



08 a 11 de Outubro de 2018, Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

DISTRIBUIÇÕES CONDICIONAIS COMPLETAS ASSOCIADAS AO PROBLEMA INVERSO DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM PLACAS TERMICAMENTE FINAS

Lucas J. G. Freitas¹ - lfreitas@iprj.uerj.br

Luiz A. S. Abreu¹ - luiz.abreu@iprj.uerj.br

Diego C. Knupp¹ - diegoknupp@iprj.uerj.br

Antônio J. da Silva Neto¹ - ajsneto@iprj.uerj.br

¹Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico - Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo. *O presente trabalho tem o objetivo de estimar três parâmetros associados ao problema de condução de calor em uma placa termicamente fina, utilizando o Algoritmo de Metropolis-Hastings e o Amostrador de Gibbs. O problema inverso é formulado de acordo com dados experimentais simulados a partir de soluções numéricas para o problema direto e informações a priori para os parâmetros. A principal contribuição é a apresentação de distribuições condicionais completas para os parâmetros de interesse. Os resultados obtidos mostram que o Amostrador de Gibbs, quando implementado para estas distribuições, possui melhor performance do que o Algoritmo de Metropolis-Hastings, ou seja, produz distribuições a posteriori com menor desvio padrão e intervalos de credibilidade de menor amplitude.*

Keywords: *Condução de Calor, Inferência Bayesiana, Métodos MCMC.*

1. INTRODUÇÃO

Muitos problemas em transferência de calor são dependentes do tempo, e nestes casos, pode ser interessante encontrar estimativas para propriedades térmicas relevantes ao estudo da interação entre um determinado material e uma dada fonte de energia em dado momento. O problema inverso associado à transferência de calor em uma placa termicamente fina busca determinar parâmetros capazes de influenciar na própria transferência de calor, dadas medidas de temperatura correspondentes à solução do problema direto. Neste contexto, o presente trabalho apresenta duas formas de resolver um problema inverso de condução de calor por meio de Métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (Gamerman e Lopes, 2006), sendo uma das propostas baseada em distribuições condicionais completas. Os códigos computacionais foram implementados em linguagem R (R Development Core Team, 2013), especificamente com o pacote R2Jags (Su, 2015), que é uma interface mais simples para o uso da linguagem BUGS (Spiegelhalter, 2000).

O estudo da estimativa de propriedades térmicas via condicionais completas se justifica por permitir as incertezas de medição presentes nos parâmetros do modelo, além de ter grande velocidade na convergência das cadeias de Markov, comparando com outros métodos.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

Considerando uma placa termicamente fina, pode-se modelar o problema físico de condução de calor unidimensional ilustrado na Fig. 1, por meio de uma abordagem via parâmetros concentrados. Assim, o problema de condução de calor pode ser modelado pela seguinte equação diferencial ordinária (Incropera, 2006; Ozisik, 1993; Cotta e Mikhailov, 1997):

$$LC_p \frac{dT(t)}{dt} = q - h[T(t) - T_\infty], \text{ para } t > 0 \quad (1)$$

$$T(t) = T_{ini}, \text{ para } t = 0 \quad (2)$$

onde L é a espessura da placa (m), C_p é a capacidade térmica volumétrica (J/m^3K), T_∞ é a temperatura ambiente do fluido ($^{\circ}C$), h é o coeficiente de troca térmica por convecção (W/m^2K), q é um fluxo de calor constante (W/m^2) e T_{ini} é a temperatura inicial ($^{\circ}C$). A Eq. (2) é uma condição inicial.

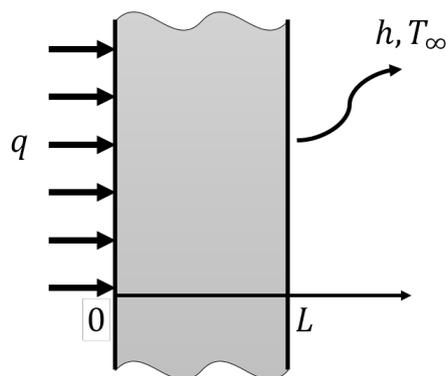


Figura 1- Transferência de Calor - Placa e Fluido

A solução analítica deste problema é dada por (Incropera, 2006; Ozisik, 1993; Cotta e Mikhailov, 1997):

$$T(t) = \frac{q}{h} \cdot (1 - \exp(\frac{-t \cdot h}{L \cdot C_p})) + T_\infty \cdot (1 - \exp(\frac{-t \cdot h}{L \cdot C_p})) + T_{ini} \cdot \exp(\frac{-t \cdot h}{L \cdot C_p}), \quad (3)$$

cuja estrutura permite formulação explícita associada ao problema inverso para os parâmetros q , T_∞ e T_{ini} . Tais formulações, bem como a solução do problema inverso, são apresentadas nas duas seções a seguir.

3. FORMULAÇÃO E SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

Neste trabalho, para que o método proposto seja analisado, inicialmente serão considerados dados experimentais sintéticos Y para a solução do problema inverso. Neste caso, o desvio padrão das medições, bem como, sua distribuição estatística são gerados de forma controlada. Em seguida, em trabalhos futuros, espera-se aplicar a presente abordagem em casos envolvendo medições reais. Assim, pode-se utilizar a solução do problema direto com a adição de um ruído aleatório com distribuição normal para a obtenção de dados simulados, como segue

$$Y_i = T_i(\theta) + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2). \quad (4)$$

Para evitar o crime inverso (Colaço e Orlande, 2006; Kaipio e Somersalo, 2005), ou seja, a prática de usar o mesmo modelo para simular os dados experimentais e resolver o problema inverso, as soluções do problema direto foram obtidas numericamente, por meio do método Runge-Kutta de quarta ordem. O problema inverso é, desta forma, resolvido com a solução analítica apresentada anteriormente. De maneira objetiva, a Inferência Bayesiana busca resolver problemas inversos utilizando toda informação disponível sobre o comportamento dos parâmetros de interesse, normalmente codificada em distribuições de probabilidade a priori. Desta forma, a solução do problema inverso é, conforme Kaipio e Fox (2011), a distribuição a posteriori para estes parâmetros. Em tal contexto, tem-se que a equação

$$P(\underline{Y} | \underline{\theta}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - T_i)^2}{\sigma^2} \right) \right], \quad (5)$$

é a função de verossimilhança do modelo, que representa a distribuição conjunta de todas as observações independentes Y . Neste caso, T_i foi obtido analiticamente e n é o número de observações. As distribuições a priori para os elementos do vetor de parâmetros $\underline{\theta}$ são dadas por

$$q \sim N(1200, 500), \quad (6)$$

$$T_\infty \sim N(25, 2.5), \quad (7)$$

$$T_{ini} \sim N(25, 2.5). \quad (8)$$

O teorema de Bayes é a regra de atualização que relaciona as distribuições a priori e a verossimilhança, conforme Migon e Gamerman (2014). Através deste teorema, é possível encontrar o núcleo da distribuição a posteriori,

$$P(\underline{\theta} | \underline{Y}) \propto P(\underline{Y} | \underline{\theta})P(\underline{\theta}). \quad (9)$$

Por diversas vezes, a Eq. (9) não resulta em expressões de distribuições de probabilidade conhecidas. Esta dificuldade impede, por exemplo, que valores desta distribuição sejam amostrados diretamente de softwares ou pacotes específicos para estatística.

Os métodos MCMC conhecidos por Amostrador de Gibbs e Algoritmo de Metropolis-Hastings são populares formas de aproximação da distribuição a posteriori, segundo Gamerman e Lopes (2006). O objetivo deste trabalho é a comparação entre os resultados obtidos para a distribuição a posteriori do vetor de parâmetros com estes dois métodos.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os parâmetros utilizados para geração de medições simuladas utilizadas na solução do problema inverso e que não são de interesse foram considerados conhecidos deterministicamente e por este motivo não participam dos procedimentos de estimação como variáveis aleatórias. Os valores $0,002m$, $95W/m^2K$ e $1,9 \times 10^6 J/m^3K$ foram atribuídos, respectivamente, a L , h e C_p . Os valores escolhidos estão relacionados com características de amostras disponíveis em alumínio e de uma bancada experimental onde se espera validar a presente metodologia (Lacerda et al., 2018). O desvio padrão associado ao ruído ε_i e valores de teste para os parâmetros de interesse q , T_∞ e T_{ini} foram escolhidos considerando o mesmo motivo citado anteriormente. Neste caso, utilizou-se $\sigma = 0,2^\circ C$, $q = 1000W/m^2$, $T_\infty = 24^\circ C$ e $T_{ini} = 25^\circ C$. A variância pequena torna os dados simulados bem concentrados nas soluções analíticas. Baseando-se na Eq. (9), que representa o teorema de Bayes, é possível encontrar distribuições condicionais completas para cada um dos parâmetros de interesse do problema. Tais distribuições são obtidas para um determinado parâmetro $\theta_0 \in \underline{\theta}$ considerando todos os outros parâmetros constantes na expressão da distribuição a posteriori. Para $\underline{\theta} = (q, T_\infty, T_{ini})$, tem-se

$$q \mid \underline{\theta}(-q) \sim N \left(\frac{\frac{500^2}{h} \left(\sum_{i=1}^n A_i (Y_i - B_i) \right) + 1200 \cdot (\sigma^2)}{\frac{500^2}{h^2} \left(\sum_{i=1}^n A_i^2 \right) + \sigma^2}, \frac{500^2 \cdot (\sigma^2)}{\frac{500^2}{h^2} \left(\sum_{i=1}^n A_i^2 \right) + \sigma^2} \right), \quad (10)$$

com $A_i = 1 - \exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right)$, $B_i = T_\infty A_i + T_{ini}(1 - A_i)$ e $T(i) = \frac{q}{h} A_i + B_i$,

$$T_\infty \mid \underline{\theta}(-T_\infty) \sim N \left(\frac{\left(\sum_{i=1}^n A_i (Y_i - C_i) \right) + 25}{\left(\sum_{i=1}^n A_i^2 \right) + 1}, \frac{\sigma^2}{\left(\sum_{i=1}^n A_i^2 \right) + 1} \right), \quad (11)$$

com $C_i = \frac{q}{h} \left(\exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right) \right) + T_\infty (1 - \exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right))$ e $T(i) = C_i + T_\infty A_i$ e

$$T_{ini} \mid \underline{\theta}(-T_{ini}) \sim N \left(\frac{\left(\sum_{i=1}^n D_i (Y_i - E_i) \right) + 25}{\left(\sum_{i=1}^n D_i^2 \right) + 1}, \frac{\sigma^2}{\left(\sum_{i=1}^n D_i^2 \right) + 1} \right), \quad (12)$$

com $D_i = \exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right)$, $E_i = \frac{q}{h} (1 - \exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right)) + T_\infty (1 - \exp\left(\frac{-i \cdot h}{L \cdot C_p}\right))$ e $T(i) = E_i + T_{ini} D_i$.

O Algoritmo de Metropolis-Hastings gera valores de uma distribuição auxiliar de mais viável amostragem e os aceita como observações da distribuição a posteriori com determinada probabilidade, que, em determinadas condições, é calculada através de uma razão entre verossimilhanças em estados específicos. Trata-se de um método de rejeição, cujo desenvolvimento faz parte dos mais notáveis avanços da estatística, especialmente a partir de década de 60.

O Amostrador de Gibbs é um interessante caso particular do Algoritmo de Metropolis-Hastings (Gamerman e Lopes, 2006), onde sempre haverá mudança na cadeia de parâmetros de interesse, ou seja, a probabilidade de aceitação vale sempre 1. As transições de uma iteração

para outra das cadeias são feitas, neste problema de condução de calor, de acordo com as distribuições condicionais completas, representadas pelas Eqs. (10-12). A tabela 1 apresenta os valores dos parâmetros q , T_{ini} e T_{∞} que foram utilizados para a geração dos dados, os resultados obtidos pelos algoritmos durante a estimativa e intervalos de credibilidade de 95% para os algoritmos de Metropolis (MH) (Migon e Gamerman, 2014) e de Gibbs (GB).

Tabela 1- Estimação - Parâmetros q , T_{ini} e T_{∞}

	Valores Reais	Estim. (MH)	IC. (MH)	Estim. (GB)	IC. (GB)
$q(W/m^2)$	1000,00	1105,45	[1020,58 ; 1189,70]	1097,56	[1074,55 ; 1128,57]
$T_{ini}(^{\circ}C)$	25,00	24,72	[24,58 ; 25,76]	25,15	[25,23 ; 25,81]
$T_{\infty}(^{\circ}C)$	24,00	25,04	[24,64 ; 25,45]	24,53	[24,12 ; 24,92]

Pode-se verificar que o Amostrador de Gibbs apresenta melhores estimativas pontuais e intervalos de credibilidade de menor amplitude, ou seja, para este problema, a utilização das distribuições condicionais completas parece melhorar a estimação dos parâmetros em avaliação. Também é interessante observar que os valores reais não estão dentro dos intervalos de confiança para nenhum dos parâmetros estimados, apesar de estarem bem próximos.

Tais fatos sobre a qualidade das distribuições a posteriori geradas também podem ser comprovados através de diagnósticos de convergência. Implementando ambos os métodos, MH e GB, com “lag” de tamanho 10, “burn-in” para os 1000 primeiros valores amostrados em 10000 iterações e valores iniciais fixos ($q = 500$, $T_{ini} = 12.5$ e $T_{\infty} = 50$), as cadeias convergiram em menos iterações com o Algoritmo de Gibbs. Por “lag”, entende-se o intervalo entre os elementos selecionados para a amostra da distribuição a posteriori, após a implementação de um método MCMC. “Burn-in” é o descarte do período inicial de aquecimento do modelo. O diagnóstico de Gelman, que é um diagnóstico de convergência baseado em análises de variância para cadeias obtidas sequencialmente, no entanto, é próximo de 1 para ambos os métodos, o que deixa clara a convergência nos dois casos. As Figs. 2 e 3 apresentam as cadeias para o parâmetro q , obtidas pelo Amostrador de Gibbs (GB) e pelo Algoritmo de Metropolis-Hastings (MH), respectivamente.

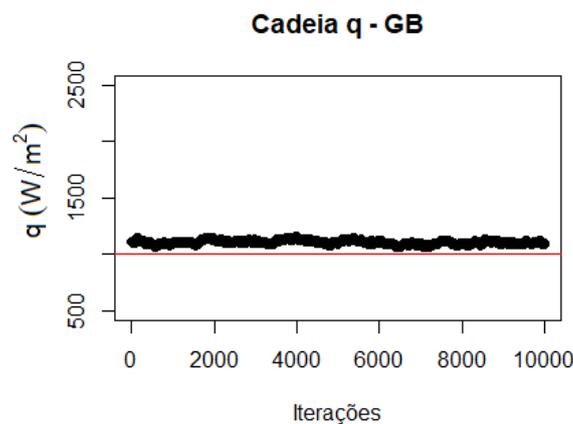


Figura 2- Cadeia de Markov-Amostrador de Gibbs: Parâmetro q

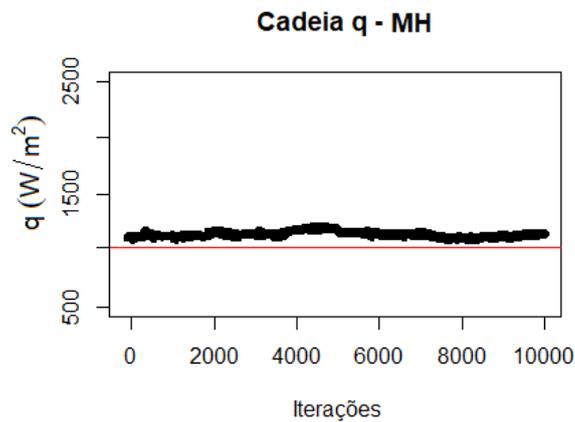


Figura 3- Cadeia de Markov-Metropolis Hastings: Parâmetro q

Verifica-se ainda, que as cadeias se movimentam do valor inicial (50% do valor real) em direção ao valor exato do parâmetro rapidamente, representado pela linha vermelha. O “burn-in” elimina qualquer relação com o valor inicial, que é escolhido de forma arbitrária. A cadeia obtida via Amostrador de Gibbs (GB), porém, possui menor variância, como se pode observar nas áreas entre as cadeias, para os dois métodos, e a linha vermelha que representa o parâmetro real. Tal fato está totalmente de acordo com a comparação entre as amplitudes dos intervalos de credibilidade obtidos para os dois casos. O melhor ajuste do Algoritmo de Gibbs ainda pode ser verificado por meio de gráficos sobre a temperatura estimada. As Figs. 4 e 5 mostram as curvas ajustadas, as observações e os intervalos de credibilidade para os métodos GB e MH, respectivamente

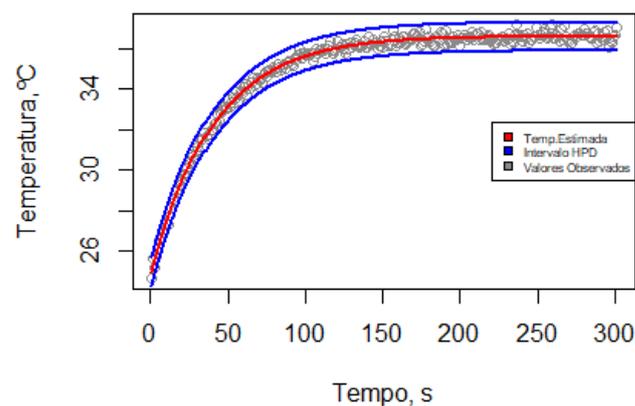


Figura 4- Temperatura ao longo do tempo - GB

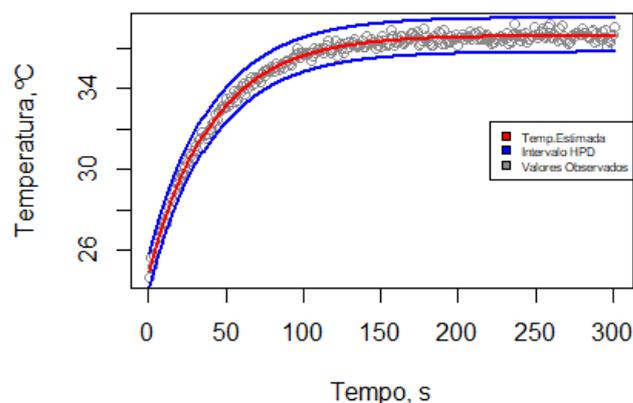


Figura 5- Temperatura ao longo do tempo - MH

O intervalo de credibilidade do Algoritmo de Metropolis-Hastings é mais largo para a temperatura ao longo do tempo. Os principais resultados deste trabalho são avaliados para o parâmetro q , pois este é de mais difícil obtenção. As temperaturas em questão, T_{ini} e T_{∞} , outros parâmetros deste trabalho, podem ser alvo de medição direta por instrumento, por exemplo. Por fim, a abordagem bayesiana se justifica por meio de uma simples comparação entre os histogramas das distribuições a priori e posteriori para q (Fig. 6) e da análise de resíduos, especificamente obtidos pelo Amostrador de Gibbs (Fig. 7)

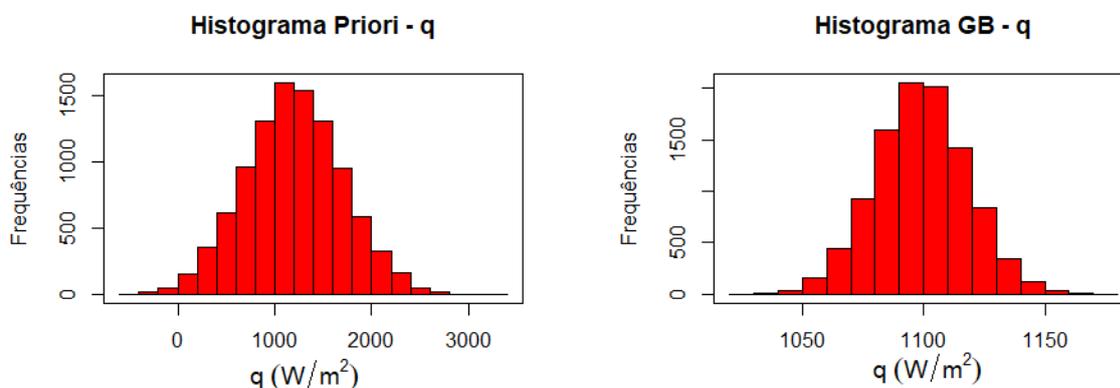


Figura 6- Histogramas - q

Pode-se verificar que a distribuição a posteriori é mais informativa do que a distribuição de probabilidade que se tinha inicialmente em relação ao parâmetro q , pois o histograma fica mais concentrado no valor exato estabelecido para a quantidade de interesse após o cálculo desta distribuição. Os resíduos em torno do zero mostram que não existem assinaturas nas curvas, ou seja, não há indicação de correlação entre os parâmetros estimados.

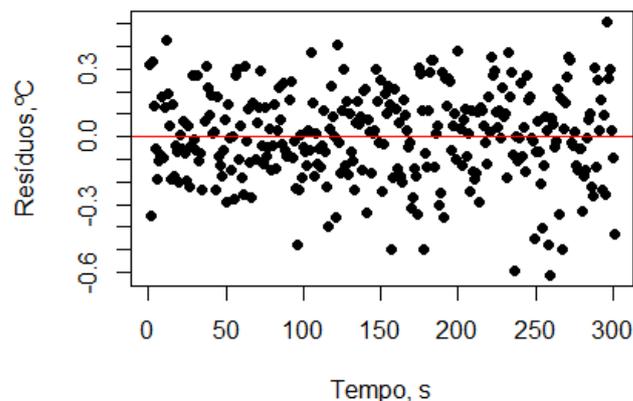


Figura 7- Resíduos - GB

5. CONCLUSÕES

As principais contribuições do trabalho têm relação com a definição dos hiperparâmetros associados às distribuições condicionais completas dos parâmetros de interesse. Com tais núcleos, é possível implementar o Amostrador de Gibbs e obter ganho de estimação em relação ao Algoritmo de Metropolis-Hastings tradicional, método que é bastante utilizado em trabalhos da área. Trabalhos futuros podem explorar distribuições aproximadas para os outros parâmetros do problema de transferência de calor, que aparentemente não possuem formulação implícita no contexto de problema inversos. Também podem ser escolhidas outras distribuições a priori para os parâmetros de interesse, ainda mais informativas, e ajustados outros métodos MCMC, tais como Sequential Monte Carlo (SMC).

Agradecimentos

Os autores agradecem aos órgãos de fomento FAPERJ, CNPq e CAPES pelo apoio financeiro. O Autor Lucas J. G. Freitas agradece aos amigos da turma 2018.1 da disciplina Problemas Inversos, do Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional - IPRJ/UERJ.

Referências

- Kaipio, J.P e Fox, C. (2011), “*The Bayesian Framework for Inverse Problems in Heat Transfer*”, Heat Transfer Engineering, 32:9, 718-753, DOI: 10.1080/01457632.2011.525137
- R Development Core Team (2013). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <http://www.R-project.org>.
- Incropera, Frank P., DeWitt, David P., Bergman, Theodore L. e Lavine, Adrienne S. (2006). “*Fundamentals of heat and mass transfer*”, 6^o ed., J. Wiley.
- Yu-Sung, Su., Masanao, Yajima.(2015). R2jags: Using R to Run 'JAGS'. R package version 0.5.7.
- Lunn, D.J., Thomas, A., Best, N., e Spiegelhalter, D. (2000) WinBUGS — a Bayesian modelling framework: concepts, structure, and extensibility. Statistics and Computing, 10:325–337.
- Gamerman, D. e Lopes, H. (2006), “*Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference*”, 2^o ed., Chapman & Hall/CRC, São Paulo.

- Migon, H.S, Gamerman, D. e Louzada, F. (2014), “*Statistical Inference: An Integrated Approach*”, 2º ed., Chapman & Hall/CRC, Flórida.
- Knupp, D.C. e Abreu, L.A.S (2016), “*Explicit boundary heat flux reconstruction employing temperature measurements regularized via truncated eigenfunction expansions*”, *Internacional Communications in Heat and Mass Transfer*, 78, 241-252, DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2016.09.012.
- Colaço M.J, Orlande H.R.B, Dulikravich G.S (2006), “*Inverse and optimization problems in heat transfer*”, *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering* 28:1–24, DOI: 10.1590/S1678-58782006000100001.
- Beck J.V, Blackwell B., St. Clair C.R (1985), “*Inverse heat conduction: ill-posed problems*”, 1º ed., Wiley, New York.
- Özışık M.N, Orlande H.R.B (2000), “*Inverse heat transfer: fundamentals and applications*”, 1º ed., Taylor & Francis, New York.
- Orlande H.R.B (2012), “*Inverse Problems in Heat Transfer: New Trends on Solution Methodologies and Applications*”, *Journal of Heat Transfer* 134:031011, DOI: 10.1115/1.4005131.
- Kaipio J., Somersalo E (2005), “*Statistical and Computational Inverse Problems*”, 1º ed., Springer-Verlag, New York.
- Alifanov O.M. (1994), “*Inverse heat transfer problems*”, 1 edº., Springer-Verlag, Berlin, New York.
- Beck J.V, Arnold K.J (1977), *Parameter estimation in engineering and science*, 1º ed., Wiley, New York.
- Lacerda C.R, Colaço M.J e Abreu L.A.S (2018), “*An extension of the reciprocity functional approach to the estimate of two-dimensional spatially dependent thermal contact conductances using regularization via TSVD: numerical and experimental results*”. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering* 40:, DOI: 10.1007/s40430-018-1344-9.
- Ozisik MN (1993), “*Heat Conduction*”. John Wiley & Sons.
- Cotta RM, Mikhailov MD (1997), “*Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*”, Wiley, Chichester, New York.

COMPLETE CONDITIONAL DISTRIBUTIONS ASSOCIATED WITH THE INVERSE PROBLEM OF HEAT TRANSFER IN THERMICALLY THIN PLATES.

Abstract. *The objective of the present work is to estimate three parameters associated to the heat conduction problem in a thermally thin plate using the Metropolis-Hastings Algorithm and the Gibbs Sampler. The inverse problem is formulated according to simulated experimental data from numerical solutions to the direct problem and a priori information for the parameters. The main contribution is the presentation of complete conditional distributions for the parameters of interest. The obtained results show that the Gibbs Sampler, when implemented for these distributions, has better performance than the Metropolis-Hastings Algorithm, that is, it produces a posteriori distributions with smaller standard deviation and smaller credibility intervals.*

Keywords: *Heat Transfer, Bayesian Inference, MCMC Methods.*