que 90° , de modo que a minimização da norma de mínimos-quadrados é assegurada. A direção do gradiente é obtida da diferenciação das equações (2.1) ou (2.4) com relação aos parâmetros. Obtêm-se, então,

$$\nabla S(P^k) = -2(J^k)^T [Y - T(P^k)] \quad (2.15)$$

Pode-se notar que se $\gamma^k = 0$ para todas as iterações, a direção de procura torna-se a direção do gradiente e o método *steepest-descent* é obtido. Embora mais simples, tal método não converge tão rápido quanto o método do gradiente conjugado [6].

O passo de procura β^k é obtido pela minimização de $S(P^{k+1})$ com relação à β^k , i.e.,

$$\min_{\beta^k} S(P^{k+1}) = \min_{\beta^k} [Y - T(P^{k+1})]^T [Y - T(P^{k+1})] \quad (2.16)$$

Substituindo-se P^{k+1} dado pela equação (2.11) na equação (2.16), linearizando a temperatura estimada $T(P^{k+1})$ e fazendo a minimização, obtêm-se

$$\beta^k = \frac{\sum_{i=1}^I \left[\left(\frac{\partial T_i}{\partial P^k} \right)^T d^k \right] [T_i(P^k) - Y_i]}{\sum_{i=1}^I \left[\left(\frac{\partial T_i}{\partial P^k} \right)^T d^k \right]^2} \quad (2.17)$$

O método do gradiente conjugado utiliza a *técnica de regularização iterativa*, para que a solução do problema de estimativa não seja instável com relação a erros experimentais nas temperaturas medidas. Em tal técnica, o critério de parada do processo iterativo da equação (2.11) é dado pelo *Princípio de Discrepância* [6]. Neste caso, a solução para o problema de estimativa é aceita quando as diferenças entre as temperaturas estimadas e medidas são da mesma ordem dos erros experimentais, que são supostos conhecidos. O processo iterativo é então parado quando

$$S(P) < \varepsilon \quad (2.18)$$

A tolerância ε é obtida das equações (2.1) ou (2.2) fazendo $|Y - T(P)| = \sigma$, onde σ é o desvio-padrão dos erros de medida. Logo,

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^I \sigma^2 = I\sigma^2 \quad (2.19)$$

2.3 Técnica III: Método do Gradiente Conjugado para Estimativa de Parâmetros com Problema Adjunto

Deve-se notar que para a implementação do processo iterativo tanto da Técnica I, equação (2.5), quanto da Técnica II, equação (2.11), é necessário o cálculo da matriz de sensibilidade. Tal cálculo pode envolver grandes tempos computacionais, principalmente em problemas onde expressões analíticas não são disponíveis para os coeficientes de sensibilidade e estes são calculados por diferenças-finitas.

Na presente técnica, a matriz de sensibilidade não precisa ser calculada para implementação do processo iterativo dado pela equação (2.11). Por outro lado, dois problemas auxiliares denominados de *problema de sensibilidade* e *problema adjunto*, são resolvidos a cada iteração para o cálculo da direção do gradiente e do passo de procura. A técnica III é especialmente recomendada para casos envolvendo funções parametrizadas como, por exemplo, na forma dada pela equação (1.2). Para outros tipos de problemas de estimativa de parâmetros, como por exemplo, na estimativa da condutividade térmica ou do coeficiente de difusão, as técnicas I e II devem ser mais eficientes do que a técnica III.

A técnica III é composta dos seguintes passos básicos [6,7,16-26]:

- Problema Direto
- Problema Inverso
- Problema de Sensibilidade
- Problema Adjunto
- Direção do Gradiente
- Método do Gradiente Conjugado
- Critério de Parada
- Algoritmo Computacional

O *Problema Direto* envolve a estimativa do campo de temperaturas na placa quando a função $g_p(t)$ é conhecida. Sua formulação é dada pelas equações (2.2), (2.3a), (2.3b) e (2.3c). Por outro lado, no *Problema Inverso*, a função $g_p(t)$ é desconhecida e parametrizada na forma geral dada pela equação (1.2). O problema inverso é resolvido através da minimização da seguinte função objetivo:

$$S(P) = \int_{t=0}^{t_f} [Y(t) - T(x_{meas}, t; P)]^2 dt \quad (2.20)$$

onde, por conveniência, supõe-se que um número muito grande de medidas experimentais é disponível, de modo que elas possam ser tratadas como uma função contínua.

Para a obtenção do *Problema de Sensibilidade* supõe-se que a função $g_p(t)$ é perturbada de uma quantidade $\Delta g_p(t)$. Como a função $g_p(t)$ é parametrizada na forma (1.2), têm-se

$$\Delta g_p(t) = \sum_{j=1}^N \Delta P_j C_j(t) \quad (2.21)$$

Devido à perturbação $\Delta g_p(t)$, a temperatura $T(x, t)$ é perturbada de $\Delta T(x, t)$. O problema de sensibilidade para $\Delta T(x, t)$ é então dado por [6,7,16-26]:

$$\frac{\partial^2 \Delta T(x, t)}{\partial x^2} + \Delta g_p(t) \delta(x - 0.5) = \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial t} \quad x \in (0, 1) \quad t > 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \Delta T(0, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (2.23a)$$

$$\frac{\partial \Delta T(1, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 1 \quad t > 0 \quad (2.23b)$$

$$\Delta T(x, 0) = 0 \quad x \in (0, 1) \quad t = 0 \quad (2.23c)$$

Com o *Problema Adjunto* pode ser obtido o *Multiplicador de Lagrange* $\lambda(x, t)$. Tal multiplicador de Lagrange aparece na formulação porque a função objetivo (2.20) é minimizada sob a restrição de que $T(x_{meas}, t; P)$ seja solução do problema direto (2.2). O problema adjunto é dado por [6,7,16-26]:

$$\frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} + 2 [T(x, t; P) - Y(t)] \delta(x_{meas} - 0.5) = 0 \quad (2.24)$$

onde $x \in (0, 1)$ e $0 < t < t_f$,

$$\frac{\partial \lambda(0, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 0 \quad 0 < t < t_f \quad (2.25a)$$

$$\frac{\partial \lambda(1, t)}{\partial x} = 0 \quad x = 1 \quad 0 < t < t_f \quad (2.25b)$$

$$\lambda(x, 0) = 0 \quad x \in (0, 1) \quad t = t_f \quad (2.25c)$$

No desenvolvimento do problema adjunto, também é obtido o seguinte termo integral

$$\Delta S(P) = \int_{t=0}^{t_f} \lambda(0.5, t) \Delta g_p(t) dt \quad (2.26)$$

Substituindo a equação (2.21) na equação (2.26) tem-se

$$\Delta S(P) = \sum_{j=1}^N \left\{ \left[\int_{t=0}^{t_f} \lambda(0.5, t) C_j(t) dt \right] \Delta P_j \right\} \quad (2.27)$$

Por definição, a derivada direcional de $S(P)$ na direção de um vetor ΔP é dada por

$$\Delta S(P) = \sum_{j=1}^N [\nabla S(P)]_j \Delta P_j \quad (2.28)$$

onde $\Delta P = [\Delta P_1, \Delta P_2, \dots, \Delta P_N]$. Deve-se notar que não levou-se em conta o módulo do vetor $\nabla S(P)$ na equação (2.28), por não ser relevante para a análise.

Portanto, comparando-se as equações (2.27) e (2.28) pode-se obter a expressão para cada uma das j componentes do gradiente $\nabla S(P)$ para a função $S(P)$, na forma

$$[\nabla S(P)]_j = \int_{t=0}^{t_f} \lambda(0.5, t) C_j(t) dt \quad j = 1, \dots, N \quad (2.29)$$

Deve-se notar que a expressão para o gradiente dada pela equação (2.29) não envolve a matriz de sensibilidade como a equação (2.15) para a Técnica II, mas sim o multiplicador de Lagrange na posição da fonte de calor, $\lambda(0.5, t)$. O processo iterativo do *Método do Gradiente Conjugado* é dado pelas equações (2.11), (2.12), (2.13) e (2.14). No entanto, uma nova expressão não envolvendo a matriz de sensibilidade, mas sim a função de sensibilidade $\Delta T(x, t)$, pode ser obtida para o passo de procura. Tal expressão é dada por [6,7,16-26]:

$$\beta^k = \frac{\int_{t=0}^{t_f} [T(x_{meas}, t; P^k) - Y(t)] \Delta T(x_{meas}, t; d^k) dt}{\int_{t=0}^{t_f} [\Delta T(x_{meas}, t; d^k)]^2 dt} \quad (2.30)$$

Tal como na Técnica II, o critério de parada do processo iterativo é obtido do *princípio da discrepância*. O critério de parada é então dado por

$$S(P) < \varepsilon \quad (2.31)$$

onde $S(P)$ é agora calculado com a (2.20). A tolerância ε é também obtida da equação (2.20) supondo

$$|Y(t) - T(x_{meas}, t; P)| \approx \sigma \quad (2.32)$$

onde σ é o desvio-padrão dos erros de medida, o qual é suposto constante. Então a tolerância ε é determinada como:

$$\varepsilon = \sigma^2 t_f \quad (2.33)$$

As equações desenvolvidas acima podem ser arranjadas em um conveniente *algoritmo computacional* descrito nas referências [6,7,16-26].

2.4 Técnica IV: Método do Gradiente Conjugado para Estimativa de Funções com problema adjunto

Em várias situações físicas, a forma da função a ser estimada não é conhecida a priori. Nestes casos, é mais seguro e eficiente resolver o problema inverso como um problema de minimização em um espaço de funções de dimensão infinita, do que resolvê-lo em um espaço de parâmetros de dimensão finita N , como descrito anteriormente nas técnicas I, II e III.

O problema inverso de estimativa de função é então resolvido através da minimização do seguinte funcional

$$S[g_p(t)] = \int_{t=0}^{t_f} [Y(t) - T(x_{meas}, t; g_p(t))]^2 dt \quad (2.34)$$

O espaço funcional normalmente escolhido é aquele de funções cujo quadrado é integrável no domínio de interesse. No nosso problema-teste, tal domínio é $0 < t < t_f$. As funções neste espaço funcional $\mathcal{L}_2(0, t_f)$ satisfazem a seguinte propriedade:

$$\int_{t=0}^{t_f} [g_p(t)]^2 dt < \infty \quad (2.35)$$

Os passos básicos para a Técnica IV são muito semelhantes àqueles da Técnica III. As definições dos problemas direto, de sensibilidade e adjunto não se alteram e são dadas pelas equações (2.2), (2.3a)–(2.3c), (2.22), (2.23a)–(2.23c), (2.24) e (2.25a)–(2.25c), respectivamente. Da mesma forma, a (2.26) também é obtida durante a derivação do problema adjunto. No entanto, tal equação não pode ser comparada à (2.28) como na Técnica III, já que a variação da função não é mais

dada pela (2.21). Para $g_p(t)$ pertencente ao espaço $\mathcal{L}_2(0, t_f)$, a derivada direcional do funcional $S[g_p(t)]$ na direção da perturbação $\Delta g_p(t)$ é definida como:

$$\Delta S [g_p(t)] = \int_{t=0}^{t_f} \nabla S [g_p(t)] \Delta g_p(t) dt \quad (2.36)$$

Portanto, comparando-se as equações (2.26) e (2.36) obtêm-se a equação do gradiente na forma

$$\nabla S [g_p(t)] = \lambda(0.5, t) \quad (2.37)$$

O *processo iterativo* do Método do Gradiente Conjugado de Estimativa de Funções é dado por

$$g_p^{k+1}(t) = g_p^k(t) - \beta^k d^k(t) \quad (2.38)$$

onde a direção de procura $d^k(t)$ é obtida como

$$d^k(t) = \nabla S [g_p^k(t)] + \gamma^k d^{k-1}(t) \quad (2.39)$$

O coeficiente de conjugação γ^k pode ser obtido da expressão de Polak-Ribiere:

$$\gamma^k = \begin{cases} 0 & , \quad k = 0 \\ \frac{\int_{t=0}^{t_f} \nabla S [g_p^k(t)] \{ \nabla S [g_p^k(t)] - \nabla S [g_p^{k-1}(t)] \} dt}{\int_{t=0}^{t_f} \{ \nabla S [g_p^{k-1}(t)] \}^2 dt} & , \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.40)$$

ou da expressão de Fletcher-Reeves:

$$\gamma^k = \begin{cases} 0 & , \quad k = 0 \\ \frac{\int_{t=0}^{t_f} \{ \nabla S [g_p^k(t)] \}^2 dt}{\int_{t=0}^{t_f} \{ \nabla S [g_p^{k-1}(t)] \}^2 dt} & , \quad k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2.41)$$

Uma comparação das diversas versões do método do gradiente conjugado de estimativa de funções, envolvendo diferentes formas de cálculo do coeficiente de conjugação e da direção de procura, é apresentada na referência [22].

O passo de procura β_k é obtido de uma expressão análoga à equação (2.30). Da mesma forma que na técnica III, o critério de parada é dado pelo princípio de discrepância, equações (2.31), (2.32) e (2.33) [6,7,16-26].

2.5 Técnica V: Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov

A chamada estatística Bayesiana consiste fundamentalmente em utilizar-se toda informação disponível a fim de se reduzir a incerteza em problemas de inferência ou de tomada de decisão. À medida que nova informação torna-se disponível, ela é combinada com a informação prévia a fim de formar a base dos processos estatísticos. O mecanismo formal para combinar a nova informação com aquela anteriormente disponível é o Teorema de Bayes. Portanto, o termo Bayesiano é normalmente usado para descrever as chamadas *Técnicas Estatísticas de Solução de Problemas Inversos*, que são baseadas nos seguintes princípios [27]:

1. Todos os parâmetros que aparecem no modelo matemático são modelados como variáveis randômicas ;
2. O grau de informação a respeito destas variáveis randômicas são codificados em distribuições de probabilidade ;
3. A solução do problema inverso é a distribuição posterior de probabilidade.

Portanto, a solução do problema inverso não se reduz a um conjunto de valores pontuais estimados para os parâmetros, como nas técnicas tradicionais de solução, mas sim à obtenção de uma distribuição estatística para os mesmos.

Considere o vetor de parâmetros aparecendo na formulação matemática do problema físico como sendo:

$$P^T \equiv [P_1, P_2, \dots, P_N] \quad (2.42)$$

e o vetor de medidas na forma:

$$Y^T \equiv [Y_1, Y_2, \dots, Y_I] \quad (2.43)$$

onde N é o número de parâmetros e I o número de medidas.

O teorema de Bayes pode ser escrito como [27, 28]:

$$\pi_{\text{posterior}}(P) = \pi(P|Y) = \frac{\pi_{\text{prior}}(P) \pi(Y|P)}{\pi(Y)} \quad (2.44)$$

onde $\pi_{\text{posterior}}(P)$ é a densidade posterior de probabilidade, isto é, a densidade condicional dos parâmetros P dadas as medidas Y ; $\pi_{\text{prior}}(P)$ a densidade a priori dos parâmetros, isto é, a informação codificada para os parâmetros disponível antes das medidas; $\pi(Y|P)$ é a função de verossimilhança, que expressa a densidade de probabilidade das medidas Y dados os parâmetros P ; e $\pi(Y)$ é a densidade marginal de probabilidade das medidas, a qual desempenha o papel de uma constante de normalização.

Na prática, tal constante de normalização é difícil de ser calculada e técnicas numéricas, como o método de Monte Carlo com cadeia de Markov (MCMC), são necessários para obter-se amostras que representem com precisão a densidade posterior de probabilidade. A fim de implementar-se a cadeia de Markov, uma densidade $q(P^*, P^{(t-1)})$ é requerida, a qual dá a probabilidade de mudança do atual estado da cadeia, $P^{(t-1)}$, para o novo estado, P^* .

Um dos algoritmos mais utilizados para a implementação do método de Monte Carlo com cadeias de Markov é o de Metropolis-Hastings [27, 28], o qual pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Selecione um ponto candidato P^* da distribuição de movimentação $q(P^*, P^{(t-1)})$;
2. Calcule:

$$\alpha = \min \left[1, \frac{\pi(P^*|Y) q(P^{(t-1)}, P^*)}{\pi(P^{(t-1)}|Y) q(P^*, P^{(t-1)})} \right]; \quad (2.45)$$

3. Gere um número randômico U com distribuição uniforme em $(0,1)$;
4. Se $U \leq \alpha$, defina $P^t = P^*$; caso contrário, defina $P^t = P^{(t-1)}$;
5. Retorne ao passo 1 a fim de gerar a seqüência $[P^1, P^2, \dots, P^n]$.

Desse modo, obtêm-se uma seqüência que representa a distribuição posterior de probabilidade e inferência sobre essa distribuição é obtida da inferência sobre as amostras $[P^1, P^2, \dots, P^n]$. Deve-se notar que os valores de P^i na seqüência devem ser ignorados até que a cadeia tenha atingido equilíbrio. Aspectos teóricos e maiores detalhes sobre o algoritmo de Metropolis-Hastings e métodos de Monte Carlo com cadeia de Markov podem ser encontrados em [2, 4, 27, 28, 42].

O também é usado em um procedimento de otimização denominado de recozimento simulado (*simulated annealing*), desenvolvido por Kirkpatrick et al [28]. Considerando um ponto de início P^1 é gerada uma seqüência $\{P^1, P^2, \dots, P^n\}$ de modo que uma função-objetivo $S(P)$ seja minimizada. À partir de um ponto P da

seqüência, um ponto candidato P^* é escolhido. Caso $\Delta S = S(P^*) - S(P^i) \leq 0$, o ponto candidato é aceito, ou seja $P^{i+1} = P^*$. Caso contrário, o ponto candidato é aceito segundo o critério de Metropolis (passo 4 acima) com probabilidade $e^{-\frac{\Delta S}{T}}$, onde T é um parâmetro de controle denominado de temperatura, em analogia ao processo de mudança de estado de um material para um de menor nível de energia. O método do recozimento simulado é iniciado com um valor alto de T . Após atingir equilíbrio, a seqüência é então reiniciada com um valor menor de T e tal procedimento é repetido até atingir um critério de convergência.

Supondo que os erros nas variáveis medidas são aditivos, não-correlacionados, com distribuição normal, média zero, e matriz de covariância conhecida, a função de verossimilhança é dada por [2, 4, 27, 28]:

$$\pi(Y|P) = \frac{e^{-\frac{[Y - T(P)]^T W [Y - T(P)]}{2}}}{\sqrt{(2\pi)^L} \sqrt{|W^{-1}|}} \quad (2.46)$$

onde T é o vetor de variáveis estimadas, obtidas da solução do problema direto com uma estimativa para os parâmetros, e W^{-1} é a matriz de covariância das medidas matriz de covariância.

No método desenvolvido em [40] o termo exponencial aparecendo na equação (2.46) é interpolado utilizando-se funções de base radial (RBF). Supondo uma função de L variáveis x_i , $i = 1, \dots, L$, o modelo de RBF usado foi:

$$f(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(|x - x_j|) + \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^L \beta_{ik} p_k(x_i) + \beta_0 \quad (2.47)$$

onde $x = (x_1, \dots, x_i, \dots, x_L)$ e $f(x)$ é conhecida para uma série de pontos x . Aqui, $p_k(x_i)$ é um dos M termos de uma base dada de polinômios. Tal aproximação é resolvida para α_j e $\beta_{i,k}$ em um sistema linear de equações. A utilização da função interpolada reduziu em até 30 vezes o tempo computacional de implementação do Método de Metropolis-Hastings [40].

2.6 Técnica VI: Método de Identificação de Propriedades Termofísicas no Domínio da Frequência

Introdução

Descreve-se nesta seção o desenvolvimento de uma técnica experimental que permite a obtenção da condutividade e da difusividade térmica de materiais condutores e não condutores através do uso de elementos de aquecimento e de técnicas

de estimativas de funções para a obtenção do fluxo de calor imposto. Uma característica singular da metodologia proposta é o uso de técnicas de problemas inversos (estimativas de funções e de parâmetros) no domínio da frequência. Outra característica é a proposta de construção de modelos térmicos que sejam equivalentes a sistemas dinâmicos físicos e realizáveis e que neste caso possam usufruir de todas as propriedades matemáticas que estes sistemas lineares possuem. O princípio básico do procedimento é dividido em cinco passos distintos [43]: i) desenvolvimento de um aparato experimental que permita a imposição do fluxo de calor em uma parte da amostra enquanto as superfícies remanescentes permanecem isoladas do meio; ii) obtenção de um modelo térmico deste aparato; iii) obtenção de uma grandeza proporcional ao fluxo de calor imposto na amostra, $Q^+(t)$, usando a técnica de estimativas de funções como método sequencial com função especificada [3]; iv) obtenção da difusividade térmica ; v) comparação entre a taxa de calor total fornecida pelo elemento de aquecimento e a grandeza proporcional ao fluxo de calor de calor imposto na amostra durante o ciclo de liga/desliga de aquecimento e a consequente obtenção da condutividade térmica . Apresenta-se a seguir uma breve descrição da metodologia aplicada: i) modelo térmico; ii) aparato experimental; iii) técnica de problemas inversos aplicada na estimativa de funções e de parâmetros e; iv) identificação da condutividade térmica.

Modelo Matemático - Problema Direto

O problema térmico proposto a ser reproduzido experimentalmente é dado por uma amostra inicialmente a uma temperatura uniforme T_0 . A amostra é então submetida a um fluxo de calor $[W/m^2]$ enquanto todas as outras superfícies mantêm-se isoladas. A figura 2.1 apresenta o modelo térmico .

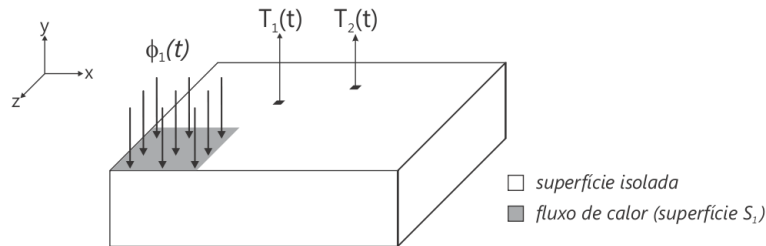


Figura 2.1: Modelo térmico equivalente tridimensional transiente.

O modelo térmico pode então ser obtido da equação da difusão de calor como sendo

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.48)$$

na região $R(0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c)$ e $t > 0$, sujeita às condições de contorno:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=b} = \phi_1(t) \quad \text{em } S_1 (0 < x < x_H, 0 < z < z_H) \\ -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0 \quad \text{em } S_2 (0 < x < x_H, 0 < z < z_H) \\ \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{y=a} = \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{y=c} = \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{y=b} = 0 \end{array} \right. \quad (2.49)$$

e à condição inicial

$$T(x, y, z, 0) = T_0 \quad (2.50)$$

onde S é definido por $(0 \leq x \leq a, 0 \leq z \leq c)$ e x_H e z_H são os limites da região S_1 onde o fluxo de calor é aplicado.

Define-se então os seguintes grupos adimensionais como

$$x^+ = \frac{x}{a}, \quad y^+ = \frac{y}{b}, \quad z^+ = \frac{z}{c} \quad \text{e} \quad \tau^+ = \frac{\alpha_{ref} t}{b^2} \quad (2.51)$$

e

$$\theta^+(x, t) = \frac{T(x, y, z, t) - T_0}{\frac{q_{ref} L}{\kappa_{ref}}} = \frac{\theta(x, t)}{\frac{q_{ref} L}{\kappa_{ref}}} \quad (2.52)$$

onde α_{ref} , κ_{ref} e ϕ_{ref} são valores de referência para a difusividade térmica, condutividade térmica e densidade de fluxo de calor, respectivamente. Estas variáveis podem assumir, *a priori*, qualquer valor de referência como, por exemplo, o valor unitário.

Aplicando-se as definições dadas pelas equações (2.51) e (2.52) na equação (2.48) obtém-se o modelo térmico em sua forma adimensional como sendo

$$\frac{\partial^2 \theta^+}{\partial x^{+2}} + \frac{\partial^2 \theta^+}{\partial y^{+2}} + \frac{\partial^2 \theta^+}{\partial z^{+2}} = \frac{\partial \theta^+}{\partial \tau} \quad (2.53)$$

na região R e $t^+ > 0$, sujeita às condições de contorno:

$$-\left. \frac{\partial \theta^+}{\partial y^+} \right|_{y^+=b} = Q^+(t^+) \text{ em } S_1 \quad (2.54)$$

$$\left. \frac{\partial \theta^+}{\partial y^+} \right|_{y^+=0} = 0 \text{ em } S_2 \quad (2.55)$$

$$\left. \frac{\partial \theta^+}{\partial x^+} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial \theta^+}{\partial x^+} \right|_{x=1} = \left. \frac{\partial \theta^+}{\partial y^+} \right|_{y=1} = \left. \frac{\partial \theta^+}{\partial x^+} \right|_{y=1} = \left. \frac{\partial \theta^+}{\partial z^+} \right|_{y=1} = 0 \quad (2.56)$$

e a condição inicial

$$\theta(x^+, y^+, z^+, 0) = 0 \quad (2.57)$$

onde o fluxo de calor adimensional $Q^+(t)$ dada por

$$Q^+(t) = \frac{\phi_1(t) \kappa_{ref}}{\kappa q_{ref}} \quad (2.58)$$

Observa-se que o problema dado pela equação (2.53) representa um problema inverso se o fluxo de calor imposto $Q^+(t)$ for desconhecido. O próximo passo é a construção de um aparato experimental que reproduz o modelo térmico descrito.

Montagem Experimental

Observa-se que as condições de contorno presentes no modelo teórico devem ser garantidas experimentalmente. Isto significa que a condição de isolamento em todas as superfícies que não estão em contato (amostra e aquecedor) deve ser alcançada para que a técnica obtenha sucesso. Uma forma eficiente de se obter isolamento experimental do ponto de vista de perdas de calor convecção é a obtenção de um ambiente exposto a vácuo. A figura 2.2 apresenta uma câmara de vácuo construída para proporcionar ao conjunto aquecedor e amostra um ambiente sem troca de calor por convecção.

No interior da câmara de vácuo a montagem do conjunto amostra/aquecedor elétrico pode ser mostrado esquematicamente como disposto na figura 2.3.

A figura 2.4 apresenta um sinal típico da taxa de calor gerada pelo elemento aquecedor resistivo. A magnitude da potência é apenas indicativa, podendo ocupar uma faixa ampla de potência (1W a 1000 W).



Figura 2.2: Câmara de vácuo usada para garantir isolamento térmico nas superfícies sem contato entre amostra e aquecedor e expostas ao meio externo.

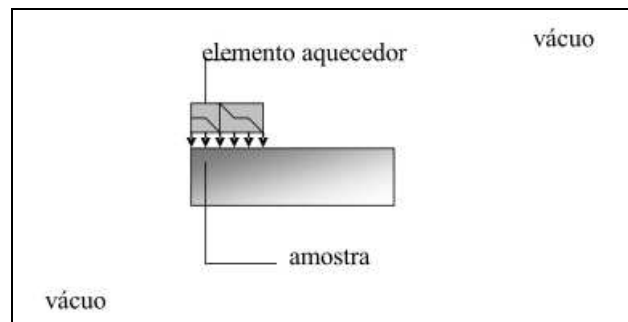


Figura 2.3: Esquema de montagem do elemento aquecedor resistivo em parte da amostra.

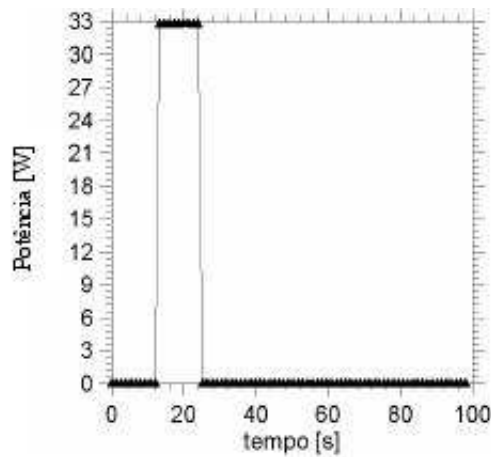


Figura 2.4: Sinal típico de uma taxa de calor gerada por um elemento de aquecimento resistivo do tipo liga/desliga.

Problema Inverso

Várias técnicas de problemas inversos podem ser empregadas para a obtenção do fluxo de calor adimensional $Q^+(t)$ presente no problema térmico dado pela equação (2.53). Neste trabalho, propõe-se o uso do método de função especificada [3] para estimativas de funções o que não impede o uso de outras técnicas.

Método da Função Especificada Seqüencial

Um caminho para tratar o problema inverso em condução de calor é assumir uma forma funcional da variação do fluxo de calor com o tempo (chamado de método da função especificada). Essa função pode ser uma seqüência de segmentos constantes, segmentos lineares ou assumir formas como parábolas, cúbicas ou exponenciais. Outras variações possíveis neste método são:

1. Estimar simultaneamente todos os parâmetros para o intervalo total;
2. Estimar os parâmetros de forma seqüencial.

No primeiro esquema, tem-se a chamada estimação em todo domínio [3]. No procedimento seqüencial, um segmento após outro é estimado começando com tempos iniciais movendo-se para tempos maiores sucessivamente.

Alguns conceitos básicos para a implementação do procedimento seqüencial pode ser apresentados:

1. Uma par $q(t)$ é assumido para tempos

$$t_{M+1}, t_{M+2}, \dots, t_{M+r-1}$$

sendo que para $t < t_M$ o fluxo de calor é conhecido;

2. Uma função erro quadrático é usada para esses tempos;
3. Componentes de fluxos de calor são estimados para a forma funcional assumida;
4. Somente a primeira componente q_M é retida;
5. M é aumentado em um passo e o procedimento é repetido;
6. Forma funcional - Fluxo de calor constante.

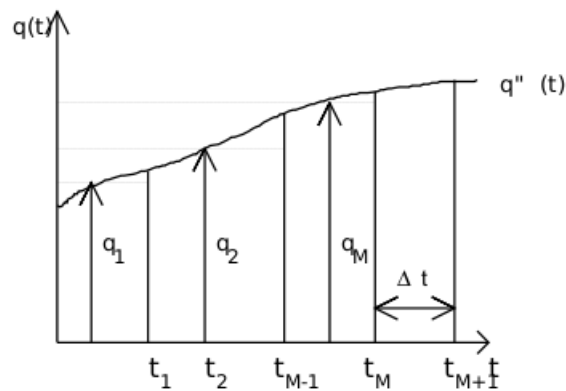


Figura 2.5: Fluxo de calor imposto de forma calor arbitrária.

A figura 2.5 apresenta um fluxo de calor desconhecido a ser estimado enquanto a figura 2.6 representa o modelamento do fluxo de calor para r tempos futuros. Ou seja, as componentes estimadas do fluxo de calor q_1, q_2, \dots, q_{M-1} são considerados previamente estimados e são denotados, $\hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_{M-1}$.

Para aumentar a estabilidade do algoritmo inverso, as componentes de fluxo de calor.

$\hat{q}_{M+1}, \hat{q}_{M+2}, \hat{q}_{M+3}, \dots, \hat{q}_{M+r-1}$ são assumidas iguais a $q_{M+1} = q_{M+2} = q_{M+r-1}$.
Para o algoritmo seqüencial de q_M estimação de as temperaturas

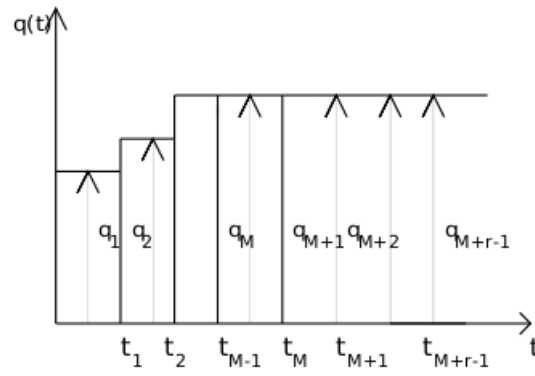


Figura 2.6: Modelamento do fluxo de imposto constante para $r-1$ tempos futuros.

$$T_{M+1}, T_{M+2}, \dots, T_{M+r-1}$$

são necessárias.

Assim, assumindo a hipótese de fluxo de calor constante, temos:

$$T_M = \hat{T}_M \Big|_{q_M=0} + q_M \phi_1 \quad (2.59)$$

$$T_{M+1} = \hat{T}_M \Big|_{q_M=q_{M+1}=0} + q_M \phi_2 \quad (2.60)$$

$$T_{M+r-1} = \hat{T}_M \Big|_{q_M=q_{M+1}=q_{M+r-1}=0} + q_M \phi_2 \quad (2.61)$$

onde a relação é usada

$$\phi_j = \sum_{i=0}^{j-1} \Delta \phi_i \quad (2.62)$$

Logo, a estimação de q_M é obtida através da minimização da diferença quadrática entre as temperaturas

$$Y_{M+1}, Y_{M+2}, \dots, Y_{M+r-1}$$

e

$$T_{M+1}, T_{M+2}, \dots, T_{M+r-1}$$

ou seja:

$$S = \sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - T_{M+i-1})^2 \quad (2.63)$$

ou

$$S = \sum_{i=1}^r \left(Y_{M+i-1} - \hat{T}_M \Big|_{q_M=q_{M+1}=q_{M+i-1}=0} - q_M \phi_i \right)^2 \quad (2.64)$$

Derivando S em relação a q_M obtém-se a equação de recorrência para q_M como sendo:

$$q_M = \sum_{i=1}^r \left[\frac{\left(Y_{M+i-1} - \hat{T}_{M+i-1}^* \Big|_{q_M=\dots=0} \right) \phi_i}{\sum_{i=1}^r \phi_i^2} \right] \quad (2.65)$$

ou

$$q_M = \sum_{i=1}^r \mathcal{K}_i \left(Y_{M+i-1} - \hat{T}_{M+i-1}^* \Big|_{q_M=\dots=0} \right)^2 \quad (2.66)$$

com

$$\mathcal{K}_i = \frac{\phi_i}{\sum_{j=1}^r \phi_j^2} \quad (2.67)$$

A equação (2.66) é usada para as estimativas das componentes do fluxo de calor q_M para r tempos futuros [3]. Neste caso, observa-se que $q_M = Q^+$.

Obtenção da Difusividade Térmica

Sistema Dinâmico e Modelo Térmico Equivalente

Diferentes modelos dinâmicos podem ser obtidos do modelo térmico mostrado pela figura 2.1, onde ϕ_i representa o fluxo de calor, T_i a temperatura e i o índice usado para descrever a localização das temperaturas na amostra. Para a obtenção da difusividade térmica é conveniente escolher um modelo dinâmico com a característica de uma entrada, $X(t) = \phi_1(t)$ representada pelo fluxo de calor e por duas saídas, representadas pelas temperaturas em duas posições distintas na amostra, $Y(t) = \theta_1(t) - \theta_2(t)$, onde θ é definido como $T - T_0$.

Usando funções de Green para a solução do problema térmico descrito pela (2.48) e calculando a temperatura para duas posições diferentes, pode-se escrever [43].

$$\theta_1(f) - \theta_2(f) = G_{12}^+(f)\phi_1(f) \quad (2.68)$$

onde $G_{12}(\tau)$ representa a função de Green função de Green do sistema térmico. No domínio da frequência, $G_{12}(f)$ também representa a resposta em frequência, $H(f)$, e é definida pela transformada de Fourier de $G_H(\tau)$,

$$G_{12}(f) = \int_0^{\infty} G_{12}(\tau)e^{-2\pi j\tau} d\tau \quad (2.69)$$

onde $j = \sqrt{-1}$ é o número complexo unitário.

Observa-se que como o fluxo de calor ϕ_1 é perfeitamente identificado pela equação (2.58), então a função de Green G_{12} pode ser obtida experimentalmente através da equação (2.68) ou seja

$$G_{12}^+ = \frac{\theta_1(f) - \theta_2(f)}{\phi_1(f)} \quad (2.70)$$

Observa-se que como $\phi_i(t)$ e $\theta_i(t)$ são obtidos de medições discretas, a transformada de Fourier é também realizada numericamente usando-se o algoritmo de Cooley-Tukey (Discrete Fast Fourier Transform) [45].

Portanto, o modelo térmico equivalente do sistema dinâmico pode ser representado por :

$$G_{12}(f) = H(f) = \frac{\theta_1(f) - \theta_2(f)}{\phi_1(f)} = \frac{Y(f)}{X(f)} = \frac{S_{xy}(f)}{S_{xx}(f)} \quad (2.71)$$

onde a função $H(f)$ representa a função resposta em frequência do sistema e S_{xy} e S_{xx} representam as densidades espectral cruzada e densidade autoespectral respectivamente.

Observa-se ainda da equação (2.47) que $H(f)$ é portanto fortemente dependente das propriedades térmicas da amostra. Ou seja, isto significa que:

$$H(f) = \frac{\theta_1(f) - \theta_2(t)}{\phi_1(f)} = \text{função}(\alpha, \kappa) \quad (2.72)$$

Nota-se ainda que no plano transformado f-x , a variável $H(f)$ é uma variável complexa. Neste caso ela pode ser escrita em sua forma polar como

$$G_{12}(f) = H(f) = |H(f)|e^{-j\phi(f)} \quad (2.73)$$

onde $|H|$ e ϕ representam, respectivamente, o módulo e a fase de $H(f)$. O fator de fase pode também ser escrito como

$$\phi(f) = \arctan \left\{ \frac{\text{Im}[H(f)]}{\text{Re}[H(f)]} \right\} \quad (2.74)$$

onde $\text{Im}H(f)$ e $\text{Re}H(f)$ são a parte real e imaginária de $H(f)$.

A fase da resposta em frequência, $H(f)$, é a base para a estimativa da difusividade térmica. Isto se deve ao fato do fator de fase ser somente função da difusividade térmica, que demonstra a grande conveniência de se trabalhar no domínio da frequência. A idéia básica aqui é a observação que o atraso entre o fluxo de calor e as respostas de temperaturas é uma função exclusiva da difusividade térmica [44]. Portanto a minimização de uma baseada na diferença entre os valores calculados e experimentais do fator de fase é o caminho para a obtenção da difusividade térmica. Esta função pode ser escrita por

$$S_p = \sum_{i=1}^{N_f} [\phi_e(i) - \phi_t(i)]^2 \quad (2.75)$$

onde ϕ_e e ϕ_t são os valores calculados e experimentais do fator de fase de $H(f)$ respectivamente.

Os valores teóricos do fator de fase são obtidos da identificação de $H(f)$ dada pela equação (2.72). Neste caso a saída $Y(f)$ é a transformada de Fourier da diferença da temperatura obtidas pela solução numérica da equação (2.47) usando o método de volume finitos [46]. De fato, este procedimento evita a necessidade de se obter a função de Green de forma explícita e analítica. Os valores de ϕ serão então os valores que minimizam a equação (2.75).

Um método indicado para a minimização desse funcional é o método da seção áurea com aproximação polinomial [47], uma vez que a equação (2.75) é uma função unimodal.

Neste ponto uma observação deve ser feita. A entrada do sistema dado por $X(t) = \phi_1(t)$ ainda não foi inteiramente identificada. De fato o procedimento inverso descrito no item anterior identificou somente a taxa $Q^+(t)$ proporcional a esse fluxo. Essa proporcionalidade pode ser explicitamente observada da equação (2.58), ou seja, pode-se escrever

$$Q^+(t) = \frac{\phi_1(t) \kappa_{ref}}{\kappa q_{ref}} = \mathcal{K} \phi_1(t) \quad (2.76)$$

onde \mathcal{K} representa um fator de proporcionalidade entre o fluxo e a taxa. Substituindo a equação (2.76) na equação (2.72) obtém-se

$$H(f) = \frac{|\theta_1(f) - \theta_2(f)|}{\mathcal{K}^{-1}} \quad (2.77)$$

E pode-se escrever ainda

$$H^*(f) = \mathcal{K}H(f) = \frac{|\theta_1(f) - \theta_2(f)|}{Q^+(f)} \quad (2.78)$$

Das equações (2.72) e (2.78) pode-se observar que embora a constante de proporcionalidade \mathcal{K} afete diretamente o cálculo do valor módulo de $H(f)$, o seu efeito no fator de fase não é verificado. Observa-se que nesse caso, os fatores de fase de $H(f)$ e $H^*(f)$ são idênticos. Essa observação pode ser verificada considerando os cálculos dos fatores de fase das duas funções complexas proporcionais, ou seja, se $H(f)$ é uma função complexa dada por

$$H(f) = a + bj$$

onde a e b são números reais e j é a variável complexa unitária definida por $j = \sqrt{-1}$. Então o fator de fase de H , $\phi(f)$, e de H^* , $\phi^*(f)$, são idênticos e podem ser calculados por

$$\begin{aligned} \phi(f) &= \arctan \left\{ \frac{\text{Im}[H(f)]}{\text{Re}[H(f)]} \right\} \\ \phi(f) &= \arctan \left\{ \frac{b}{a} \right\} \\ \phi(f) &= \arctan \left\{ \frac{\text{Im}[H^*(f)]}{\text{Re}[H^*(f)]} \right\} \\ \phi(f) &= \arctan \left\{ \frac{\mathcal{K}b}{\mathcal{K}a} \right\} \\ \phi(f) &= \arctan \left\{ \frac{b}{a} \right\} \\ \phi(f) &= \phi^*(f). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Esse fato indica que a difusividade térmica tem baixa sensibilidade relacionada à amplitude dos sinais de X e Y o que por si acarreta em uma baixa sensibilidade a erros determinísticos como as incertezas de curva de calibração de sensores de temperatura.

Obtenção simultânea do fluxo de calor e da condutividade térmica

Uma vez determinado a difusividade térmica e a taxa de calor adimensional $Q^+(t)$, resta, portanto a obtenção fluxo de calor absorvido pela superfície, $\phi(t)$ e da condutividade térmica da amostra.

Como já mencionado, a idéia básica usada neste trabalho é bastante simples. O princípio consiste na aplicação de um fluxo de calor, fornecido por efeito joule de um elemento resistivo diretamente colado à superfície da amostra de interesse. Para que todo o calor gerado pelo elemento seja totalmente imposto à amostra, exige-se que todo o ambiente esteja evacuado. Desta forma o calor total fornecido à amostra pode ser obtido simplesmente multiplicando-se a tensão pela corrente imposta na resistência elétrica.

O único inconveniente deste procedimento reside então na inércia térmica do elemento de aquecimento e da própria amostra que não permitem que todo o calor imposto seja imediatamente (sem atraso) absorvido pela superfície aquecida.

A figura 2.7 apresenta uma evolução típica do fluxo de calor $Q^+(t)$ proporcional ao fluxo de calor, $\phi_1(t)$, que é absorvido na superfície da amostra.

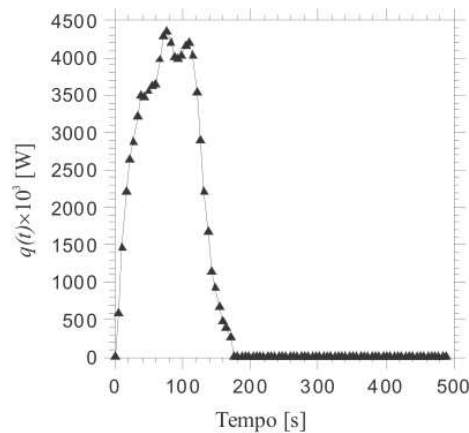


Figura 2.7: Sinal de $Q^+(t)$ proporcional ao fluxo de calor imposto na superfície da amostra

Observando-se a evolução da taxa de calor total gerado na resistência elétrica (figura 2.2) conclui-se que o fluxo de calor será totalmente absorvido pela superfície somente após decorridos um determinado tempo t_f . Ou seja, se $P''(t)$ representa a potência por unidade de área do aquecedor (W/m^2) dissipada pelo elemento

resistivo e $\phi_1''(t)$ representa o fluxo de calor efetivamente entregue à amostra então aplicando-se o princípio da conservação da energia após um determinado tempo, t_f , pode-se escrever

$$E_{aq} = \int_0^{t_f} P(t) dt = E_{samp} = \int_0^{t_f} \phi_1''(t) dt \quad (2.80)$$

ou seja,

$$\int_0^{t_f} \phi_1''(t) dt = \int_0^{t_f} V_1(t) \times I(t) dt \quad (2.81)$$

onde $V_1(t)$ e $I(t)$ representam a tensão e a corrente imposta no aquecedor elétrico resistivo. Mas da definição dada pela equação (2.58) pode-se escrever

$$Q^+(t) = \frac{\phi_1(t) \kappa_{ref}}{\kappa q_{ref}} \quad (2.82)$$

ou ainda,

$$\phi_1(t) = \kappa \frac{q_{ref}}{\kappa_{ref}} Q^+(t) \quad (2.83)$$

Logo a equação (2.81) pode ser escrita como

$$\int_0^{t_f} \kappa \frac{q_{ref}}{\kappa_{ref}} Q^+(t) dt = \int_0^{t_f} V_1(t) \times I(t) dt \quad (2.84)$$

ou ainda,

$$\kappa \int_0^{t_f} \frac{q_{ref}}{\kappa_{ref}} Q^+(t) dt = \int_0^{t_f} V_1(t) \times I(t) dt \quad (2.85)$$

e portanto a condutividade térmica κ , pode ser obtida por

$$\kappa = \left[\int_0^{t_f} V_1(t) \times I(t) dt \right] \left[\frac{q_{ref}}{\kappa_{ref}} \int_0^{t_f} Q^+(t) dt \right]^{-1} \quad (2.86)$$

Uma vez determinado a condutividade térmica a equação (2.58) pode então ser usada para a determinação da evolução do fluxo de calor absorvido na amostra.

2.7 Exercícios

1. Um meio semi-infinito, inicialmente com temperatura nula, tem sua temperatura na superfície em $x = 0$ mantida em T_0 . A formulação deste problema de condução de calor é dada por:

$$\begin{cases} C \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & x > 0 \text{ e } t > 0 \\ T = T_0 & \text{em } x = 0 \text{ para } t > 0 \\ T = 0 & \text{para } t = 0 \text{ e } x > 0 \end{cases}$$

Examine a variação no tempo dos coeficientes de sensibilidade com respeito a capacidade térmica volumétrica $C = \rho c_p$ e a condutividade térmica κ , para sensores localizados em diferentes profundidades abaixo da superfície. A estimativa simultânea de C e κ é possível? Qual o comportamento de $|J^T J|$?

2. Repita o problema 1 para fluxo de calor q_0 imposto na superfície em $x = 0$. Neste caso, a formulação do problema é dada por:

$$\begin{cases} C \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & x > 0 \text{ e } t > 0 \\ -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} = q_0 & \text{para } x = 0 \text{ para } t > 0 \\ T = 0 & \text{para } t = 0 \text{ e } x > 0 \end{cases}$$

Usando a formulação do problema 1 ou do problema 2 (a que for apropriada), estime simultaneamente κ and C . Use $C = \kappa = 1$ e $T_0 = 1$ (ou $q_0 = 1$), a fim de gerar medidas simuladas para serem usadas na solução do problema inverso. Examine os efeitos dos erros randômicos das medidas, estimativa inicial do procedimento iterativo e localização dos sensores sobre os valores estimados para os parâmetros. Este problema de estimativa de parâmetros é linear ou não-linear?

3. Para a situação física do problema 2, considere κ e C conhecidos, mas q_0 desconhecido. Examine a variação no tempo do coeficiente de sensibilidade com respeito a q_0 para sensores localizados em diferentes profundidades abaixo da superfície. Use $C = \kappa = q_0 = 1$ para gerar as medidas simuladas de um único sensor, para serem usadas na solução do problema inverso. Estime $q_0 = 1$ e examine os efeitos dos erros randômicos das medidas, estimativa inicial do procedimento iterativo e localização dos sensores no valor estimado para o

parâmetro. Este problema de estimativa de parâmetros é linear ou não-linear? É possível estimar κ e/ou C simultaneamente com q_0 ?

4. Considere o seguinte problema de condução de calor na forma adimensional:

$$\left\{ \begin{array}{ll} C \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} & \text{em } 0 < x < 1 \text{ para } t > 0 \\ \frac{\partial T}{\partial x} = 0 & \text{em } x = 0 \text{ para } t > 0 \\ \frac{\partial T}{\partial x} = q(t) & \text{em } x = 1 \text{ para } t > 0 \\ T = 0 & \text{para } t = 0 \text{ em } 0 < x < 1 \end{array} \right.$$

Formule todos os passos para a solução do problema inverso de estimativa de $q(t)$, com cada uma das técnicas vistas acima.

Capítulo 3

Aplicação do Método dos Gradientes Conjugados para a Estimativa de Fluxos de Calor em um Problema de Convecção Forçada

3.1 Problema Direto

O problema físico considerado aqui envolve a convecção laminar forçada de um fluido Newtoniano em um canal irregular, tal como mostrado na 3.1.

As propriedades termofísicas do fluido são supostas constantes e o termo de energia devido à dissipação viscosa é suposto desprezível. O fluido entra no canal com uma velocidade uniforme e conhecida u_0 , paralela ao eixo x . O fluido está inicialmente a uma temperatura T_0 , que também é a temperatura na entrada do canal. As paredes do canal são expostas a dois diferentes fluxos de calor, que podem variar no tempo e ao longo do canal. A formulação matemática para este problema físico é dada por:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\Gamma^\phi \frac{\partial\phi}{\partial y} \right] + S^\phi \quad (3.1)$$

em $\psi(x, y)$ para $t > 0$.

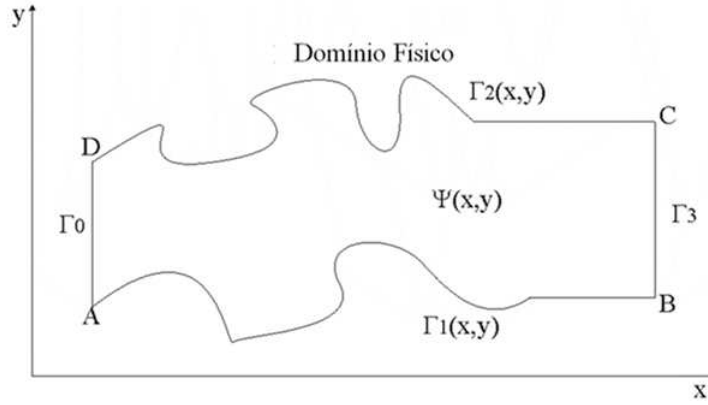


Figura 3.1: Canal irregular no domínio físico.

onde ϕ , Γ^ϕ e S^ϕ representam a quantidade conservada, o coeficiente de difusão e o termo fonte, respectivamente, conforme definidos na tabela 3.1 para cada uma das equações de conservação.

As equações de conservação são sujeitas às seguintes condições de contorno e inicial,

$$u = u_0 \quad \text{em } \Gamma_0 \text{ para } t > 0 \quad (3.2a)$$

$$v = 0 \quad \text{em } \Gamma_0 \text{ para } t > 0 \quad (3.2b)$$

$$u = 0 \quad \text{em } \Gamma_1(x, y) \text{ e } \Gamma_2(x, y) \text{ para } t > 0 \quad (3.2c)$$

$$v = 0 \quad \text{em } \Gamma_1(x, y) \text{ e } \Gamma_2(x, y) \text{ para } t > 0 \quad (3.2d)$$

$$T = T_0 \quad \text{em } \Gamma_0 \text{ para } t > 0 \quad (3.2e)$$

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial n} = q_1(x, y, t) \quad \text{em } \Gamma_1(x, y) \text{ } t > 0 \quad (3.2f)$$

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial n} = q_2(x, y, t) \quad \text{em } \Gamma_2(x, y) \text{ } t > 0 \quad (3.2g)$$

$$u = 0 \quad \text{em } t = 0, \text{ para } \psi(x, y) \quad (3.2h)$$

$$v = 0 \quad \text{em } t = 0, \text{ para } \psi(x, y) \quad (3.2i)$$

$$T = T_0 \quad \text{em } t = 0, \text{ para } \psi(x, y) \quad (3.2j)$$

onde $\frac{\partial}{\partial n}$ representa a derivada normal ao contorno, apontando para fora do domínio. Nas equações (3.1), (3.2a–3.2j) $\psi(x, y)$ representa o domínio espacial para o canal,

Equação	ϕ	Γ^ϕ	S^ϕ
Continuidade	1	0	0
Quantidade de Movimento em x	u	μ	$-\frac{\partial P}{\partial x}$
Quantidade de Movimento em y	v	μ	$-\frac{\partial P}{\partial y}$
Energia	T	$\frac{\kappa}{C_p}$	0

Tabela 3.1: Variáveis conservadas, coeficientes de difusão e termos fontes para as equações de conservação

circundado pelas superfícies fechadas $\Gamma_1(x, y)$ e $\Gamma_2(x, y)$ e pelas superfícies abertas Γ_0 e Γ_3 , conforme ilustrado na figura 3.1. As condições de contorno na saída do canal em Γ_3 são supostas localmente parabólicas, ou seja, os fluxos difusivos das variáveis conservadas são nulos. Portanto, tal fronteira é suposta estar localizada em regiões sem recirculações no escoamento.

A fim de contornar as dificuldades associadas à discretização das equações (3.1), (3.2a–3.2j), um esquema elíptico de geração de malhas [48] foi utilizado para transformar o canal irregular no domínio físico em canal de placas paralelas no domínio computacional, conforme mostrado na figura 3.2.

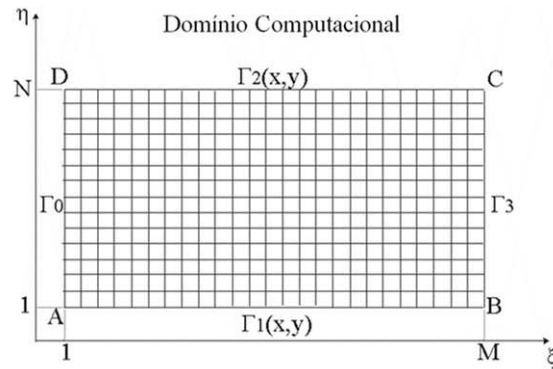


Figura 3.2: Canal de placas paralelas ao domínio computacional.

As equações (3.1) e (3.2a–3.2j) são então transformadas para o domínio computacional (ξ, η) utilizando relações de transformação que podem ser encontradas em livros texto padrão. São obtidas então as seguintes equações gerais de conservação, bem como as condições de contorno e inicial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(J\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{U}\rho\phi)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\tilde{V}\rho\phi)}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\alpha_{11}}{J}\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{12}}{J}\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\alpha_{21}}{J}\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{22}}{J}\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + S^\phi J \end{aligned} \quad (3.3)$$

em $1 < \xi < M$ e $1 < \eta < N$, para $t > 0$.

$$u = u_0 \quad \text{em } \xi = 1, 1 < \eta < N \text{ para } t > 0 \quad (3.4)$$

$$u = 0 \quad \text{em } \eta = 1 \text{ e } \eta = N, 1 < \xi < M \text{ para } t > 0 \quad (3.5)$$

$$v = 0 \quad \text{em } \eta = 1 \text{ e } \eta = N, 1 < \xi < M \text{ para } t > 0 \quad (3.6)$$

$$T = T_0 \quad \text{em } \xi = 1, 1 < \eta < N \text{ para } t > 0 \quad (3.7)$$

$$u = 0 \quad \text{em } t = 0, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.8)$$

$$v = 0 \quad \text{em } t = 0, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.9)$$

$$T = T_0 \quad \text{em } t = 0, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.10)$$

$$-\frac{\kappa}{J} \left[\alpha_{21} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] = q_1(\xi, t) \sqrt{\alpha_{22}} \quad \text{em } \eta = 1, 1 < \xi < M \text{ e } t > 0 \quad (3.11)$$

$$\frac{\kappa}{J} \left[\alpha_{21} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] = q_2(\xi, t) \sqrt{\alpha_{22}} \quad \text{em } \eta = N, 1 < \xi < M \text{ e } t > 0 \quad (3.12)$$

onde os vários parâmetros que definem a transformação do domínio físico para o domínio computacional são dados por:

$$\alpha_{11} = \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 \quad (3.13a)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \quad (3.13b)$$

$$\alpha_{22} = \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 \quad (3.13c)$$

$$J = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \quad (3.13d)$$

$$\tilde{U} = u \frac{\partial y}{\partial \eta} + v \frac{\partial x}{\partial \eta} \quad (3.13e)$$

$$\tilde{V} = -u \frac{\partial y}{\partial \eta} + v \frac{\partial x}{\partial \xi} \quad (3.13f)$$

O *problema direto* está ligado à determinação do campo de velocidades e da distribuição de temperaturas dentro do canal, com o conhecimento dos parâmetros que governam a transformação do domínio físico para o domínio computacional, das condições de contorno e inicial, bem como das propriedades termofísicas do fluido. Para a solução do problema direto, foi aplicado o método dos volumes finitos.

3.2 Problema Inverso

O *problema inverso* considerado aqui está relacionado com a estimação simultânea dos fluxos de calor $q_1(\xi, t)$ e $q_2(\xi, t)$, usando medidas de temperatura dentro do canal. Para a análise inversa, todas as outras quantidades que aparecem na formulação do problema direto são supostas conhecidas e livre de erros.

O problema inverso é reformulado como um problema de minimização envolvendo o seguinte funcional objetivo:

$$G [q_1(\xi, t), q_2(\xi, t)] = \frac{1}{2} \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S [T(\xi_s, \eta_s, t; q_1, q_2) - \mu_s(t)]^2 dt \quad (3.14)$$

onde t_f representa o tempo final, S é o número de sensores utilizados, e $\mu_s(t)$ e $T(\xi_s, \eta_s, t; q_1, q_2)$ são as temperaturas medidas e estimadas, respectivamente, nas posições dos sensores (ξ_s, η_s) , para $s = 1, \dots, S$. As temperaturas estimadas são obtidas da solução do problema direto, usando valores estimados para os fluxos de calor nas fronteiras $q_1(\xi, t)$ e $q_2(\xi, t)$.

Nota-se no problema direto, dado pelas equações (3.3–3.12), que a equação da energia não está acoplada às equações do escoamento, uma vez que as propriedades do fluido são constantes e os efeitos de empuxo são desprezíveis. Como resultado, o escoamento pode ser resolvido independentemente do campo de temperaturas e, portanto, as componentes de velocidade dentro do canal podem ser consideradas como quantidades conhecidas para a análise inversa. Assim, para os casos examinados aqui, as equações da continuidade e quantidade de movimento foram resolvidas antes e os resultados foram utilizados como dados de entrada para a solução do problema inverso, o qual envolve então apenas a equação da energia.

Para os casos examinados a seguir, supõe-se que os fluxos de calor desconhecidos variam de acordo com a seguinte formulação:

$$q_j(\xi, t) = q_0 f_{\xi,j}(\xi) f_{t,j}(t) \quad \text{para } j = 1 \text{ e } j = 2 \quad (3.15)$$

onde q_0 é um valor constante com unidades de fluxo de calor, enquanto $f_{\xi,j}(\xi)$ e $f_{t,j}(t)$ são funções adimensionais de ξ e t , respectivamente.

Serão estudados três diferentes tipos de problemas inversos, dependendo da variação funcional dos fluxos de calor desconhecidos:

- (I) **Fluxos de calor dependentes do tempo:** Neste caso, a informação a priori sobre os fluxos de calor desconhecidos serem uniformes ao longo do canal é disponível, tal que $f_{\xi,j}(\xi) = 1$, para $j = 1, 2$. Assim, $q_j(t) \equiv q_0 f_{t,j}(t)$, para $j = 1, 2$, se tornam as funções desconhecidas e o problema inverso passa a lidar com a estimativa das variações temporais dos fluxos de calor.
- (II) **Fluxos de calor espacialmente dependentes:** Neste caso, a informação a priori sobre os fluxos de calor serem constantes no tempo é disponível, tal que $f_{t,j}(t) = 1$, para $j = 1, 2$. Assim, $q_j(\xi) \equiv q_0 f_{\xi,j}(\xi)$, para $j = 1, 2$, se tornam as funções desconhecidas e o problema inverso passa a lidar com a estimativa das variações espaciais dos fluxos de calor.
- (III) **Fluxos de calor espacial e temporalmente variáveis:** Neste caso, $q_j(\xi, t) \equiv q_0 f_{\xi,j}(\xi) f_{t,j}(t)$, para $j = 1, 2$, se tornam as funções desconhecidas e o problema inverso passa a lidar com a estimativa das variações espaciais e temporais dos fluxos de calor.

Estes três tipos de problemas inversos serão denominados *Problema I, II e III*, respectivamente. Uma metodologia de estimativa de funções será usada para a identificação dos fluxos de calor na fronteira, para cada um destes problemas inversos. Em tal abordagem, nenhuma informação a respeito da forma funcional destas funções desconhecidas é disponível para a análise, exceto o espaço funcional da função, o qual é suposto pertencer ao espaço de Hilbert [7, 49–51].

Uma função $f(w)$ no espaço das funções reais quadráticas integráveis em um domínio Ω , $\mathcal{L}_2(\Omega)$, satisfaz a seguinte propriedade:

$$\int_{\Omega} [f(w)]^2 dw < \infty \quad w \in \Omega \quad (3.16)$$

O produto interno nesse espaço de duas funções $f(w)$ e $g(w)$ neste espaço funcional é dado por:

$$\langle f(w), g(w) \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} f(w)g(w) dw \quad f(w) \text{ e } g(w) \in \mathcal{L}_2(\Omega) \quad (3.17)$$

e a norma de uma função $f(w)$ que pertence a $\mathcal{L}_2(\Omega)$ é obtida do produto interno como

$$\|f(w)\|_{\Omega} = \left\{ \int_{\Omega} [f(w)]^2 dw \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.18)$$

O domínio Ω aparecendo nas equações (3.16–3.18) pode representar o domínio temporal $]0, t_f[$, o domínio espacial $]1, M[$, ou uma combinação dos dois $]0, t_f[\times]1, M[$, dependendo de qual tipo de problema inverso está sendo analisado, isto é, Problema I, II ou III, respectivamente. De forma análoga, a variável independente w pode representar t , ξ ou (ξ, t) , para os Problemas I, II ou III, respectivamente.

A minimização da função objetivo (3.14) pode ser obtida através do método do gradiente conjugado (MGC) [7, 49–68]. Dois problemas auxiliares, conhecidos como *problema de sensibilidade* e *problema adjunto*, são necessários para a implementação do procedimento iterativo do MGC. A obtenção destes dois problemas auxiliares será exposta a seguir.

3.3 Problema de Sensibilidade

Os problemas de sensibilidade são usados para determinar a variação do campo de temperatura devido a variações nas quantidades desconhecidas. Uma vez que o presente problema está relacionado com a estimativa de duas funções desconhecidas, dois problemas de sensibilidade são requeridos para a análise. Eles são obtidos considerando-se perturbações nos fluxos de calor, conforme descrito a seguir.

Inicialmente, considera-se que a temperatura $T(\xi, \eta, t)$ sofre uma variação $\varepsilon \Delta T_1(\xi, \eta, t)$ quando o fluxo de calor na fronteira $q_1(w)$ é perturbado por $\varepsilon \Delta q_1(w)$, onde ε é um número pequeno. A fim de obter o problema de sensibilidade para $\Delta T_1(\xi, \eta, t)$, o seguinte processo limite é aplicado [7–9, 35]:

$$D_{\Delta q_1} T(\xi, \eta, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{L_\varepsilon(q_{1\varepsilon}) - L_\varepsilon(q_1)}{\varepsilon} = 0 \quad (3.19)$$

onde $L_\varepsilon(q_{1\varepsilon})$ e $L(q_1)$ representam o problema direto escrito sob a forma de um operador L para o fluxo de calor perturbado $[q_1(w) + \varepsilon \Delta q_1(w)]$ e não perturbado $q_1(w)$ na fronteira $\eta = 1$, respectivamente. Um procedimento similar é usado para se obter o problema de sensibilidade para a função $\Delta T_2(\xi, \eta, t)$, resultante da perturbação do fluxo de calor $q_2(w)$ por $\varepsilon \Delta q_2(w)$, na fronteira $\eta = N$. Desta forma, são obtidos os problemas de sensibilidade para a determinação das funções $\Delta T_j(\xi, \eta, t)$, para $j = 1, 2$, respectivamente, como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(J\rho\Delta T_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{U}\rho\Delta T_j)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\tilde{V}\rho\Delta T_j)}{\partial \eta} = \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\alpha_{11}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_j}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{12}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_j}{\partial \eta} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\alpha_{21}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_j}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{22}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_j}{\partial \eta} \right] \end{aligned}$$

em $1 < \xi < M, 1 < \eta < N$ e $t > 0$ (3.20)

$$\Delta T_j = 0 \quad \text{em } t = 0, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.21)$$

$$\frac{\kappa}{J} \left[\alpha_{21} \frac{\partial(\Delta T_j)}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial(\Delta T_j)}{\partial \eta} \right] = -\delta_{1j} \Delta q_1(w) \sqrt{\alpha_{22}}$$

em $\eta = 1, 1 < \xi < M$ e $t > 0$ (3.22)

$$\frac{\kappa}{J} \left[\alpha_{21} \frac{\partial(\Delta T_j)}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial(\Delta T_j)}{\partial \eta} \right] = -\delta_{2j} \Delta q_2(w) \sqrt{\alpha_{22}}$$

em $\eta = N, 1 < \xi < M$ e $t > 0$ (3.23)

$$\Delta T_j = 0 \quad t = 0, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.24)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & , \text{se } i \neq j \\ 1 & , \text{se } i = j \end{cases} \quad (3.25)$$

3.4 Problema Adjunto

O problema adjunto é obtido multiplicando-se a equação de conservação geral (3.3), escrita para $\phi \equiv T(\xi, \eta, t)$ (equação da energia), por um multiplicador de Lagrange $\lambda(\xi, \eta, t)$ e integrando-a nos domínios do espaço e do tempo. A expressão resultante é então adicionada ao funcional dado pela equação (3.14) a fim de se obter:

$$\begin{aligned} G[q_1(w), q_2(w)] = & \frac{1}{2} \int_{\xi=1}^M \int_{\eta=1}^N \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S (T_s - \mu_s)^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s) dt d\eta d\xi \\ & + \int_{\xi=1}^M \int_{\eta=1}^N \int_{t=0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial(J\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{U}\rho T)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\tilde{V}\rho T)}{\partial \eta} \right. \\ & \quad - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\alpha_{11}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{12}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] \\ & \quad \left. - \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\alpha_{21}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial T}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{22}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] \right\} \lambda(\xi, \eta, t) J dt d\eta d\xi \quad (3.26) \end{aligned}$$

onde $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac e \mathbf{r}_s é o vetor com as posições do sensor (ξ_s, η_s) para $s = 1, \dots, S$.

A seguir perturba-se $q_1(w)$ por $\varepsilon \Delta q_1(w)$ e $T(\xi, \eta, t)$ por $\varepsilon \Delta T_1(\xi, \eta, t)$ na equação (3.26) e aplica-se o seguinte processo limite para se obter a derivada funcional do gradiente $G[q_1(w), q_2(w)]$ na direção da perturbação $\delta q_1(w)$ [7, 49–51]:

$$D_{\Delta q_1} G[q_1(w), q_2(w)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{G_\varepsilon(q_{1\varepsilon}) - G_\varepsilon(q_1)}{\varepsilon} = 0 \quad (3.27)$$

onde $G_\varepsilon(q_{1\varepsilon})$ e $G(q_1)$ denotam o funcional (3.26) escrito para o fluxo de calor perturbado $[q_1(w) + \varepsilon \Delta q_1(w)]$ e não perturbado $q_1(w)$ na fronteira $\eta = 1$, respectivamente. A seguinte expressão é então obtida:

$$\begin{aligned}
D_{\Delta q_1} G[q_1(w), q_2(w)] &= \frac{1}{2} \int_{\xi=1}^M \int_{\eta=1}^N \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S (T_s - \mu_s)^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s) \Delta T_{1s} dt d\eta d\xi \\
&+ \int_{\xi=1}^M \int_{\eta=1}^N \int_{t=0}^{t_f} \left\{ \frac{\partial(J\rho\Delta T_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\tilde{U}\rho\Delta T_1)}{\partial \xi} + \frac{\partial(\tilde{V}\rho\Delta T_1)}{\partial \eta} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\alpha_{11}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_1}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{12}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_1}{\partial \eta} \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\alpha_{21}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_1}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{22}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial \Delta T_1}{\partial \eta} \right] \right\} \lambda(\xi, \eta, t) J dt d\eta d\xi \quad (3.28)
\end{aligned}$$

Realizando-se um processo de integração por partes na segunda integral aparecendo do lado direito da equação (3.28), utilizando-se as condições inicial e de contorno do problema de sensibilidade para $\Delta T_1(\xi, \eta, t)$ e também fazendo com que os coeficientes de $\Delta T_1(\xi, \eta, t)$ na equação resultante se anulem, o seguinte *problema adjunto* é obtido:

$$\begin{aligned}
-\rho J \frac{\partial(\lambda J)}{\partial t} - \tilde{U}\rho \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \xi} - \tilde{V}\rho \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \eta} &= \\
\frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\alpha_{11}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{12}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \eta} \right] & \\
+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\alpha_{21}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \xi} + \frac{\alpha_{22}}{J} \frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \eta} \right] - \sum_{s=1}^S (T_s - \mu_s) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s) & \\
\text{em } 1 < \xi < M, 1 < \eta < N \text{ e } 0 < t < t_f & \quad (3.29)
\end{aligned}$$

$$\lambda = 0 \quad \text{em } \xi = M, 1 < \eta < N \text{ e } 0 < t < t_f \quad (3.30)$$

$$\lambda = 0 \quad \text{em } t = t_f, 1 < \xi < M \text{ e } 1 < \eta < N \quad (3.31)$$

$$\alpha_{12} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \eta} = 0 \quad \text{em } \eta = 1, 1 < \xi < M \text{ e } 0 < t < t_f \quad (3.32)$$

$$\alpha_{12} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \xi} + \alpha_{22} \frac{\partial(\lambda J)}{\partial \eta} = 0 \quad \text{em } \eta = N, 1 < \xi < M \text{ e } 0 < t < t_f \quad (3.33)$$

Nota-se que o problema adjunto envolve uma condição de contorno na saída do canal e também uma condição no tempo final, conforme dado pelas equações (3.31) e (3.32) (ao invés da condição de contorno na entrada do canal e de uma condição no tempo inicial), além de termos transientes e convectivos negativos na (3.29). Contudo, tal problema pode ser transformado em uma forma mais usual, através das seguintes transformações de variáveis:

$$\xi^* = M - \xi \quad \eta^* = N - \eta \quad t^* = t_f - t \quad (3.34)$$

Um processo limite análogo ao da equação (3.27) é usado para se obter a derivada direcional do funcional $G[q_1(w), q_2(w)]$ na direção da perturbação $\Delta q_2(w)$ [7, 49–51]. Após realizar tal processo, pode-se obter o problema adjunto resultante da perturbação em $q_2(w)$, que é idêntico aquele dado pelas equações (3.29–3.31) resultando da perturbação em $q_1(w)$. Assim, apenas um problema adjunto precisa ser resolvido a cada iteração do método do gradiente conjugado, apesar de duas funções serem desconhecidas.

3.5 Equações do Gradiente

Durante a derivação do problema adjunto, resultante da perturbação em $q_1(w)$, a derivada funcional do gradiente na direção $\Delta q_1(w)$ se reduz a

$$D_{\Delta q_1} G[q_1(w), q_2(w)] = - \int_{\xi=1}^M \int_{t=0}^{t_f} \left[\frac{\lambda J \sqrt{\alpha_{22}}}{C_p} \right]_{\eta=1} \Delta q_1(w) dt d\xi \quad (3.35)$$

Pode-se agora usar a hipótese que as funções desconhecidas pertencem ao espaço das funções quadráticas integráveis no domínio Ω de interesse, para cada um dos três tipos de problemas inversos considerados aqui.

Para o Problema I, onde $w \equiv t$ e $\Omega \equiv]0, t[$, a derivada direcional de $G[q_1(t), q_2(t)]$ na direção da perturbação $\Delta q_1(t)$ é dada por [7, 49–51]:

$$D_{\Delta q_1} G[q_1(t), q_2(t)] = \int_{t=0}^{t_f} \nabla G[q_1(t)] \Delta q_1(t) dt \quad (3.36)$$

Assim, comparando-se as equações (3.35) e (3.36), pode-se obter a equação para o gradiente relacionado à estimativa de $q_1(t)$ para o Problema I como:

$$\nabla G[q_1(t)] = - \int_{\xi=1}^M \left[\frac{\lambda J}{C_p} \sqrt{\alpha_{22}} \right]_{\eta=1} d\xi \quad (3.37)$$

Para o Problema II, onde $w \equiv \xi$ e $\Omega \equiv]1, M[$, a derivada direcional de $G[q_1(\xi), q_2(\xi)]$ na direção da perturbação $\Delta q_1(\xi)$ é dada por [7, 49–51]:

$$D_{\Delta q_1} G[q_1(\xi), q_2(\xi)] = \int_{\xi=1}^M \nabla G[q_1(\xi)] \Delta q_1(\xi) \sqrt{\alpha_{22}} d\xi \quad (3.38)$$

Assim, comparando as equações (3.35) e (3.38), pode-se obter a equação para o gradiente para o Problema II, resultando das perturbações em $q_1(\xi)$ como

$$\nabla G[q_1(\xi)] = - \int_{t=0}^{t_f} \left[\frac{\lambda J}{C_p} \right]_{\eta=1} dt \quad (3.39)$$

Considera-se agora o Problema III, onde o fluxo de calor possui variação desconhecida tanto no tempo quanto no espaço, ou seja, $w \equiv (\xi, t)$ e $\Omega \equiv]1, M[\times]0, t_f[$. Para este caso, a derivada direcional de $G[q_1(\xi, t), q_2(\xi, t)]$ na direção da perturbação $\Delta q_1(\xi, t)$ é dada por [7, 49–51]:

$$D_{\Delta q_1} G[q_1(w), q_2(w)] = \int_{\xi=1}^M \int_{t=0}^{t_f} \nabla G[q_1(\xi, t)] \Delta q_1(\xi, t) \sqrt{\alpha_{22}} dt d\xi \quad (3.40)$$

Assim, comparando-se as equações (3.35) e (3.40), pode-se obter a seguinte expressão para o gradiente da estimativa de $q_1(\xi, t)$:

$$\nabla G[q_1(\xi, t)] = - \left[\frac{\lambda J}{C_p} \right]_{\eta=1} \quad (3.41)$$

Procedimentos análogos podem ser obtidos para se obter as equações do gradiente para a estimativa da função $q_2(w)$. Nestes casos, tais expressões para os Problemas I, II e III são dadas por:

$$\nabla G[q_2(t)] = - \int_{\xi=1}^M \left[\frac{\lambda J}{C_p} \sqrt{\alpha_{22}} \right]_{\eta=N} d\xi \quad (3.42)$$

$$\nabla G[q_2(\xi)] = - \int_{t=0}^{t_f} \left[\frac{\lambda J}{C_p} \right]_{\eta=N} dt \quad (3.43)$$

$$\nabla G[q_2(\xi, t)] = - \left[\frac{\lambda J}{C_p} \right]_{\eta=N} \quad (3.44)$$

3.6 Procedimento Iterativo

O procedimento iterativo do método do gradiente conjugado, aplicado à estimativa simultânea de $q_j(w)$, para $j = 1, 2$, é dado por [7, 49–51]:

$$q_j^{k+1}(w) = q_j^k(w) - \beta_j^k d_j^k(w) \quad j = 1, 2 \quad (3.45)$$

onde k é o número de iterações.

As direções de procura $d_j^k(w)$ são obtidas de

$$d_j^k(w) = \nabla G[q_j^k(w)] + \gamma_j^k d_j^{k-1}(w) \quad j = 1, 2 \quad (3.46)$$

Os coeficientes de conjugação γ_j^k podem ser obtidos da expressão de Fletcher-Reeves:

$$\gamma_j^k = \frac{\|\nabla G[q_j^k(w)]\|_{\Omega}^2}{\|\nabla G[q_j^{k-1}(w)]\|_{\Omega}^2} \quad \text{para } k = 1, 2, \dots, \text{ com } \gamma_j^0 = 0 \text{ para } k = 0, j = 1, 2 \quad (3.47)$$

onde a norma \mathcal{L}_2 no domínio Ω é definida pela equação (3.18).

As expressões para os passos de procura β_j^k , para $j = 1, 2$, são obtidas minimizando-se $G[q_1^{k+1}(w), q_2^{k+1}(w)]$ com respeito a β_1^k e β_2^k [7], obtendo-se então:

$$\beta_1^k = \frac{C_4 C_5 - C_3 C_1}{C_5 C_2 - C_3^2} \quad \beta_2^k = \frac{C_1 C_2 - C_3 C_4}{C_5 C_2 - C_3^2} \quad (3.48)$$

onde

$$C_1 = \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S [T(\mathbf{r}_s, t; q_1, q_2) - \mu_s(t)] \Delta T_2(\mathbf{r}_s, t; d_2^k) dt \quad (3.49a)$$

$$C_2 = \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S [\Delta T_1(\mathbf{r}_s, t; d_1^k)]^2 dt \quad (3.49b)$$

$$C_3 = \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S \Delta T_1(\mathbf{r}_s, t; d_1^k) \Delta T_2(\mathbf{r}_s, t; d_2^k) dt \quad (3.49c)$$

$$C_4 = \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S [T(\mathbf{r}_s, t; q_1, q_2) - \mu_s(t)] \Delta T_1(\mathbf{r}_s, t; d_1^k) dt \quad (3.49d)$$

$$C_5 = \int_{t=0}^{t_f} \sum_{s=1}^S [\Delta T_2(\mathbf{r}_s, t; d_2^k)]^2 dt \quad (3.49e)$$

Nas equações (3.49a–3.49e), $\Delta T_1(\mathbf{r}_s, t; d_1^k)$ e $\Delta T_2(\mathbf{r}_s, t; d_2^k)$ são as soluções dos problemas de sensibilidade nas posições de medidas $\mathbf{r}_s = (\xi_s, \eta_s)$, dadas pelas equações (3.20–3.24) para $j = 1, 2$, respectivamente, fazendo-se $\Delta q_j(w) = d_j^k(w)$

3.7 Critério de Parada

O procedimento iterativo do método do gradiente conjugado não é capaz por si só de obter soluções regularizadas para o problema inverso. Na verdade, é geralmente observado que erros aleatórios, que porventura estejam presentes, são amplificados na solução dos problemas inversos, devido ao fato destes serem mal-postos. Contudo, o uso do método do gradiente conjugado pode resultar em soluções estáveis se o *Princípio da Discrepância* [49–51] for usado para especificar a tolerância do critério de parada do procedimento iterativo. No Princípio da Discrepância, a solução é considerada suficientemente acurada quando a diferença entre as temperaturas estimadas e medidas é da ordem de grandeza dos erros de medida, ou seja,

$$|T[\xi, \eta, t; q_1(w), q_2(w)] - \mu_s(t)| \approx \sigma \quad (3.50)$$

onde σ é o desvio padrão das medidas, o qual é considerado constante nesta análise.

O critério de parada usado aqui é dado por

$$G[q_1(w), q_2(w)] < \varepsilon \quad (3.51)$$

onde $G[q_1(w), q_2(w)]$ é calculado pela equação (3.14). A tolerância ε baseada no Princípio da Discrepância é obtida substituindo-se a equação (3.50) na equação (3.14), resultando em:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} S \sigma^2 t_f \quad (3.52)$$

Para casos envolvendo medidas sem erro, podem ser obtidas soluções estáveis para o problema inverso especificando-se a tolerância ε como um valor pequeno, uma vez que nenhuma perturbação estará presente nos dados de entrada (medidas).

3.8 Resultados

Para os resultados apresentados a seguir, foram considerados casos de escoamento laminar de água ($\rho = 1000.52 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 0.001 \text{ kg/ms}$, $k = 0.597 \text{ W/m}$, $C_p = 4.1818 \cdot 10^3 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$) dentro de um canal com expansão gradual, tal como ilustrado na figura 3.3 [69, 70].

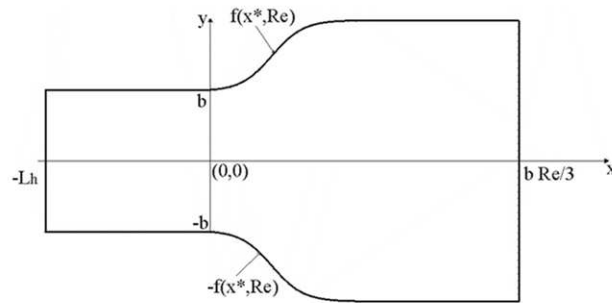


Figura 3.3: Geometria para o canal com expressão gradual.

A geometria do canal depende do número de Reynolds, de tal forma que a expansão diminui a medida que o número de Reynolds aumenta. A equação para a parede superior do canal, para $x > 0$ é dada por

$$f(x^*, \text{Re}) = b + \frac{b}{2} \left[\tanh(2) - \tanh\left(2 - \frac{30x^*}{\text{Re}}\right) \right] \quad (3.53)$$

onde

$$x^* = \frac{x}{b}; \quad y^* = \frac{y}{b}; \quad u^* = \frac{u}{u_0}; \quad v^* = \frac{v}{u_0}; \quad \text{Re} = \frac{\rho u_0 b}{\mu} \quad (3.54)$$

e b é metade da largura do canal para $-L_h < x \leq 0$, u_0 é a velocidade uniforme de entrada em $x = -L_h$ e L_h é o comprimento de entrada do canal. A superfície inferior do canal é simétrica com respeito ao eixo x .

O problema definido acima foi resolvido numericamente e sua solução verificada contra resultados benchmark encontrados na literatura [38, 39] para a função corrente na parede:

$$\omega = \frac{\partial u^*}{\partial y^*} \cos \theta - \frac{\partial v^*}{\partial x^*} \sin \theta \quad (3.55)$$

onde θ é o ângulo de inclinação da superfície do canal com respeito à direção longitudinal. Os resultados desta validação podem ser encontrados em [40].

Para o problema inverso, foram usadas medidas simuladas contendo erros aleatórios, com distribuição Gaussiana, média zero e desvio padrão (σ) constante. Tais medidas foram obtidas adicionando-se um ruído aleatório à solução do problema direto para uma variação funcional conhecida dos fluxos de calor nas fronteiras. A solução do problema direto foi calculada considerando-se $q_0 = 1000 \text{ W/m}^2$ e usando-se as formas funcionais descontínuas e com variações bruscas para $f_{\xi_j}(\xi)$ e $f_{t_j}(t)$:

$$f_{\xi 1}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{para } 1 \leq \xi \leq 80 \text{ e } 108 \leq \xi \leq 135 \\ 2 & \text{para } 81 \leq \xi \leq 107 \end{cases} \quad (3.56)$$

$$f_{\xi 2}(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{para } 1 \leq \xi \leq 80 \text{ e } 108 \leq \xi \leq 135 \\ \frac{\xi}{13} - \frac{68}{13} & \text{para } 81 \leq \xi \leq 94 \\ -\frac{\xi}{13} + \frac{120}{13} & \text{para } 95 \leq \xi \leq 107 \end{cases} \quad (3.57)$$

$$f_{t 1}(t) = \begin{cases} 1 & \text{para } 0 \leq t \leq 667 \text{ e } 1333 \leq t \leq 2000 \\ 2 & \text{para } 667 \leq t \leq 1333 \end{cases} \quad (3.58)$$

$$f_{t2}(t) = \begin{cases} 1 & \text{para } 0 \leq t \leq 667 \text{ e } 1333 \leq t \leq 2000 \\ \frac{6t}{2000} - 1 & \text{para } 667 \leq t \leq 1000 \\ -\frac{6t}{2000} + 5 & \text{para } 1000 \leq t \leq 1333 \end{cases} \quad (3.59)$$

Uma análise das equações (3.30), (3.31), (3.41) e (3.44) revela que o gradiente da função para o Problema III é nulo no tempo final e na saída do canal. Desta forma, a estimativa inicial usada para o método do gradiente conjugado não mudará com o avanço do procedimento iterativo, gerando instabilidades na solução do problema inverso na vizinhança destes pontos [9,35]. Dificuldades similares são encontradas para as funções desconhecidas no tempo final para o Problema I e para a saída do canal no Problema II. A fim de contornar tais problemas, um tempo final maior do que o de interesse foi usado para a análise do problema inverso. Para os casos envolvendo a estimativa dos fluxos de calor dependentes do tempo, foram usadas medidas até 2200 s, mas apenas os resultados no domínio $0 < t < 2000$ s são apresentados. Além disso, os sensores não foram localizados na saída do canal.

Diferentes casos teste foram examinados, dependendo do tipo de problema inverso em análise, do número e localização dos sensores, bem como do nível de erros aleatórios nas medidas. Para todos os casos teste, um fluxo de calor igual a zero foi utilizado como estimativa inicial para $q_1(w)$ e $q_2(w)$. A geometria do canal estudada foi aquela associada com $Re = 100$, com a parede superior definida pela equação (3.53) e usando $b = 0.05$ m e $L_h = 0.66$ m. Os casos teste usados para a análise inversa são apresentados nas tabelas (3.2-3.4), para os Problemas I, II e III, respectivamente.

A tabela 3.2 apresenta os casos teste 1 a 6, os quais lidam com a solução do Problema I para a estimativa dos fluxos de calor dependentes do tempo. Para estes casos, foram usadas medidas sem erro ($\sigma = 0$) de dois sensores, cada um deles localizado próximo às superfícies superior e inferior do canal. O efeito da posição dos sensores na solução do problema inverso foi analisado nestes casos.

Para os casos teste 1 a 4, os sensores foram localizados em regiões de recirculação do escoamento, conforme pode ser visto nas figuras 3.4 e 3.5. Estas figuras mostram a localização dos sensores na malha de volumes finitos, para cada um dos casos teste do Problema I, bem como as linhas de corrente no canal. Os sensores foram localizados no centro do primeiro, segundo, terceiro e quarto volume de controles a partir das paredes do canal para os casos teste 1 a 4, respectivamente. Para o caso teste 5, os sensores foram localizados no centro do quinto volume de controle a partir da parede do canal, no início da região de expansão. O caso

teste 6 envolveu o uso de sensores localizados no centro do primeiro volume de controle a partir da parede do canal, na região de duto reta, no após a expansão. As medidas foram tomadas com uma frequência de 1 Hz.

Em todos os casos analisados foi calculado o erro RMS, o qual é definido como:

$$\varepsilon_{RMS,j} = \sqrt{\frac{1}{(M-1)I} \sum_{m=1}^{M-1} \sum_{i=1}^I [q_{ex,j}(\xi_m, t_i) - q_{est,j}(\xi_m, t_i)]^2} \quad j = 1, 2. \quad (3.60)$$

onde M e I são o número de volumes da malha na direção ξ e o número de medidas transientes por sensor, respectivamente. Os subscritos *ex* e *est* referem-se às quantidades exatas e estimadas, respectivamente.

A tabela 3.2 mostra que, conforme esperado, o erro *RMS* aumenta a medida que os sensores são localizados mais distantes das paredes dos canais. Contudo, pode-se verificar na figura 3.6 que estimativas bem acuradas podem ser obtidas com os sensores localizados no segundo volume de controle a partir das paredes do canal, tal como no caso teste 2. Uma comparação para os erros RMS dos casos teste 1, 5 e 6 revela que as funções estimadas não são afetadas sensivelmente pela presença da região de recirculação no escoamento. De fato, a tabela 3.2 mostra que estimativas comparáveis foram obtidas com os sensores localizados no início da expansão, na região de recirculação ou na parte reta do canal após a expansão. Isto ocorre pois os sensores foram localizados dentro da camada limite térmica próxima às paredes dos canais e, portanto, fortemente afetados pelos fluxos de calor nas paredes do canal.

A tabela 3.3 apresenta os casos teste estudados para o Problema II. Dois diferentes números de sensores, próximos às paredes do canal, foram examinados para a estimativa das funções espacialmente dependentes do Problema II: 13 sensores (casos teste 7 e 9) e 28 sensores (caso teste 8). Os sensores foram distribuídos uniformemente ao longo do canal e localizados no segundo volume de controle a partir das paredes do canal. Uma vez que o número de sensores foi menor que o número de volumes de controle usados para a discretização, um procedimento de interpolação foi usado para as temperaturas medidas ao longo da direção ξ . A subrotina GCVSPL da biblioteca NETLIB, baseada em um procedimento de suavização com validação cruzada, foi usada para a interpolação. Medidas sem erro ($\sigma = 0$) foram usadas para os casos teste 7 e 8, enquanto medidas com erros aleatórios com desvio padrão $\sigma = 0.01T_{max}$, onde T_{max} é a máxima temperatura medida, foram usadas para o caso teste 9. Uma comparação dos erros RMS, ξ_{RMS} , para os casos teste 7 e 8 indicam que estimativas mais acuradas podem ser obtidas usando-se mais sensores na análise inversa. Além disso, pode ser visto na tabela 3.2 que o erro *RMS* é muito pouco afetado pela presença de erros aleatórios nas medidas, provavelmente devido ao procedimento de interpolação usado. Os

resultados obtidos para o caso teste 9 são mostrados na figura 3.7. A concordância entre as funções estimada e exata é muito boa.

Os casos teste examinados para o Problema III, envolvendo a estimativa de variações simultâneas no espaço e no tempo para os fluxos de calor, são apresentadas na tabela 3.4, juntamente com seus respectivos erros *RMS*. Para a estimativa da função desconhecida nos casos teste 10 e 11, considerou-se a presença de 28 sensores uniformemente distribuídos ao longo do canal e localizados no segundo volume de controle a partir das paredes do canal. Medidas sem erros foram usadas para o caso teste 10, enquanto medidas com $\sigma = 0.01T_{max}$ foram usadas para o caso teste 11. Pode-se notar na tabela 3.4 um aumento no erro *RMS* quando as medidas com erros aleatórios foram usadas na análise. Contudo, as figuras 3.8 e 3.9 mostram que as funções estimadas foram bastante acuradas. Estas figuras apresentam os resultados obtidos para os casos teste 11, para $t = 999$ s e 1665 s, respectivamente.

Caso Teste	Localização do Sensor		ε_{RMS}	
	Região	Volume de Controle	$q_1(\xi)$	$q_2(\xi)$
1	Recirculação	Primeiro	77.39	13.87
2	Recirculação	Segundo	106.26	45.08
3	Recirculação	Terceiro	140.18	116.65
4	Recirculação	Quarto	213.27	148.25
5	Começo da expansão	Primeiro	80.39	28.13
6	Trecho final do tubo reto	Primeiro	79.18	16.34

Tabela 3.2: Casos teste para o Problema I.

Caso Teste	σ	Número de Sensores	ε_{RMS}	
			$q_1(\xi)$	$q_2(\xi)$
7	0	13	123.23	37.69
8	0	28	86.33	30.40
9	$0.01T_{max}$	13	126.61	35.40

Tabela 3.3: Casos teste para o Problema II.

Caso Teste	σ	ε_{RMS}	
		$q_1(\xi)$	$q_2(\xi)$
10	0	148.18	35.82
11	$0.01T_{max}$	187.26	76.98

Tabela 3.4: Casos teste para o Problema III.

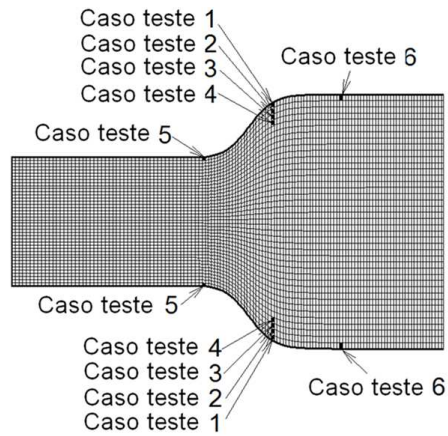
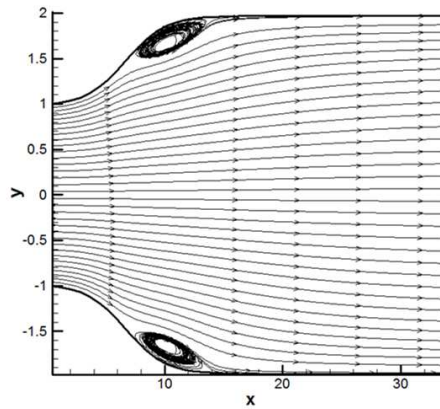


Figura 3.4: Localização dos sensores para o Problema I: Casos teste 1 a 6.

Figura 3.5: Linhas de corrente para $Re=100$ na região de expansão.

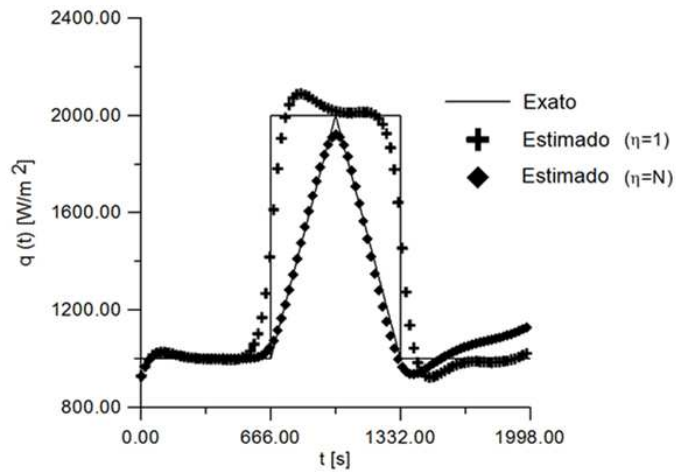


Figura 3.6: Fluxo de calor estimado e medido para o caso teste 2 (Problema I)

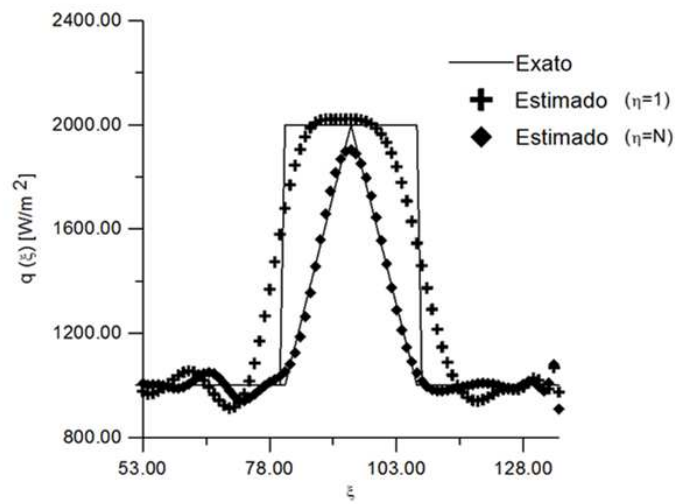


Figura 3.7: Fluxos de calor estimado e exato para o caso teste 9 (Problema II)

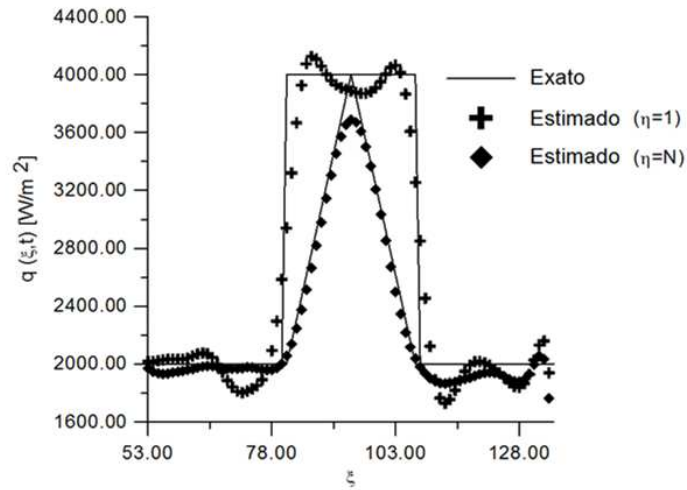


Figura 3.8: Fluxos de calor estimado e exato para o caso teste 11 (Problema III) para $t = 999$ s

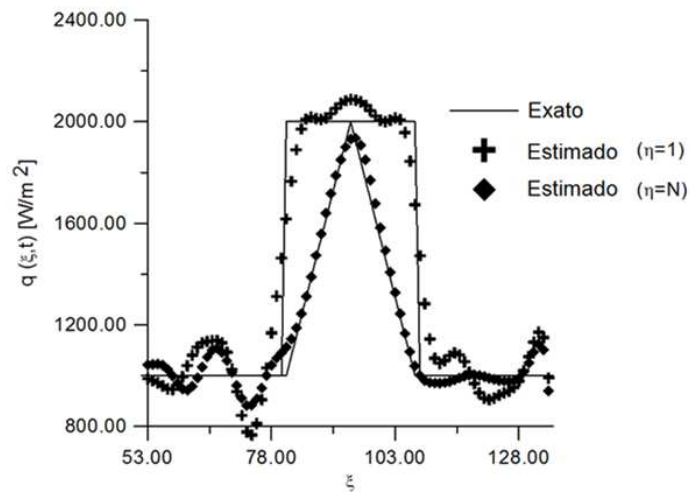


Figura 3.9: Fluxos de calor estimado e exato para o caso teste 11 (Problema III) para $t = 1665$ s

3.9 Conclusões

Neste capítulo foi apresentado uma aplicação do método do gradiente conjugado para estimativa simultânea de dois fluxos de calor em um duto de geometria irregular. Uma abordagem por meio de estimativa de funções foi empregada, onde três tipos diferentes de problemas inversos foram considerados, envolvendo a estimativa de fluxos de calor variando somente com o espaço, somente com o tempo ou simultaneamente com o espaço e com o tempo. Os resultados obtidos com medidas simuladas para funções descontínuas revelaram que estimativas bastante acuradas puderam ser obtidas através desta abordagem. Além disso, a presença de regiões de recirculação nos escoamentos analisados não afetou a precisão da solução.

Capítulo 4

Aplicação do Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov

4.1 Introdução

Na presente seção serão apresentados os fundamentos e formulação matemática para a inferência Bayesiana de parâmetros em um problema de transferência de calor pelo Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC). A aplicação desse método, bem como a análise comparativa dos resultados obtidos por três diferentes abordagens na implementação computacional, através da combinação dos algoritmos de Gibbs e Metropolis-Hastings, constituem o objetivo desta seção.

Em problemas de transferência de calor a determinação das condições de contorno do problema e das propriedades termofísicas do material estudado são de fundamental importância para o correto equacionamento e dimensionamento de sistemas de isolamento térmico ou de intensificação de troca de calor, e por isso é requerida uma alta precisão na determinação dos parâmetros necessários.

Se as condições de contorno e as propriedades de um determinado material em estudo são conhecidas, pode-se de forma relativamente fácil determinar o perfil de temperatura no interior desta amostra por técnicas usuais para a solução de problemas de transferência de calor. Esta classe de problemas é chamada de problema direto em transferência de calor. O termo problema direto, refere-se então, a problemas definidos por uma ou mais equações diferenciais, parciais ou ordinárias (relacionadas a princípios de conservação), uma completa descrição dos parâmetros destas equações (usualmente relacionados a propriedades do material),

e condições de contorno e iniciais para cada potencial estudado (como temperatura e velocidade).

Entretanto, em muitos problemas de engenharia, nem sempre é possível saber de antemão as propriedades do material em estudo e/ou definir-se as condições de contorno. Para solução de problemas deste tipo, pode-se estimar as condições de contorno em função do tempo, propriedades termofísicas ou outros parâmetros, utilizando medidas transientes de temperatura, tomadas em um ou mais pontos no interior da amostra. Esta situação física caracteriza o que habitualmente chamamos de um problema inverso de condução de calor [71].

Problemas inversos são matematicamente classificados como mal-postos, ao passo que problemas diretos de transferência de calor são bem-postos [71]. A solução de um problema bem-posto tem que satisfazer as condições de existência, unicidade e estabilidade com respeito aos dados de entrada. A existência da solução de um problema inverso pode, em muitos casos, ser assegurada com base em argumentos físicos. Por outro lado, a unicidade da solução pode ser provada matematicamente somente para alguns casos especiais. Além disso, de modo geral, técnicas convencionais são extremamente instáveis com relação aos dados de entrada. Assim, técnicas especiais são requeridas para sua solução de forma a atender a condição de estabilidade [71].

Métodos inversos baseados em inferência Bayesiana são técnicas onde, em princípio não se faz necessária a inversão de operadores matriciais para se obter a solução do problema. Assim, do ponto de vista Bayesiano, o problema inverso torna-se bem estável, sendo que alguns autores chegam mesmo a afirmar que o problema torna-se bem posto, sendo esta, portanto, uma grande vantagem em relação às técnicas tradicionais que geralmente são susceptíveis a instabilidades.

Neste contexto, na última década os métodos baseados em inferência Bayesiana têm se destacado como uma ferramenta poderosa no estudo de problemas inversos em várias áreas de conhecimento da engenharia. Em Transferência de Calor, só muito recentemente começaram a surgir os primeiros trabalhos [72].

4.2 Problema Físico e Formulação Matemática

O problema físico estudado nesta seção é apresentado na figura 4.1, que consiste de uma placa inicialmente a uma temperatura $T = T_0$, e subitamente sujeita a uma temperatura de $T = 0^\circ\text{C}$ em sua face $x = 0$.

O presente problema de condução de calor foi então modelado considerando-se as seguintes hipóteses:

- A placa foi tratada como um meio semi-infinito e a sua difusividade térmica foi assumida independente da temperatura e desconhecida, “ α ”;
- A condução de calor no material foi considerada unidimensional;

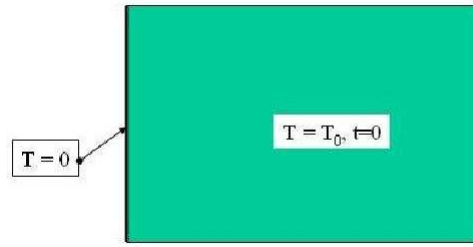


Figura 4.1: Problema físico estudado.

- A temperatura inicial da amostra foi considerada uniforme e desconhecida, “ T_0 ”.

Assim, a formulação matemática dimensional do modelo físico considerado neste exemplo é dada por:

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \infty \quad t > 0 \quad (4.1)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad 0 \leq x < \infty \quad (4.2)$$

$$T(0, t) = 0, \quad T > 0 \quad (4.3)$$

O problema diferencial parcial dado pelas equações (4.1) a (4.3) pode ser resolvido analiticamente via separação de variáveis [75], obtendo-se a seguinte expressão para o campo de temperatura na placa:

$$T(x, t) = T_0 \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4\alpha t}} \right) \quad (4.4)$$

onde $T(x, t)$ é a temperatura em um ponto x da placa no tempo t , T_0 é a temperatura inicial da placa e α é a sua difusividade térmica. O presente exemplo utilizou então dados simulados para a temperatura na placa, gerados a partir do problema físico acima formulado. Foi construído um código computacional na plataforma Mathematica 5.2 [76] para obter os dados simulados de temperatura na placa e em seguida realizar a etapa de estimativa simultânea dos parâmetros: temperatura inicial T_0 e difusividade térmica da placa α , fazendo uso do método de Monte Carlo via Cadeia de Markov.

4.3 Dados Simulados

Para a etapa de solução do problema inverso que será detalhada mais a frente, o presente exemplo utilizou-se de dados de temperatura simulados a partir de uma distribuição normal com média dada pela solução do problema direto, equação (4.4), e variância conhecida σ^2 .

$$T(x_{sensor}, t) \sim N \left[T_0 \operatorname{erf} \left(\frac{x_{sensor}}{\sqrt{4\alpha t}} \right), \sigma^2 \right] \quad (4.5)$$

Foram geradas 250 medidas de temperaturas discretas no tempo para uma dada posição da placa $x_{sensor} = 0,01 \text{ m}$, com variância $\sigma^2 = 2^\circ\text{C}$. Os valores dos parâmetros utilizadas nesta etapa foram:

$$T_0 = 50^\circ\text{C}, \alpha = 4.9 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \quad (4.6)$$

Como a distribuição Normal a partir da qual os dados foram simulados, tem sua média variando com o tempo t , tem-se diferentes funções de densidade de probabilidade para cada um dos tempos. A figura 4.2 mostra curvas Gaussianas, de onde os dados simulados foram gerados, variando com o tempo. O primeiro tempo, $t = 0 \text{ s}$, e sua média é dada pela temperatura $T_0 = 50^\circ\text{C}$, como dado pela condição inicial, equação (4.2).

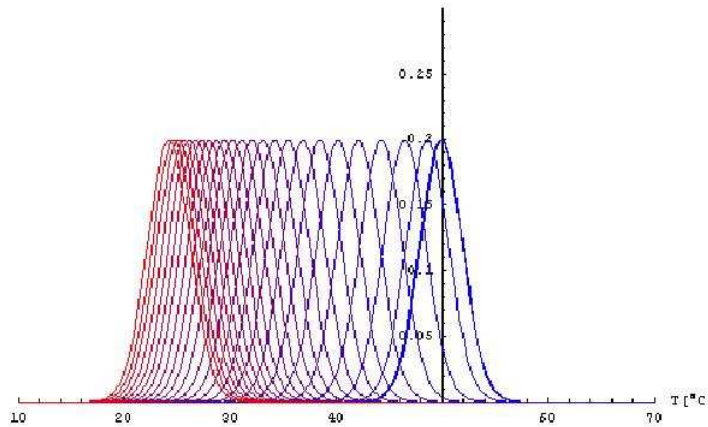


Figura 4.2: Funções de distribuição de probabilidades, equação (4.5), para vários tempos.

A figura 4.3 compara a solução exata do problema de condução de calor unidimensional transiente dada pela equação (4.4), representada pela linha contínua, e os pontos gerados pela distribuição normal dada pela equação (4.5). Na figura 4.4 encontra-se um típico histograma de frequência normalizada dos dados simulados.

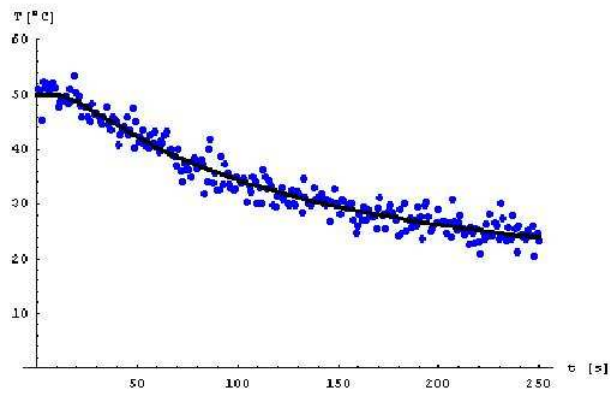


Figura 4.3: Dados simulados (pontos azuis) e a solução exata (linha contínua).

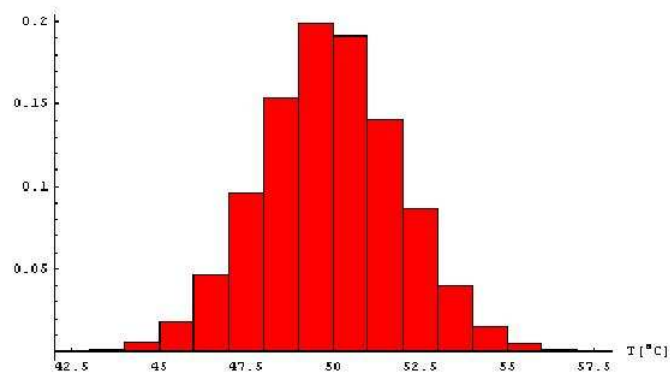


Figura 4.4: Histograma de frequências normalizado dos dados simulados de temperatura.

4.4 Problema Inverso via Inferência Bayesiana

Do ponto de vista Bayesiano, a solução de um problema inverso é uma função de densidade de probabilidade de θ dadas as observações X a posteriori $P(\theta|X)$, onde X é o vetor dos dados, temperaturas $T(x, t)$, e θ é o vetor dos parâmetros de interesse T_0 e α . A função de densidade de probabilidade de θ dado X pode ser escrita de acordo com a fórmula de Bayes:

$$p(\theta|X) = \frac{p(X|\theta)p(\theta)}{p(X)} \quad (4.7)$$

onde a verossimilhança é $p(X|\theta)$ e $p(\theta)$ é a distribuição a priori dos parâmetros. Em geral, a probabilidade $p(X)$ não é explícita e é difícil de ser calculada. Entretanto, o conhecimento de $p(X)$ pode ser desconsiderado se o espaço dos estados da posteriori puder ser explorado a menos de uma constante de normalização. Assim, a função de densidade de probabilidade da posteriori pode ser escrita como:

$$p(\theta|X) \propto p(X|\theta)p(\theta) \quad (4.8)$$

Assumindo que os dados de temperatura são independentes e identicamente distribuídos (i.i.d.), a verossimilhança pode ser escrita como:

$$p(X|\theta) = \frac{1}{(2\pi\sigma_T^2)^{-\frac{n}{2}}} \exp \left\{ -\frac{(X - F(\theta))^T (X - F(\theta))}{2\sigma_T^2} \right\} \quad (4.9)$$

onde F é a temperatura calculada em função dos parâmetros a serem estimados, dada pela equação (4.4), e X é a temperatura medida, e no caso do presente exemplo, as temperaturas são obtidas por dados simulados da distribuição normal dada pela equação (4.5). A distribuição a priori é o conhecimento, se existir, dos parâmetros, antes de X ser medido. A priori pode ser uma estimativa de $p(\theta)$ resultante de experimentos passados. Do ponto de vista de problemas inversos, a priori pode resultar na regularização do caráter mal-posto do problema. Para este exemplo foram adotadas distribuições uniformes para as priori dos parâmetros T_0 e θ para os respectivos intervalos, $45^\circ\text{C} \leq T_0 \leq 60^\circ\text{C}$ e $10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \leq \alpha \leq 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Métodos de amostragem numéricos são necessários quando a função de densidade de probabilidade da posteriori pode ter uma forma que não é padrão, o problema pode ser não linear, ou ter uma verossimilhança implícita. Além do mais, o espaço de estados da posteriori pode ter uma grande dimensão, e precisa-se obter a distribuição marginal de cada componente individualmente. O método numérico mais utilizado para explorar o espaço de estados da posteriori é a simulação de Monte Carlo, que aproxima a esperança de uma função de θ pela média da amostra. A simulação de Monte Carlo é baseada em uma grande amostra da função densidade de probabilidade (neste caso, a função de densidade

de probabilidade da posteriori $p(\theta|X)$. Várias estratégias de amostragem foram propostas. Entre elas, o Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC) é o mais poderoso. A idéia básica é simular um passeio aleatório no espaço de θ que converge para uma distribuição estacionária, que é a distribuição de interesse no problema.

4.5 Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov - MCMC

O método de Monte Carlo via Cadeia de Markov é uma versão iterativa dos métodos de Monte Carlo tradicionais. A idéia é obter uma amostra da distribuição a posteriori e calcular estimativas amostrais de características desta distribuição usando técnicas de simulação iterativa, baseadas em cadeias de Markov. Uma cadeia de Markov é um processo estocástico $\{\theta_0, \theta_1, \dots\}$ tal que a distribuição de θ_i dados todos os valores anteriores $\theta_0, \dots, \theta_{i-1}$ depende apenas de θ_{i-1} . Matematicamente,

$$P(\theta_i \in A | \theta_0, \dots, \theta_{i-1}) = P(\theta_i \in A | \theta_{i-1}) \quad (4.10)$$

para qualquer subconjunto A . Uma cadeia de Markov é mais precisamente definida pela sua probabilidade de transição $P(i, j) = P(i \rightarrow j)$, a qual define a probabilidade de que o processo, estando no estado s_i mova-se para o estado s_j em um único passo, conforme segue:

$$P(i, j) = P(i \rightarrow j) = P(\theta_{t+1} = s_j | \theta_t = s_i) \quad (4.11)$$

Os métodos MCMC requerem, para que se obtenha uma única distribuição de equilíbrio, que a cadeia seja [74]:

- Homogênea, i.e. as probabilidades de transição de um estado para outro são invariantes;
- Irredutível, i.e. cada estado pode ser atingido a partir de qualquer outro em um número finito de iterações;
- Aperiódica, i.e. não haja estados absorventes;

Assim, uma condição suficiente para se obter uma única distribuição estacionária é que o processo atenda à seguinte equação de balanço:

$$P(i \rightarrow j) p_i(\theta|X) = P(j \rightarrow i) p_j(\theta|X) \quad (4.12)$$

onde $p_i(\theta|X)$ e $p_j(\theta|X)$ são os estados distintos da distribuição de interesse. Uma questão importante de ordem prática é como os valores iniciais influenciam o comportamento da cadeia. A idéia é que conforme o número de iterações aumenta, a cadeia gradualmente esquece os valores iniciais e eventualmente converge para uma distribuição de equilíbrio. Assim, em aplicações práticas é comum que as iterações iniciais sejam descartadas, como se formassem uma amostra de aquecimento. O problema então consiste em construir algoritmos que gerem cadeias de Markov cuja distribuição converge para a distribuição de interesse. Os algoritmos MCMC mais comumente utilizados são o Metropolis-Hastings e o Amostrador de Gibbs [73].

4.6 MCMC - Algoritmo Metropolis-Hastings

Os algoritmos de Metropolis-Hastings usam a mesma idéia dos métodos de rejeição, i.e. um valor é gerado de uma distribuição auxiliar e aceito com uma dada probabilidade. Este mecanismo de correção garante a convergência da cadeia para a distribuição de equilíbrio. O algoritmo Metropolis-Hastings faz uso de uma função densidade de probabilidade auxiliar $q(\theta^*/\theta)$, da qual seja fácil obter valores amostrais. Supondo que a cadeia esteja em um estado θ , um novo valor candidato, θ^* , será gerado da distribuição auxiliar $q(\theta^*/\theta)$, dado o estado atual da cadeia θ , onde θ é o vetor dos parâmetros em estudo. O novo valor θ^* , é aceito com probabilidade dada pela Razão de Hastings :

$$\alpha(\theta, \theta^*) = \min \left[1, \frac{p(\theta^*|X)q(\theta/\theta^*)}{p(\theta|X)q(\theta^*/\theta)} \right]. \quad (4.13)$$

onde $p(\theta|X)$ é a distribuição a posteriori de interesse. Uma observação importante é que só precisamos conhecer $p(\theta|X)$ a menos de uma constante, uma vez que estamos trabalhando com razões entre densidades, e a constante de normalização se cancela. Isto é fundamental em aplicações Bayesianas, onde a densidade a posteriori não é conhecida completamente. Nota-se também que a cadeia pode permanecer no mesmo estado por muitas iterações, e na prática costuma-se monitorar isto calculando a porcentagem média de estados para as quais novos valores são aceitos. Em termos práticos, o algoritmo de Metropolis-Hastings pode ser especificado pelos seguintes passos [73]:

1. Inicializa-se o contador de iterações $i = 0$ e especifica-se um valor inicial $\theta^{(0)}$.
2. Gera-se um valor candidato $q(\theta^*)$ da distribuição $q(\theta^*/\theta)$.
3. Calcula-se a probabilidade de aceitação $\alpha(\theta, \theta^*)$ e gera-se uma amostra aleatória auxiliar de uma distribuição uniforme: $u \sim U(0, 1)$.

4. Se $u \leq \alpha$ então aceita-se o novo valor e faz-se $\theta^{(i+1)} = \theta^*$, caso contrário rejeita-se e faz-se $\theta^{(i+1)} = \theta^{(i)}$.
5. Incrementa-se o contador de i para $i + 1$ e volta-se ao passo 2.

4.7 MCMC - Amostrador de Gibbs

No amostrador de Gibbs a cadeia irá sempre se mover para um novo valor, i.e., não existe mecanismo de aceitação-rejeição. As transições de um estado para outro são feitas de acordo com as distribuições condicionais completas $p(\theta_i|\theta_{i-1})$, onde $\theta_{i-1} = (\theta_1, \dots, \theta_{i-1}, \theta_{i+1}, \dots, \theta_d)$. Em geral, cada uma das componentes θ_i pode ser uni ou multidimensional. Portanto, a distribuição condicional completa é a distribuição da i -ésima componente de θ_i condicionada em todas as outras componentes. Ela é obtida a partir da distribuição conjunta como,

$$p(\theta_i|\theta_{i-1}) = \frac{p(\theta)}{\int p(\theta) d\theta_i} \propto p(\theta) \quad (4.14)$$

Assim, para obter a distribuição condicional completa de θ_i basta pegar os termos da distribuição conjunta que não dependem de θ_i . Em muitas situações, a geração de uma amostra diretamente de $P(\theta)$ pode ser custosa, complicada ou simplesmente impossível, mas se as distribuições condicionais completas forem completamente conhecidas, então o amostrador de Gibbs é definido pelo seguinte esquema:

1. Inicializa-se o contador de iterações da cadeia $i = 0$;
2. Especifica-se valores iniciais $\theta^{(0)} = (\theta_1^{(0)}, \dots, \theta_d^{(0)})$;
3. Obtem-se um novo valor de $\theta^{(i)}$ a partir de $\theta^{(i-1)}$ através da geração sucessiva dos valores:

$$\begin{aligned} \theta_1^{(i)} &= p(\theta_1|\theta_2^{(i-1)}, \theta_3^{(i-1)}, \dots, \theta_d^{(i-1)}) \\ \theta_2^{(i)} &= p(\theta_2|\theta_1^{(i)}, \theta_3^{(i-1)}, \dots, \theta_d^{(i-1)}) \\ &\vdots \\ \theta_d^{(i)} &= p(\theta_d|\theta_1^{(i)}, \theta_2^{(i)}, \dots, \theta_{d-1}^{(i)}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

4. Incrementa-se o contador de ipara $i + 1$ e retorna-se ao passo 2 até obter convergência.

Assim, cada iteração se completa após d movimentos ao longo dos eixos coordenados das componentes de θ . Após a convergência, os valores resultantes formam uma amostra de $P(\theta)$. Mesmo em problemas de grandes dimensões todas as simulações podem ser univariadas, o que em geral é uma vantagem computacional. Nota-se que o amostrador de Gibbs é um caso especial do algoritmo de Metropolis-Hastings, no qual os elementos de θ são atualizados um de cada vez (ou em blocos), tomando a distribuição condicional completa como proposta e probabilidade de aceitação igual a 1 [73].

4.8 Metodologia de Solução

No contexto de solução de problemas inversos e estimativa de parâmetros em problemas de transferência de calor via inferência Bayesiana, no presente exemplo construiu-se um código computacional na plataforma Mathematica 5.2 [76], para estimar simultaneamente a temperatura inicial T_0 e a difusividade térmica da placa α , fazendo uso do método de Monte Carlo via Cadeia de Markov. Analisou-se comparativamente a aplicação deste método através de três diferentes metodologias:

CASO 1: Estimação do par paramétrico (α, T_0) através do algoritmo de Metropolis-Hastings, perturbando sequencialmente os dois parâmetros a cada iteração. Nesta versão o processo de aceitação ou rejeição se dá para a perturbação dos dois parâmetros.

CASO 2: Estimação do par paramétrico (α, T_0) através do algoritmo de Metropolis-Hastings, perturbando aleatoriamente um único parâmetro por iteração. Nesta versão o processo de aceitação ou rejeição se dá para a perturbação de um único parâmetro, ficando o outro parâmetro igual ao da iteração anterior.

CASO 3: Estimação do par paramétrico (α, T_0) através do algoritmo híbrido Gibbs e Metropolis-Hastings. O parâmetro α é gerado aleatoriamente por Metropolis-Hastings enquanto que o parâmetro T_0 é gerado a partir da sua condicional completa (Gibbs) a cada iteração. Nesta versão o processo de aceitação ou rejeição se dá para a perturbação apenas do parâmetro α , ficando o outro parâmetro igual ao da iteração anterior.

4.9 Resultados e Discussões

Nesta sub-seção serão apresentados os resultados da aplicação do método de Monte Carlo via Cadeia de Markov na solução do problema inverso de estimativa si-

multânea de condição inicial e propriedade termofísica em condução de calor unidimensional transiente, como apresentado anteriormente nesta seção, bem como a análise comparativa dos resultados obtidos pelas três diferentes abordagens na implementação computacional através da combinação dos algoritmos de Gibbs e Metropolis-Hastings. Para a etapa de simulação do MCMC foi construído um notebook na plataforma Mathematica 5.2, onde as principais funções utilizadas na estimativa dos parâmetros são apresentadas resumidamente abaixo:

- Verossimilhança para $T(x_{sensor}, t)$:

$$p(T|T_0, \alpha) = \frac{1}{(2\pi\sigma_T^2)^{-\frac{n}{2}}} e^{-\frac{[T_{exp} - T_{exata}(T_0, \alpha)]^2}{2\sigma_T^2}}$$

onde $x_{sensor} = 0.01 \text{ m}$ e $\sigma_T^2 = 2$;

- Priori para $T_0 \sim U[45, 60]$;
- Priori para $\alpha \sim U[10^{-7}, 10^{-5}]$;
- Função geradora dos pontos candidatos $q(\theta^*/\theta) : \theta^* = \theta + 2(rd - 1)(\theta_{max} - \theta_{min})w$, onde rd é um número randômico gerado de uma distribuição uniforme $U[0, 1]$ e θ_{max} e θ_{min} são os limites dos intervalos de cada parâmetro e w é o tamanho percentual do passo que se deseja dar. Utilizou-se nesta simulação o passo de $w = 0.8\% = 0.008$;
- Razão de Hastings na forma:

$$RH = e^{-\frac{[T_{exp} - T_{exata}(\theta^*)]^2}{2\sigma_T^2} + \frac{[T_{exp} - T_{exata}(\theta)]^2}{2\sigma_T^2}},$$

uma vez que considerou-se que $q(\theta^*/\theta) = q(\theta/\theta^*)$;

- Condicional Completa para T_0 :

$$T_0 \sim N \left(\frac{\sum_i^2 T_{exp}^i \operatorname{erf} \left[\frac{1}{\sqrt{4\alpha t}} \right]}{\sum_i^2 \operatorname{erf} \left[\frac{1}{\sqrt{4\alpha t}} \right]^2}, \frac{\sigma_T^2}{\sum_i^2 \operatorname{erf} \left[\frac{1}{\sqrt{4\alpha t}} \right]^2} \right);$$

- Estados iniciais para os parâmetros: $T_0 = 55 \text{ °C}$ e $\alpha = 1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

	CASO 1 (T_0, α)–MH	CASO 2 T_0 –MH α –MH	CASO 3 T_0 –GIBBS α –MH
Estados totais	50000	50000	50000
Aquecimento	10000	5000	5000
Estados aceitos	4156	40663 4261	50000 4226
Aceitação (em %)	8.312	81326 8.522	100 8.452
Tempo de CPU ¹	178 s	316 s	188 s

¹ Pentium D - CPU 2.8 GHz e 2.79GHz, 1 Gb de RAM

Tabela 4.1: Dados da simulação MCMC para os parâmetros “ T_0 ” e “ α ”

A tabela 4.1 mostra os dados resumidos da etapa de simulação da estimativa dos parâmetros: temperatura inicial T_0 e da difusividade térmica do material α para as três combinações dos algoritmos. Pode-se observar o aumento no tempo computacional na estimativa dos parâmetros dada pelo algoritmo do CASO 2. Isso se deve ao fato de neste caso um único parâmetro ser perturbado aleatoriamente por iteração, ficando o outro parâmetro igual ao da iteração anterior. O tempo computacional do algoritmo do CASO 3, por sua vez, permanece praticamente igual ao do CASO 1, apesar do processo de aceitação ou rejeição se dar para a perturbação apenas do parâmetro α , fixando-se o outro parâmetro igual ao da iteração anterior. Este algoritmo não testa um dos parâmetros o que faz com que o tempo computacional deste caso praticamente se iguale ao do CASO 1.

Comparando as taxas de aceitação dos parâmetros nos CASOS 1 e 2 observa-se uma alta aceitação para o parâmetro T_0 em torno dos 80%, quando este é perturbado separadamente do parâmetro α , indicando ser α o parâmetro mais crítico no processo de aceitação-rejeição.

A tabela 4.2 mostra os dados resumidos dos procedimentos de estimativa da temperatura inicial T_0 e da difusividade térmica do material α para as três combinações dos algoritmos. Pode-se observar que nas três abordagens as médias das amostras das posteriores dos parâmetros encontram-se bem próximas dos valores exatos dos parâmetros usados na etapa de geração dos dados, $T_0 = 50^\circ\text{C}$ e $\alpha = 4.9 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$. Pode-se observar ainda altas correlações entre as cadeias principalmente na abordagem adotada pelo CASO 3, como já era esperado, uma vez que a perturbação no parâmetro α se dá fixando o parâmetro T_0 gerado na iteração anterior, sem sofrer nenhum teste de aceitação ou rejeição.

Nas figuras 4.5(a)–4.5(f) pode-se observar as respectivas cadeias de Markov, onde pode-se notar que após os estados de aquecimento, estas evoluem e estabilizam-se rapidamente, indicando que a cadeia atingiu a convergência para

		CASO 1 (T_0, α)–MH	CASO 2 T_0 –MH e α –MH	CASO 3 T_0 –GIBBS α –MH
Média	T_0	50.5146	49.9987	50.0935
	α	5.02607×10^{-7}	4.93579×10^{-7}	4.95056×10^{-7}
I.C. 95%	T_0	[50.0582, 51.0544]	[49.4564, 50.5368]	[49.6887, 50.5323]
	α	$[4.87 \times 10^{-7}, 5.19 \times 10^{-7}]$	$[4.76 \times 10^{-7}, 5.11 \times 10^{-7}]$	$[4.80 \times 10^{-7}, 5.11 \times 10^{-7}]$
Mediana	T_0	50.4907	50.005	50.0916
	α	5.01971×10^{-7}	4.93831×10^{-7}	4.9486×10^{-7}
Desvio padrão	T_0	0.249757	0.274711	0.208832
	α	8.26932×10^{-9}	8.78178×10^{-9}	7.65326×10^{-9}
Correlação entre as cadeias		0.913499	0.892366	0.983504

Tabela 4.2: Valores amostrais das distribuições *a posteriori* dos parâmetros “ T_0 ” e “ α ”.

o total de estados adotados no procedimento de estimativa. Comparando os três casos observa-se que para ambos os parâmetros os CASOS 2 e 3 apresentaram menores períodos de aquecimento do que o CASO 1.

Nas figuras 4.6(a)–4.6(c) observa-se a evolução adimensional da cadeia de Markov confirmando a convergência para os valores exatos de ambos os parâmetros. Todavia, observa-se que para o CASO 3 há a degeneração dos pontos em uma reta, confirmando assim a alta correlação entre as cadeias, acima de 0.98, como apresentado na tabela 2. Neste sentido, pode-se ainda observar a menor correlação para o algoritmo do CASO 2, como também visto na tabela 4.2.

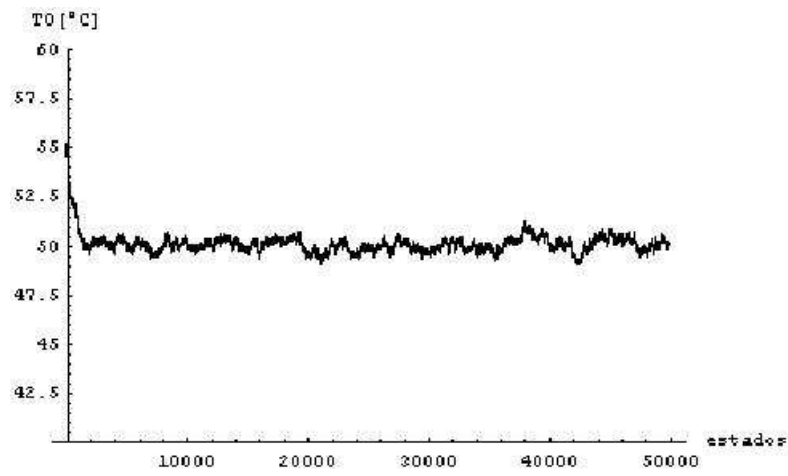
Nas figuras 4.7(a)–4.7(f) pode-se observar o histograma de frequência da posteriori dos parâmetros T_0 e α obtidas pelas três abordagens, de onde pode-se observar a tendência de uma distribuição normal para os parâmetros principalmente para a posteriori obtida pelo algoritmo do CASO 2 para o parâmetro T_0 .

Nas figuras 4.8(a)–4.8(c) apresenta-se o histograma tridimensional de frequência da posteriori dos parâmetros T_0 e α obtidas pelas três abordagens.

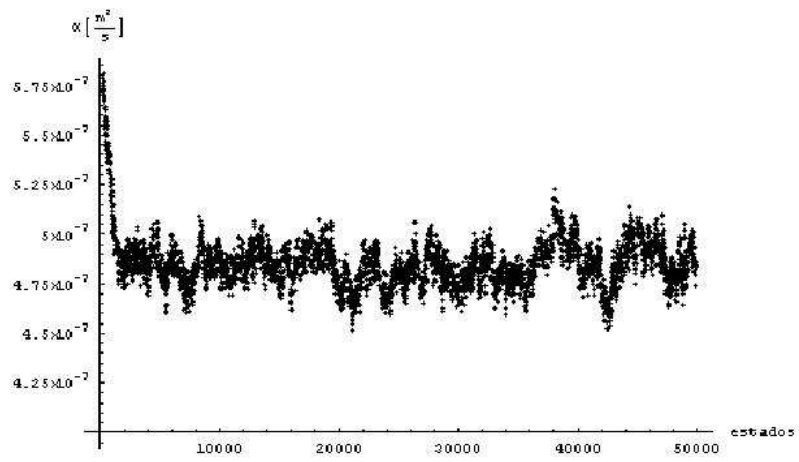
Ainda na etapa de pós-processamento das cadeias de Markov, realizou-se uma análise da função de autocorrelação das cadeias dos parâmetros. Nas figuras 4.9(a)–4.9(f) tem-se as autocorrelações calculadas para cada cadeia de Markov, onde observa-se os valores tendendo para zero com o aumento dos estados. Tal estudo permite verificar quantos passos da cadeia são necessários para se obter amostras não correlacionadas a partir de um estado inicial considerado.

4.10 Conclusões

A presente capítulo tratou da utilização de técnicas de inferência Bayesiana na solução de problemas inversos em transferência de calor. Estudou-se a estimativa de parâmetros em um problema de condução de calor unidimensional transiente numa placa semi-infinita. A condição inicial imposta no meio e a difusividade térmica do material foram estimadas simultaneamente pelo método de Monte Carlo via Cadeia de Markov. Três diferentes abordagens na construção do algoritmo foram consideradas e implementadas na plataforma Mathematica e, em seguida, criticamente analisadas. Na falta de dados experimentais reais gerou-se dados simulados a partir de uma distribuição normal, cuja média é dada pelo valor da solução exata em diferentes tempos selecionados, e a variância, por sua vez, foi assumida constante e conhecida. Na primeira abordagem o par paramétrico (α, T_0) é estimado através do algoritmo de Metropolis-Hastings, perturbando sequencialmente os dois parâmetros a cada iteração. Na segunda abordagem a estimação do par paramétrico (α, T_0) é feita através do algoritmo de Metropolis-Hastings, perturbando aleatoriamente um único parâmetro por iteração. Na terceira abordagem a estimação do par paramétrico (α, T_0) é feita através do algoritmo híbrido amostrador de Gibbs e Metropolis-Hastings. O parâmetro α é gerado aleatoria-

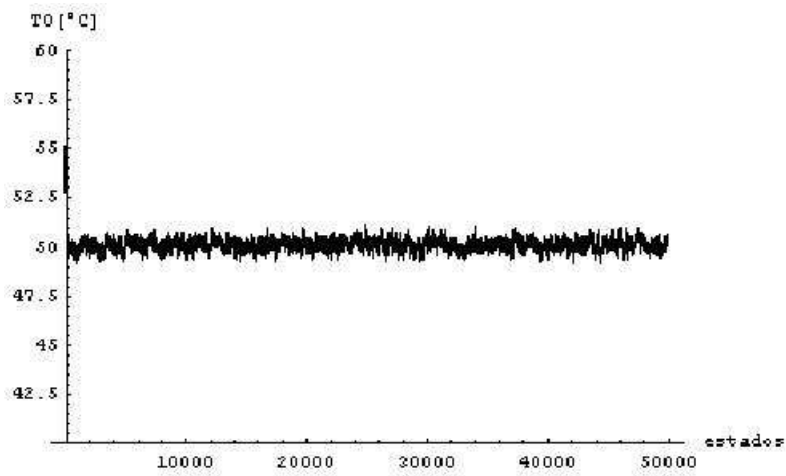
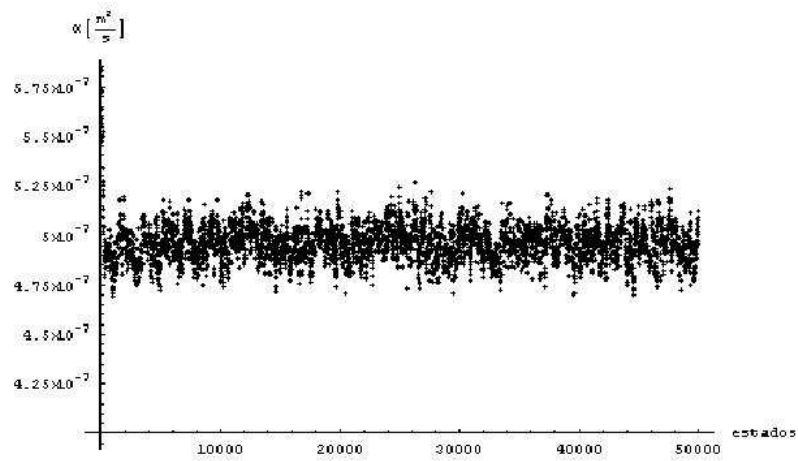


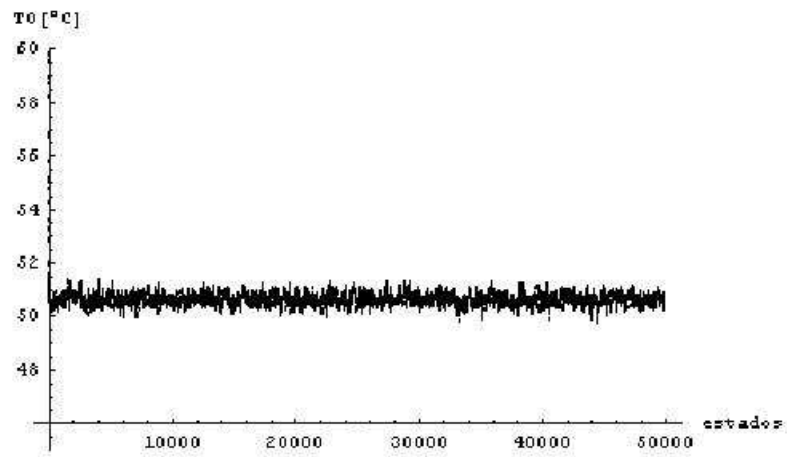
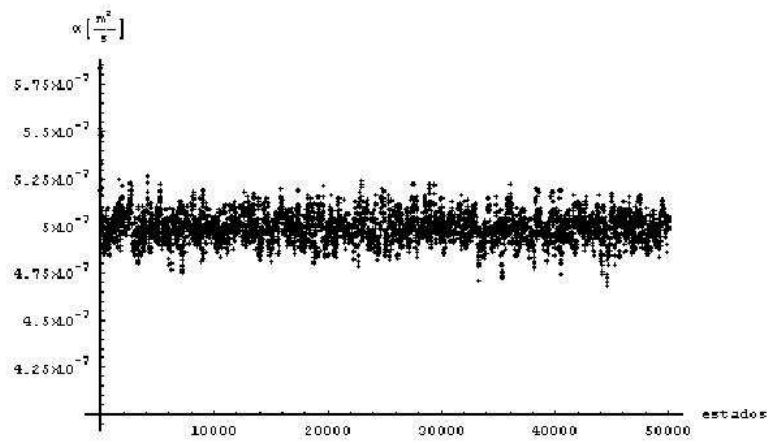
(a) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro T_0

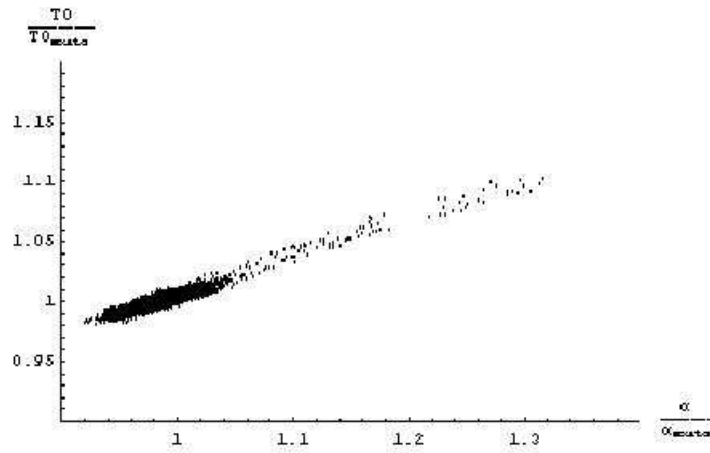
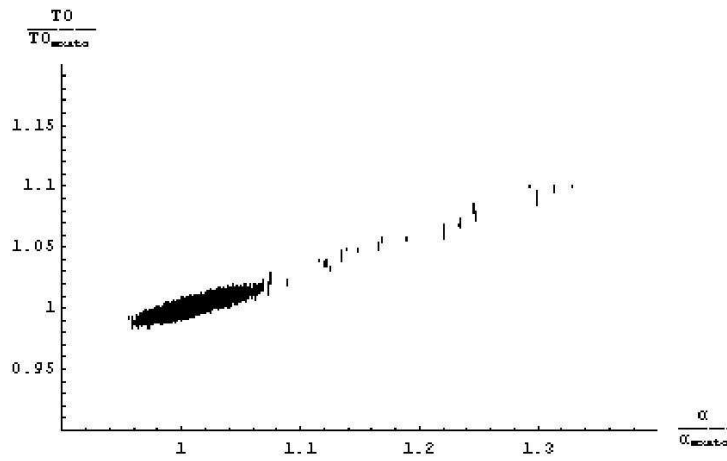


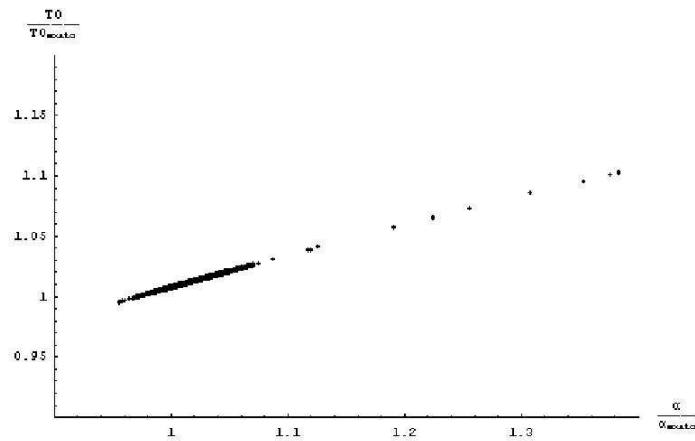
(b) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro α

Figura 4.5: CASO 1 - (T_0, α) -MH

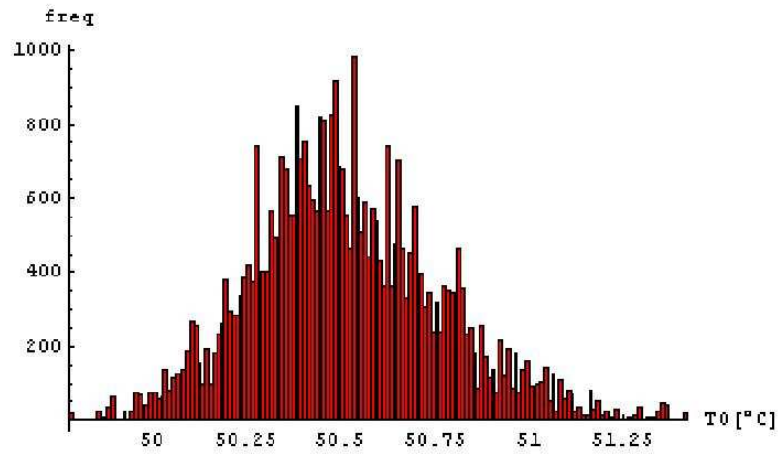
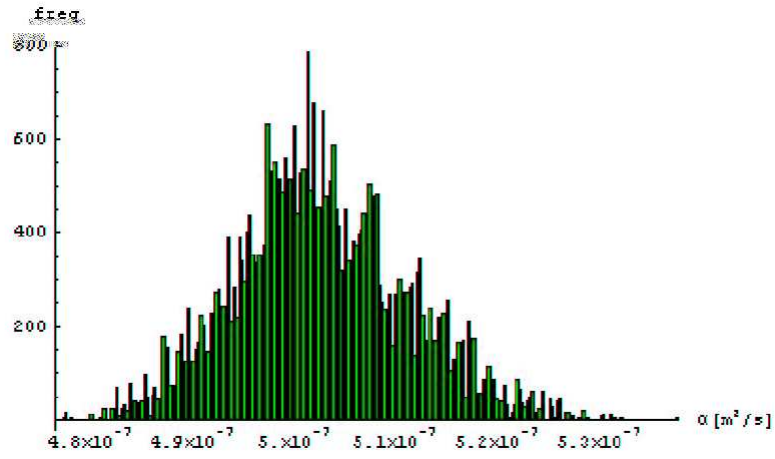
(c) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro T_0 (d) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro α Figura 4.5: CASO 2 - T_0 -MH e α -MH

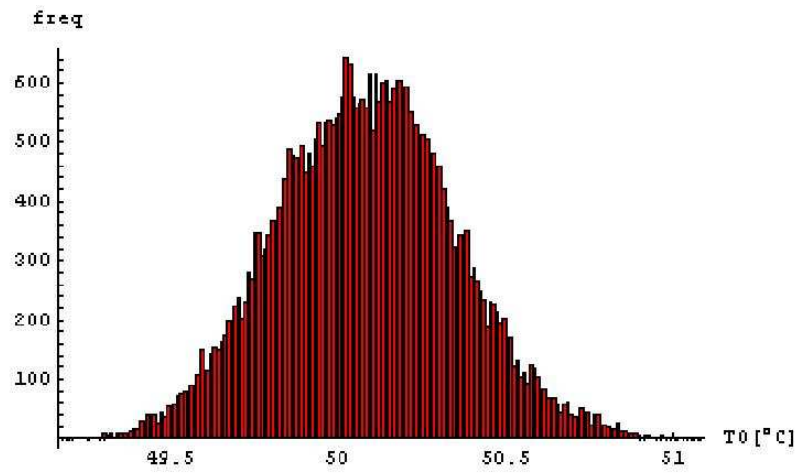
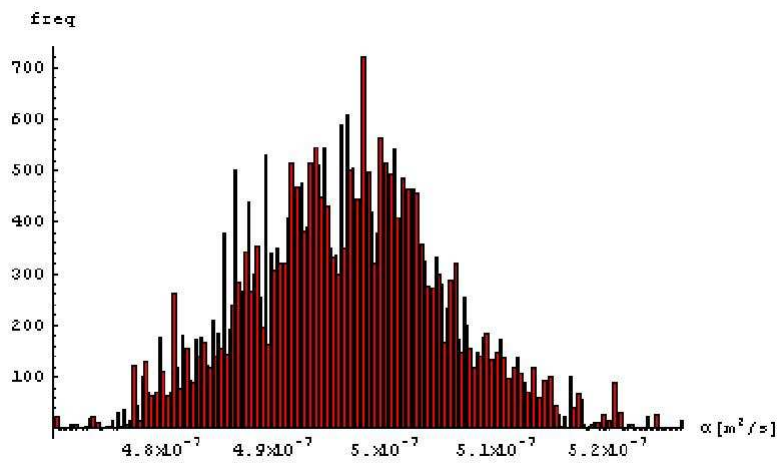
(e) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro T_0 (f) Estados da Cadeia de Markov para o parâmetro α Figura 4.5: CASO 3 - T_0 -GIBBS e α -MH

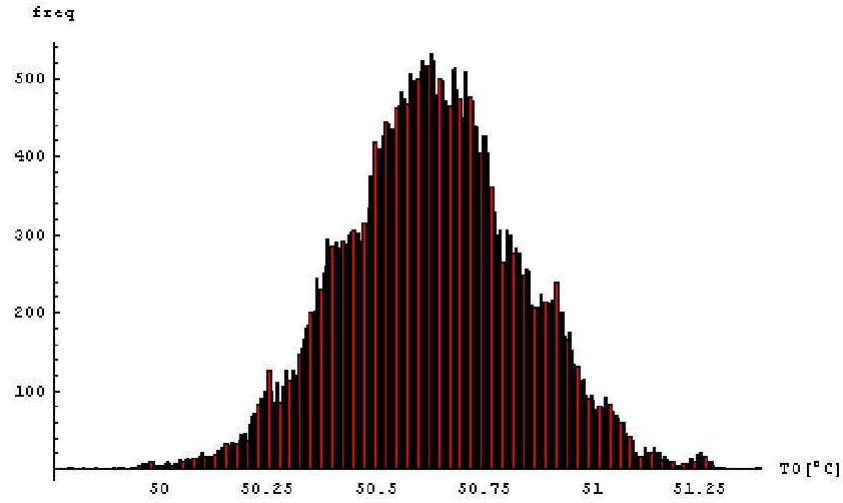
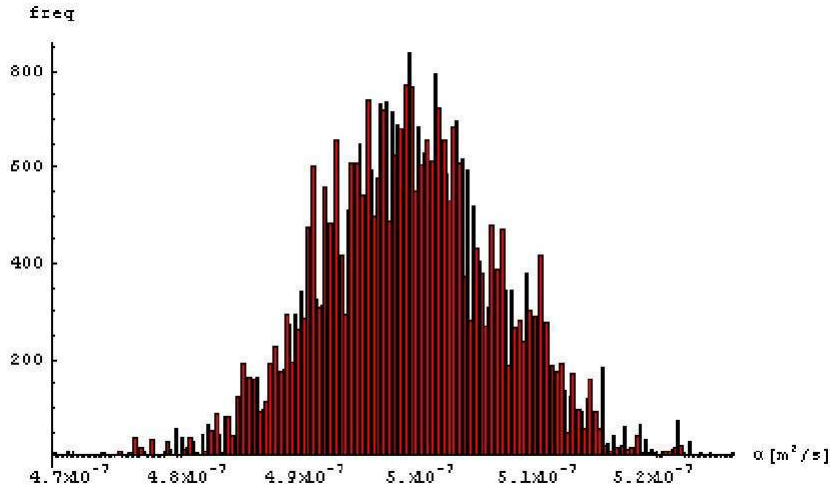
(a) CASO 1 - (T_0, α) -MH(b) CASO 2 - T_0 -MH e α -MHFigura 4.6: Evolução adimensional da Cadeia de Markov para o par (α, T_0)

(c) CASO 3 - T_0 -GIBBS e α -MHFigura 4.6: Evolução adimensional da Cadeia de Markov para o par (α, T_0)

mente por Metropolis-Hastings enquanto o parâmetro T_0 é gerado a partir da sua condicional completa (Gibbs). Apesar da terceira abordagem ter demonstrado uma alta correlação entre as cadeias, o que em geral é um processo indesejável na estimação de parâmetros, as três abordagens mostraram-se robustas e bastante estáveis uma vez que as estimativas aqui apresentadas mostraram-se altamente concordantes com os valores exatos utilizados na geração dos dados simulados.

(a) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro T_0 (b) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro α Figura 4.7: CASO 1 - (T_0, α) -MH

(c) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro T_0 (d) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro α Figura 4.7: CASO 2 - T_0 -MH e α -MH

(e) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro T_0 (f) Histograma de frequência 2D da posteriori para o parâmetro α Figura 4.7: CASO 3 - T_0 -GIBBS e α -MH

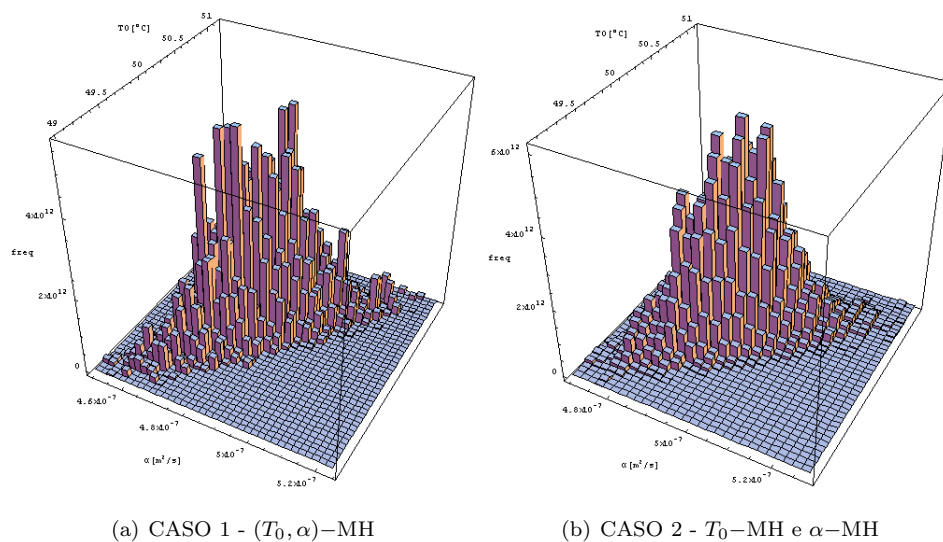


Figura 4.8: Histograma da frequência do par (α, T_0)

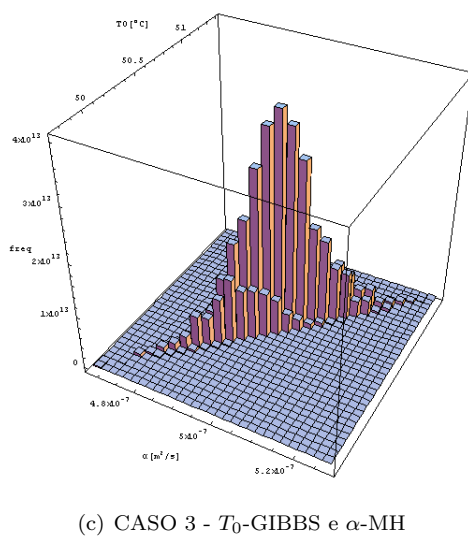
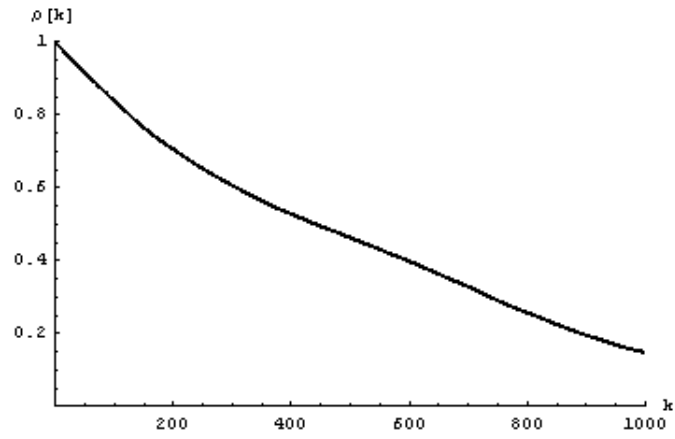
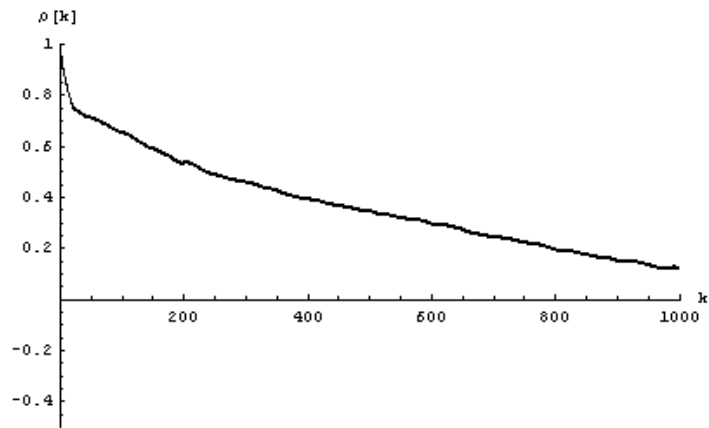
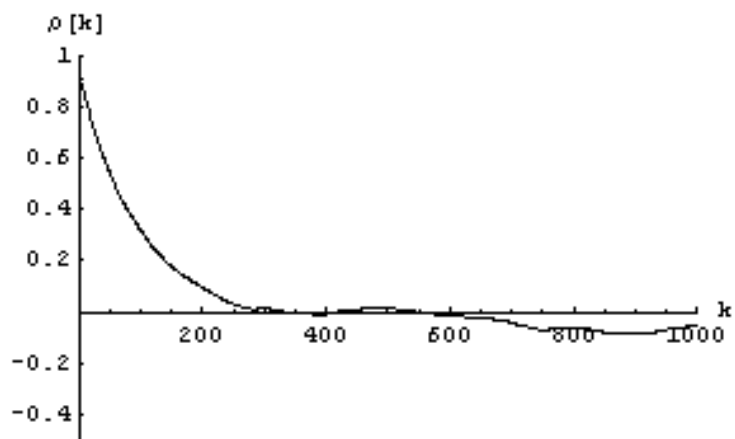
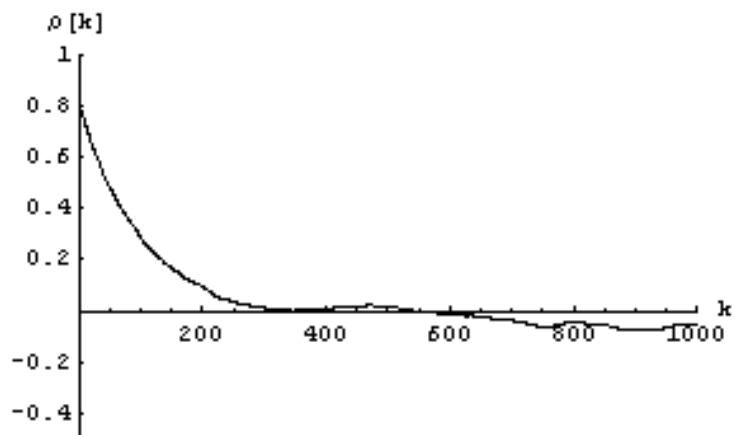


Figura 4.8: Histograma da frequência do par (α, T_0)

(a) Autocorrelação da cadeia do parâmetro T_0 (b) Autocorrelação da cadeia do parâmetro α Figura 4.9: CASO 1 - (T_0, α) -MH

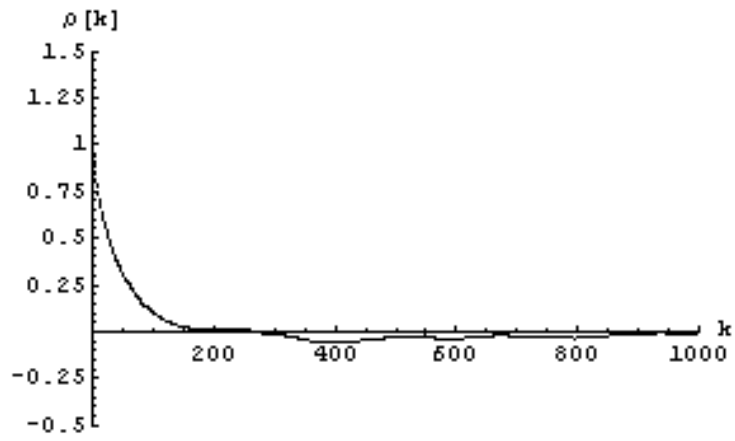
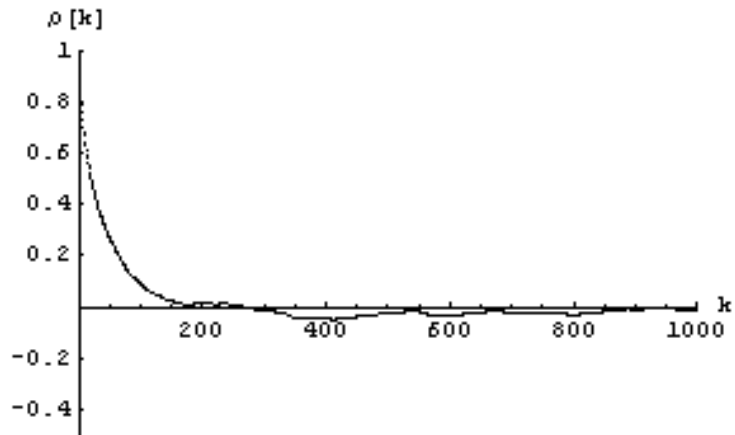


(c) Autocorrelação da cadeia do parâmetro T_0



(d) Autocorrelação da cadeia do parâmetro α

Figura 4.9: CASO 2 - T_0 -MH e α -MH

(e) Autocorrelação da cadeia do parâmetro T_0 (f) Autocorrelação da cadeia do parâmetro α Figura 4.9: CASO 3 - T_0 -GIBBS e α -MH

Capítulo 5

Aplicação do Método de Identificação de Propriedades Termofísicas no Domínio da Frequência

A técnica desenvolvida nesse trabalho baseia-se na hipótese das propriedades térmicas, α e κ não variarem com a temperatura. Assim, o calor imposto na amostra deve ser grande o suficiente para o estabelecimento de gradientes térmicos que permitam a identificação das propriedades e ao mesmo tempo garantam a representatividade de uma temperatura média, com um $\Delta T_{max} < 10K$. Os valores das propriedades térmicas são assim determinados para uma temperatura média. A robustez da técnica é demonstrada através de sua aplicação em duas amostras: aço 304 e PVC.

5.1 Determinação de α e κ para o Aço Inox AISI 304

Para o Aço Inox AISI 304 foram realizados 20 experimentos. Na tabela 5.1 é mostrado um resumo dos parâmetros experimentais envolvidos.

As figuras 5.1 e 5.2 apresentam respectivamente o fluxo de calor e as temperaturas, para um experimento típico.

Assim, como existem posições ótimas que maximizam os coeficientes de sen-

Material	Aço Inox AISI 304		
Dimensões da Amostra (mm)	x	138.8	
	y	10.0	
	z	64.5	
Intervalo de aquisição (em seg)	0.662		
Duração média do aquecimento (em seg)	30		
Duração do experimento (em seg)	6.78		
Número de pontos	1024		
Posição dos Termopares (mm)	x	y	z
	50.9	10.0	2.3
	52.1	10.0	61.2
Temperatura Média ($^{\circ}\text{C}$)	25.0		
Dimensões da Resistência ($\text{mm} \times \text{mm}$)	50×50		
ΔT_{max} (K)	2.7		

Tabela 5.1: Parâmetros experimentais para aço inox 304.

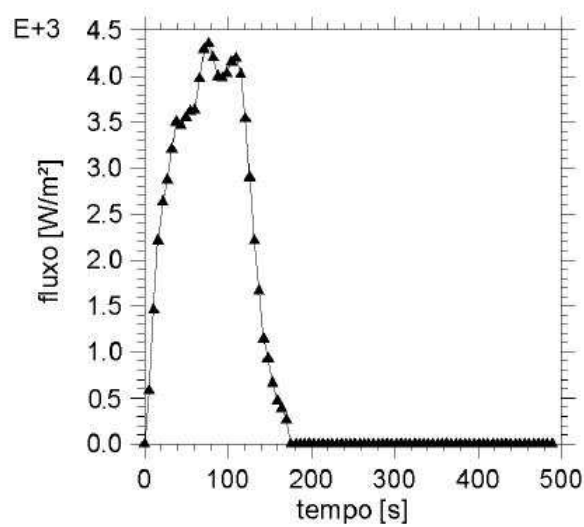


Figura 5.1: Valores típicos fluxo de calor.

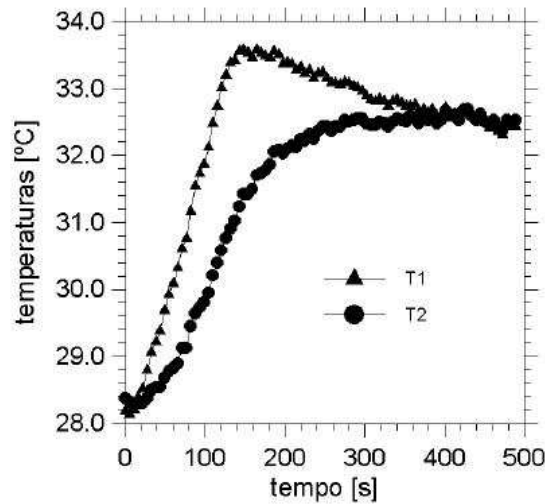


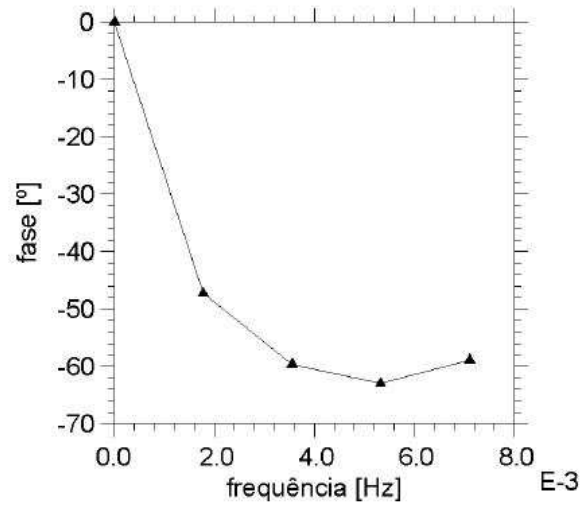
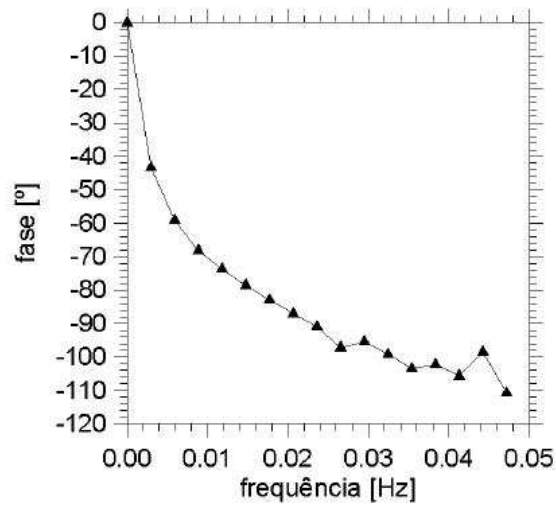
Figura 5.2: Valores típicos de temperatura.

sibilidade, existem também regiões de frequência onde a função resposta $H(f)$, é melhor identificada. Neste caso, torna-se necessária uma análise mais detalhada nas regiões de frequência, a fim de se determinar a melhor faixa para a determinação de região de frequência de interesse é determinada através da banda de análise da fase.

Uma fase típica de um experimento é mostrada nas figuras 5.3 e 5.4.

Aplicando-se o princípio de Chauvenet, obtém-se estatisticamente os valores médios de $3.770 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ e 14.655 W/mK , para difusividade térmica, respectivamente. A tabela 5.3 apresenta uma comparação entre os valores determinados neste trabalho com os valores padrão obtidos na literatura.

Observa-se que os valores encontrados na literatura e apresentados na tabela 5.3 são apenas valores de referência uma vez que não pertencem à mesma amostra nem foram obtidos sob as mesmas condições de temperatura, entretanto, são uma boa indicação. Nota-se ainda que os valores indicados com (2 e 3) para a difusividade térmica não representam valores medidos, mas calculados a partir das propriedades térmicas κ , ρ e c_p . As figuras 5.5 e 5.6 apresentam, respectivamente, as temperaturas experimentais e calculadas com os valores estimados das propriedades e o resíduo entre estas temperaturas. Observa-se que a incerteza atinge valor máximo de 0.5°C muito próximo à faixa de incerteza de medição que para este experimento situa-se na faixa de $\pm 0.3^\circ\text{C}$.

Figura 5.3: Fase da função resposta em frequência $H(f)$.Figura 5.4: Fase da função resposta em frequência $H(f)$.

Número de Experimentos	$\alpha(m^2/s) \times 10^6$	$\kappa (W/mK)$
01	3.811	14.877
02	3.775	14.902
03	3.929	14.890
04	3.803	14.205
05	3.838	15.146
06	3.800	13.743
07	3.710	14.160
08	3.766	14.196
09	3.802	14.936
10	3.822	14.981
11	3.655	14.642
12	3.675	14.192
13	3.849	15.066
14	3.773	14.410
15	3.824	14.606
16	3.713	15.122
17	3.674	14.359
18	3.736	14.886
19	3.721	14.617
20	3.721	15.170

Tabela 5.2: Valores determinados de α e κ para cada experimento.

	$\alpha(m^2/s) \times 10^7$	$\kappa(W/mK)$
Presente Trabalho à 25°C	3.770 ± 0.045	14.655 ± 0.266
Borges (2004) à 25°C	3.762	14.642
Incropera (2003) à 27°C	3.95	14.9
Goodfellow (2007) à 23°C		16.3
Efunda ¹ (2007) 100°C	4.05	16.2
Edge ² (2007)	3.522	14.0

¹ Valor calculado $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$, sendo $\rho = 8.000 \text{ Kg/m}^3$ (25°C) e $c_p = 500 \text{ J/KgK}$ (0°C – 100°C).

² Valor calculado $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$, sendo $\rho = 7916.45 \text{ Kg/m}^3$ e $c_p = 502 \text{ J/KgK}$.

Tabela 5.3: Valores determinados de α e κ , com nível de confiança de 99.7%.

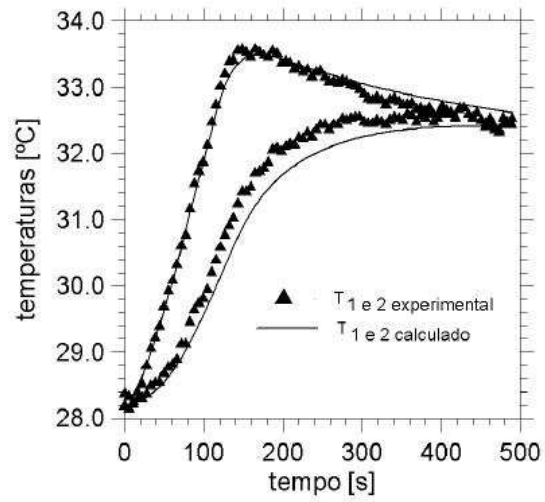


Figura 5.5: Temperaturas experimentais versus temperaturas calculadas com os valores das propriedades térmicas determinadas por este trabalho.

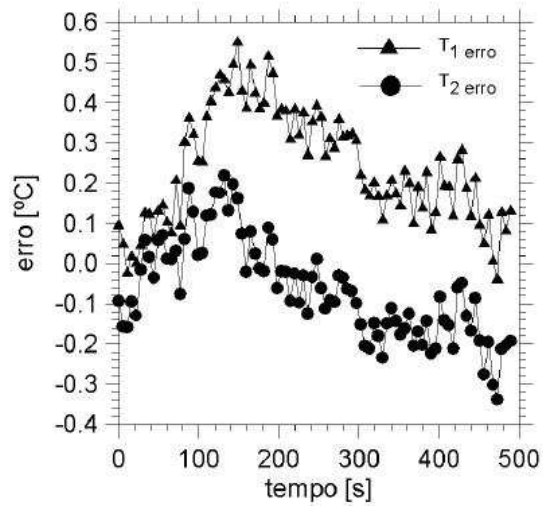


Figura 5.6: Erro absoluto das temperaturas experimentais e temperaturas calculadas.

5.2 Determinação de α e κ para o PVC

Foram realizados 50 experimentos para uma amostra de PVC. Na tabela 5.4 é mostrado um resumo dos parâmetros experimentais envolvidos.

Material		PVC		
Dimensões da Amostra (mm)	x	100.0		
	y	25.0		
	z	70.0		
Intervalo de aquisição (em seg)		7.03		
Duração média do aquecimento (em seg)		120		
Duração do experimento (em seg)		7199		
Número de pontos		1024		
Posição dos Termopares (mm)	x	y	z	
	52.0	25.0	5.0	
	25.0	0.0	25.0	
Temperatura Média ($^{\circ}\text{C}$)		30.0		
Dimensões da Resistência ($mm \times mm$)		50 \times 50		
ΔT_{max} (K)		8.5		

Tabela 5.4: Parâmetros experimentais para o PVC.

Similarmente aos resultados para a amostra de aço inox 304, apresentam-se respectivamente o fluxo de calor e as temperaturas, para um experimento típico, com o PVC, nas figuras 5.7 e 5.8.

Uma fase típica de um experimento é mostrada na figura 5.9.

Da mesma forma, os dados de temperatura e fluxo são então processados no domínio tempo para a determinação da condutividade térmica, como descrito no Cap. III. Todos os valores determinados de α e κ são apresentados na tabela 5.5.

Analogamente, aplicando-se o princípio de Chauvenet, obtêm-se estatisticamente os valores médios de $1.157 \times 10^{-7} \times m^2/s$ e $0,159 \times W/m \times K$, para a difusividade e condutividade térmica, respectivamente. A tabela 5.6 apresenta uma comparação entre os valores determinados neste trabalho com os valores padrões obtidos na literatura.

Diferente aço inox a condutividade térmica da mesma amostra foi também obtida pela técnica da placa quente compensada. A identificação foi realizada em testes padrões e os valores fornecidos pelo IPT. Observa-se, neste caso um desvio

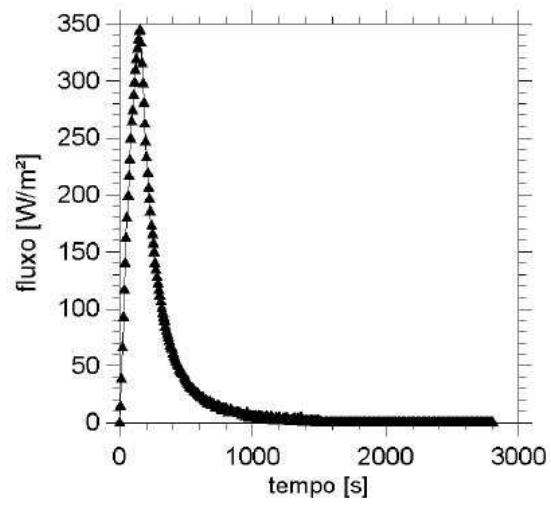


Figura 5.7: Valores típicos fluxo de calor.

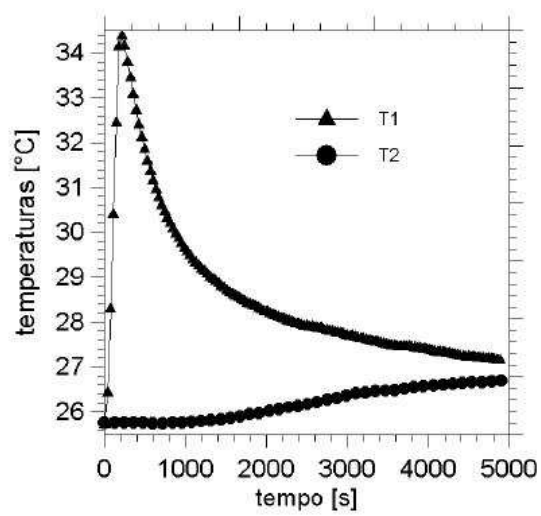


Figura 5.8: Valores típicos de temperaturas.

Número de Experimentos	$\alpha(m^2/s) \times 10^7$	$\kappa (W/mK)$
01	1.157	0.154
02	1.174	0.157
03	1.155	0.165
04	1.147	0.155
05	1.177	0.161
06	1.148	0.161
07	1.199	0.161
08	1.169	0.162
09	1.165	0.154
10	1.157	0.160
11	1.150	0.162
12	1.206	0.154
13	1.172	0.160
14	1.587	0.159
15	1.588	0.164
16	1.171	0.163
17	1.136	0.169
18	1.204	0.189
19	1.177	0.161
20	1.165	0.155
21	1.172	0.085
22	1.157	0.165
23	1.186	0.164
24	1.149	0.164
25	1.139	0.156
26	1.201	0.156
27	1.138	0.160
28	1.147	0.161
29	1.118	0.160
30	1.140	0.150

Tabela 5.5: Valores determinados de α e κ para cada experimento.

Número de Experimentos	$\alpha(m^2/s) \times 10^7$	$\kappa (W/mK)$
31	1.150	0.157
32	1.166	0.161
33	1.147	0.155
34	1.123	0.158
35	1.172	0.158
36	1.156	0.154
37	1.161	0.160
38	1.138	0.154
39	1.157	0.160
40	1.154	0.165
41	1.155	0.158
42	1.279	0.159
43	1.602	0.171
44	1.142	0.165
45	1.131	0.160
46	1.149	0.157
47	1.149	0.155
48	1.099	0.158
49	1.136	0.150
50	1.120	0.156

Tabela 5.5: Valores determinados de α e κ para cada experimento. (continuação da tabela da página anterior)

	$\alpha(m^2/s) \times 10^7$	$\kappa(W/mK)$
Presente Trabalho à 30°C	1.157 ± 0.00919	0.159 ± 0.00178
Goodfellow [†] (2007)	1.143	0.12 – 0.25
IPT (2004)		0.160
Efunda (2007)		0.146 – 0.2
Hattori à 20°C	1.2	

[†] Valor calculado $\alpha = \frac{\kappa}{\rho c_p}$, sendo $\rho = 14.000 \text{ Kg/m}^3$ (50°C – 75°C) e $c_p = 1000 \text{ J/KgK}$ (50°C – 75°C).

Tabela 5.6: Valores determinados de α e κ , com nível de confiança de 99.7%.

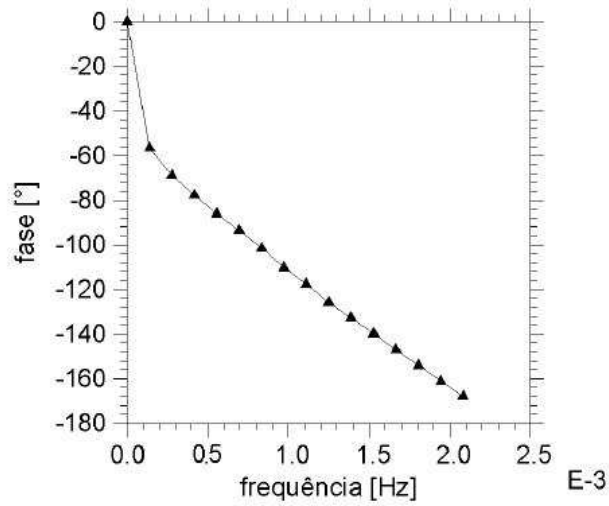


Figura 5.9: Fase da função resposta em frequência $H(f)$.

de 0.63% entre os valores medidos pelas duas técnicas. Os valores de referência para a difusividade térmica indicam por sua vez que o valor encontrado está dentro do esperado. As figuras 10 e 11 apresentam, respectivamente, os perfis e o resíduo entre as temperaturas experimentais e calculadas a partir das propriedades estimadas. Observa-se que a incerteza atinge valor máximo de $0,1^{\circ}C$ inferior à faixa de incerteza de medição que para este experimento situa-se na faixa de $\pm 0,3^{\circ}C$. Diferente aço inox a condutividade térmica da mesma amostra foi também obtida pela técnica da placa quente compensada. A identificação foi realizada em testes padrões e os valores fornecidos pelo IPT. Observa-se, neste caso um desvio de 0.63% entre os valores medidos pelas duas técnicas. Os valores de referência para a difusividade térmica indicam por sua vez que o valor encontrado está dentro do esperado. As figuras 5.10 e 5.11 apresentam, respectivamente, os perfis e o resíduo entre as temperaturas experimentais e calculadas a partir das propriedades estimadas. Observa-se que a incerteza atinge valor máximo de $0,1^{\circ}C$ inferior à faixa de incerteza de medição que para este experimento situa-se na faixa de $\pm 0,3^{\circ}C$.

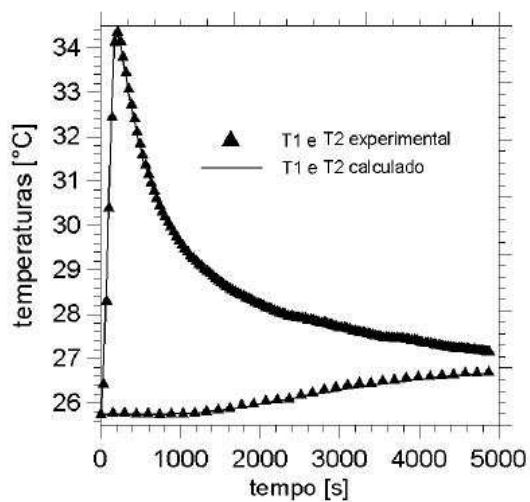


Figura 5.10: Temperaturas experimentais versus temperaturas calculadas com os valores das propriedades térmicas determinadas por este trabalho.

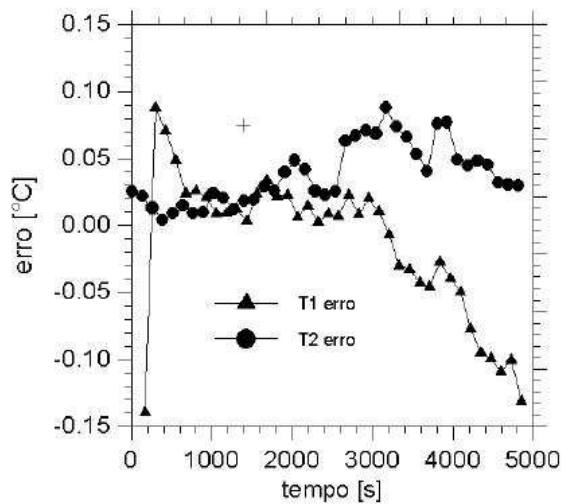


Figura 5.11: Erro absoluto das temperaturas experimentais e temperaturas calculadas.

Bibliografia

- [1] J. Hadamard, “Lectures on Cauchy’s Problem in Linear Differential Equations”, Yale University, New Haven, 1923.
- [2] H. R. B. Orlande, O. Fudym, D. Maillet e R. Cotta, “Thermal Measurements and Inverse Techniques”, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [3] J.V. Beck, B. Blackwell e C.R. St.Clair, “Inverse Heat Conduction: Ill Posed Problems”, Wiley, New York, 1985.
- [4] J.V. Beck e K.N. Arnold, “Parameter Estimation in Engineering and Science”, Wiley, New York, 1977.
- [5] A.N. Tikhonov e V.Y. Arsenin, “Solutions of Ill-Posed Problems”, Wiston & Sons, Washington D.C., 1977.
- [6] O. M. Alifanov, “Inverse Heat Transfer Problems”, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [7] M.N. Ozisik e H. R. B. Orlande, “Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications”, Taylor & Francis, New York, 2000.
- [8] Levenberg, K., “A Method for the Solution of Certain Non-linear Problems in Least Squares”, Quart. Appl. Math., 2, 164-168, 1944.
- [9] Marquardt, D. W., “An Algorithm for Least Squares Estimation of Nonlinear Parameters”, J. Soc. Ind. Appl. Math, 11,431-441, 1963.
- [10] H. R. B. Orlande, “Inverse Problems in Heat Transfer”, SME J. Heat Transfer, 2011.
- [11] H.R.B. Orlande, M.N. Özisik e D. Y. Tzou, “Inverse Analysis for Estimating the Electron-Phonon Coupling Factor in Thin Metal Films”, J. Applied Physics, Vol. 78, No. 3, pp.1843-1849, 1995.

- [12] M. M. Mejias, H. R. B. Orlande e M. N. Özisik, "Design of Optimum Experiments for the Estimation of the Thermal Conductivity Components of Orthotropic Solids", *Hybrid Methods in Engineering*, Vol. 1, pp. 37-53, 1999.
- [13] IMSL Library, Edition 10, NBC Bldg., 7500 Ballaire Blvd., Houston, Texas, 1987.
- [14] M.M. Mejias, H. R. B. Orlande e M. N. Ozisik, "A Comparison of Different Parameter Estimation Techniques for the Identification of Thermal Conductivity Components of Orthotropic Solids", Paper HT14, 3rd Int. Conference on Inverse Problems in Engineering, Port Ludlow, WA, 1999.
- [15] Daniel, J. W., "The Approximate Minimization of Functionals", Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, 1971.
- [16] Jarny, Y., Özisik, M. N. e Bardon J. P., "A General Optimization Method Using Adjoint Equation for Solving Multidimensional Inverse Heat Conduction", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 34, 2911-2919, 1991.
- [17] H.R.B. Orlande e M.N. Özisik, "Inverse Problem of Estimating Interface Conductance Between Periodically Contacting Surfaces". *AIAA J. Thermophysics*, Vol. 7, No. 2, pp. 319-325, April-June, 1993.
- [18] M.N. Özisik, H.R.B. Orlande, L.G. Hector, Jr. e P.N. Anyalebechi, "Inverse Problem of Estimating Interface Conductance During Solidification Via Conjugate Gradient Method ", *J. Materials Processing & Manufacturing Science*, Vol.1, No. 2, pp. 213-225, October, 1992.
- [19] H.R.B. Orlande e M.N. Özisik, " Determination of the Reaction Function in a Reaction-Diffusion Parabolic Problem", *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 116, pp. 1041-1044, 1994.
- [20] R. N. de Carvalho, H. R. B. Orlande e M. N. Ozisik, "Estimation of the Boundary Heat Flux in Grinding via the Conjugate Gradient Method, *Heat Transfer Engineering*", v. 21, pp. 71-82, 2000.
- [21] L. B. Dantas e H. R. B. Orlande, "A Function Estimation Approach for Determining Temperature-Dependent Thermophysical Properties, *Inverse Problems in Engineering*", Vol. 3, pp.261-279, 1996.
- [22] M. J. Colaço e H. R. B. Orlande, "A Comparison of Different Versions of the Conjugate Gradient Method of Function Estimation, *Numerical Heat Transfer*", Part A: Applications, v. 36, pp. 229-249, 1999.

- [23] H. A. Machado e H. R. B. Orlande, "Inverse Analysis of Estimating the Timewise and Spacewise Variation of the Wall Heat Flux in a Parallel Plate Channel", *Int. J. of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Vol. 7, pp.696-710, 1997.
- [24] M. J. Colaço e H. R. B. Orlande, "Inverse Forced Convection Problem of Simultaneous Estimation of Two Boundary Heat Fluxes in Irregularly Shaped Channels", *Numerical Heat Transfer - Part A*, v. 39, pp. 201-215, 2001.
- [25] M. J. Colaço e H. R. B. Orlande, "Inverse Natural Convection Problem of Simultaneous Estimation in Irregular Cavities", *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 47, pp. 1201-1215, 2004.
- [26] J. P. Alencar Jr., H. R. B. Orlande e M. N. Ozisik, "A Generalized Coordinates Approach for the Solution of Inverse Heat Conduction Problems", 11th International Heat Transfer Conference, Vol. 7, pp. 53-58, Kyongju, Korea, 1998.
- [27] Kaipio, J. e Somersalo, E., "Statistical and Computational Inverse Problems", *Applied Mathematical Sciences* 160, Springer-Verlag, 2004.
- [28] S. Tan, C. Fox e G. Nicholls, "Inverse Problems", *Course Notes for Physics 707*, University of Auckland, Auckland, NZ, 2006.
- [29] Wang, J. e Zabararas, N., "A Bayesian Inference Approach to the Stochastic Inverse Heat Conduction Problem", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 47, pp. 3927-3941, 2004.
- [30] Wang, J. e Zabararas, N., "A Computational Statistics Approach to Stochastic Inverse Problems and Uncertainty Quantification in Heat Transfer", *Proceedings of the VI World Conference on Computational Mechanics*, September 5-10, Beijing, China, 2004.
- [31] Mota, C. A. A., Orlande, H. R. B., Wellele, O., Kolehmainen, V. e Kaipio, J., "Inverse Problem of Simultaneous Identification of Thermophysical Properties and Boundary Heat Flux", *High Temperatures - High Pressures*, 38, pp. 171-185, 2009.
- [32] Orlande, H. R. B., Kolehmainen, V. e Kaipio, J. P., "Reconstruction of Thermal Parameters Using a Tomographic Approach", *Int. J. Heat Mass Transfer*, 50, pp. 5150-5160, 2007.
- [33] Emery, A. F., "Estimating Deterministic Parameters by Bayesian Inference with Emphasis on Estimating the Uncertainty of the Parameters", *Proceedings of the Inverse Problem, Design and Optimization Symposium*, Vol. I, pp. 266-272, Miami Beach, Florida, 2007.

- [34] Mota, C., Orlande, H., De Carvalho, M., Kolehmainen, V., Kaipio, J., “Bayesian Estimation of Temperature-Dependent Thermophysical Properties and Transient Boundary Heat Flux”, *Heat Transfer Engineering*, 31, pp. 570-580, 2010.
- [35] Naveira-Cotta, C., Orlande, H. e Cotta, R., “Integral Transforms And Bayesian Inference In The Identification Of Variable Thermal Conductivity In Two-Phase Dispersed Systems”, *Numerical Heat Transfer*, 2011.
- [36] Naveira-Cotta, C., Cotta, R. e Orlande, H., “Inverse analysis of forced convection in micro-channels with slip flow via integral transforms and Bayesian inference”, *Int. J. Thermal Sciences*, 2011.
- [37] Naveira-Cotta, C., Orlande, H., Cotta, R. e Nunes, J., “Integral Transforms, Bayesian Inference and Infrared Thermography in the Simultaneous Identification of Variable Thermal Conductivity and Diffusivity in Heterogeneous Media”, *Proceedings of the International Heat Transfer Conference IHTC14*, August 8-13, Washington, DC, USA, paper IHTC14-22511, 2010.
- [38] Fudym, O., Orlande, H. R. B., Bamford, M. e Batsale, J. C., “Bayesian approach for thermal diffusivity mapping from infrared images with spatially random heat pulse heating”, *Journal of Physics. Conference Series (Online)*, v. 135, pp. 12-42, 2008.
- [39] Massard, H., Fudym, O., Orlande, H. R. B. e Batsale, J. C., “Nodal predictive error model and Bayesian approach for thermal diffusivity and heat source mapping”, *Comptes Rendus Mécanique*, v. 338, pp. 434-449, 2010.
- [40] Orlande, H., Colaço, M. e Dulikravich, G., “Approximation of the likelihood function in the Bayesian technique for the solution of inverse problems”, *Inverse Problems in Science and Engineering*, v. 16, pp. 677-692, 2008.
- [41] Parthasarathy, S. e Balaji, C., “Estimation of parameters in multi-mode heat transfer problems using Bayesian inference - Effect of noise and a priori”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 51, pp. 2313-2334, 2008.
- [42] Kaipio, J. e Fox, C., “The Bayesian Framework for Inverse Problems in Heat Transfer”, *Heat Transfer Eng.*, 2011.
- [43] Borges, V.L., Lima e Silva, S.M.M., Guimarães, G., “A Dynamic Thermal Identification Method Applied To Conductor And Non Conductor Materials”, *Inverse Problem in Science and Engineering*, 14, pp 511-527, 2006.

- [44] Guimarães, G., Philippi, P.C. e Thery, P., “Use of Parameters Estimation Method in the Frequency Domain for the Simultaneous Estimation of Thermal Diffusivity and Conductivity”, *Review of Scientific Instruments*, 66, 2582, 1995.
- [45] J. S. Bendat, A. G. Piersol, “Analysis and Measurement Procedures”, Wiley-Interscience, 2nd ed., USA, 1986, p. 566.
- [46] S. V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow”, Hemisphere Publishing Corporation, 1980, p. 197.
- [47] Vanderplaats, G.N. , “Numerical Optimization Techniques for Engineering Design”, McGraw-Hill, New York, USA, 1984
- [48] J. F. Thompson, Z. U. A. Warsi and C. W. Mastin., “Numerical Grid Generation”. North- Holland, New York, 1987.
- [49] O. M. Alifanov, “ Solution of an Inverse Problem of Heat-Conduction by Iterative Methods”, *J. Eng. Phys.*, vol. 26, pp. 471-476, 1974.
- [50] O. M. Alifanov, “ Determination of Heat Loads from a Solution of the Non-linear Inverse Problem”, *High Temperature*, vol. 15, pp. 498-504, 1977.
- [51] O. M. Alifanov, “ Inverse Heat Transfer Problems” Springer-Verlag, New York, 1994.
- [52] C. H. Huang e M. N. Özisik, “Inverse Problem of Determining Unknown Wall Heat Flux in Laminar Flow Through a Parallel Plate Duct”, *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 21, pp. 55-70, 1992.
- [53] J. C. Bokar e M. N. Özisik, “ Inverse Analysis for Estimating the Time Varying Inlet Temperature in Laminar Flow Inside a Parallel Plate Duct”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 38, pp. 39-45, 1995.
- [54] F. B. Liu e M. N. Özisik, “Inverse Analysis of Transient Turbulent Forced Convection Inside Parallel Plates”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 39, pp. 2615-2618, 1996.
- [55] F. B. Liu e M. N. Özisik, “Estimation of Inlet Temperature Profile in Laminar Duct Flow”, *Inverse Problems in Engineering*, vol. 3, pp. 131-141, 1996.
- [56] H. A. Machado e H. R. B. Orlande, “Estimation of the Timewise and Spacewise Variation of the Wall Heat Flux to a Non-newtonian Fluid in a Parallel Plate Channel”, In *Proc. of the Int. Symp. on Transient Convective Heat Transfer*, pp. 587-596, Cesme, Turkey, August 1996.

- [57] H. A. Machado e H. R. B. Orlande, "Inverse Analysis for Estimating the Timewise and Spacewise Variation of the Wall Heat Flux in a Parallel Plate Channel", *International Journal for Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, vol. 7, pp. 696-710, 1997.
- [58] H. A. Machado e H. R. B. Orlande, "Inverse Problem for Estimating the Heat Flux to a Non-newtonian Fluid in a Parallel Plate Channel", *J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences*, vol. XX, pp. 51-61, 1998.
- [59] M. J. Colaço e H. R. B. Orlande, "A Function Estimation Approach for the Identification of the Transient Inlet Profile in Parallel Plate Channels", In *Proc. of the International Symposium on Inverse Problems in Engineering Mechanics*, Nagano City, Japan, March 2000 (In press).
- [60] C. H. Huang e W. W. Chen, "A Three-Dimensional Inverse Forced Convection Problem in Estimating Surface Heat Flux by Conjugate Gradient Method", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 43, pp. 3171-3181, 2000.
- [61] G. Z. Yang e N. Zabarar, "An Adjoint Method for the Inverse Design of Solidification Processes with Natural Convection", *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, vol. 42, pp. 1121-1144, 1998.
- [62] N. Zabarar e T. H. Nguyen, "Control the Freezing Interface Morphology in Solidification Processes in the Presence of Natural Convection", *Int. J. Num. Methods Eng.*, vol. 38, pp. 1555-1578, 1995.
- [63] N. Zabarar e G. Z. Yang, "A Functional Optimization Formulation and Implementation of an Inverse Natural Convection Problem", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 144, pp. 245-274, 1997.
- [64] M. Prud'homme e T. Nguyen, "Whole Time Domain Approach to the Inverse Natural Convection Problem", *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 32, pp. 169-186, 1997.
- [65] H. M. Park e O. Y. Chung, "Inverse Natural Convection Problem of Estimating Wall Heat Flux Using a Moving Sensor", *Journal of Heat Transfer*, vol. 121, pp. 528-836, 1999.
- [66] H. M. Park e O. Y. Chung, "An Inverse Natural Convection Problem of Estimating the Strength of a Heat Source", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, vol. 42, pp. 4259-4273, 1999.
- [67] H. M. Park e O. Y. Chung, "On the Solution of an Inverse Natural Convection Problem Using Various Conjugate Gradient Methods", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, vol. 47, pp. 821-842, 2000.

- [68] H. M. Park e O. Y. Chung, “Inverse Natural Convection Problem of Estimating Wall Heat Flux”, *Chemical Engineering Science*, vol. 55, pp. 2131-2141, 2000.
- [69] M. Napolitano e P. Orlandi, “Laminar Flow in a Complex Geometry: A Comparison”, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 5, pp. 667-683, 1985.
- [70] J. S. Perez Guerrero, J. N. N. Quaresma e R. M. Cotta, “Simulation of Laminar Flow Inside Ducts of Irregular Geometry Using Integral Transforms”, *Computational Mechanics* (submitted).
- [71] Mota, C.A.A., “Estimativa simultanea do fluxo de calor e de propriedades termofísicas de materiais em altas temperaturas”, Tese de Doutorado, Programa de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Setembro de 2007.
- [72] Wang, J. e Zabaras, N., “Hierarchical Bayesian models for inverse problems in heat conduction - Inverse Problems”, 21 (2005), pp. 183-206.
- [73] Ehlers, R.S., “Métodos Computacionalmente Intensivos em Estatística”, Departamento de Estatística, Universidade Federal do Paraná, 2004.
- [74] Ehlers, R.S., “Introdução a Inferência Bayesiana”, Departamento de Estatística, Universidade Federal do Paraná (2003).
- [75] Özisik, M.N., “Heat Conduction”, Jonh Wiley & Sons, New York, 1980.
- [76] Wolfram, S., 1999, *The Mathematica Book*, 4th ed., Wolfram Media, Cambridge.

Índice

- algoritmo de Cooley-Tukey, 35
- algoritmo de Metropolis-Hastings, 25
- algoritmo Metropolis-Hastings, 74
- algoritmos de Gibbs, 67
- amostrador de Gibbs, 75, 80
- aproximação polinomial, 36

- cadeia de Markov, 25
- campo de velocidades, 47
- coeficiente de conjugação, 17
- coeficiente de difusão, 44
- coeficientes de conjugação, 55
- coeficientes de sensibilidade, 15
- condição de estabilidade, 68
- condutividade térmica, 17, 27, 28, 39
- constante de normalização, 25

- densidade autoespectral, 35
- densidade marginal de probabilidade, 25
- densidade posterior de probabilidade, 25
- densidades espectral cruzada, 35
- derivada direcional, 23
- derivada funcional do gradiente, 51, 53
- desvio-padrão, 16
- difusividade térmica, 27, 28, 34, 36
- direção da perturbação, 23
- direção do Gradiente, 19
- direção do gradiente, 17
- distribuição a priori dos parâmetros, 72
- distribuição condicional, 75
- distribuição de equilíbrio, 73
- distribuição de temperaturas, 47

- distribuição normal, 16, 26, 70
- distribuição posterior de probabilidade, 24
- distribuição posterior de probabilidade, 25
- distribuições de probabilidade, 24

- equação de conservação, 51
- equação do gradiente, 23
- equações de conservação, 44
- equações do gradiente, 54
- erros experimentais, 18
- estabilidade do algoritmo inverso, 32
- estatística Bayesiana, 24
- estimativa de funções, 27

- Fletcher-Reeves, 17, 55
- fluido Newtoniano, 43
- forma adimensional, 28
- forma funcional, 32
- função de densidade de probabilidade, 72
- função de verossimilhança, 25
- função erro quadrático, 32
- função objetivo, 36
- funções de base radial, 26
- funções de Green, 35
- funcional, 47

- inferência Bayesiana, 67, 68, 76, 80

- média zero, 16, 26

- método de Gauss, 13
- método de Levenberg-Marquardt, 15
- Método de Metropolis-Hastings, 26
- método de Monte Carlo, 25
- método de volume finitos, 36
- método do gradiente, 13
- método do gradiente conjugado, 17, 24, 49, 55
- método steepest-descent, 17
- mal-condicionamento, 15
- matriz de covariância, 16, 26
- matriz de sensibilidade, 15
- medidas experimentais, 19
- Metropolis-Hastings, 25, 74
- minimização, 18
- modelo térmico, 27
- multiplicador de Lagrange, 20

- norma de mínimos-quadrados, 16

- Polak-Ribiere, 17
- princípio da discrepância, 21, 56
- Princípio de Discrepância, 18
- problema adjunto, 19, 20, 22, 52, 53
- problema de estimativa, 18
- problema de Sensibilidade, 19
- problema de sensibilidade, 49
- problema Direto, 19
- problema Inverso, 19
- problema inverso, 9, 68
- processo estocástico, 73
- propriedades termofísicas, 47

- Razão de Hastings, 74
- regularização, 72
- regularização iterativa, 18

- simulated annealing, 25
- steepest-descent, 13

- técnica de problemas inversos, 27
- teorema de Bayes, 24
- transferência de calor, 68
- transformada de Fourier, 35, 36
- valores de referência, 28
- variáveis adimensionais, 14
- variáveis randômicas, 24