

# Trajetórias de Convergência Anômalas e Instáveis Geradas pelo Método de Otimização de Newton Aplicado a um Problema Termo-Convectivo Inverso

Analice C. Brandi, Paulo Seleghim Jr.  
Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos, EESC, USP  
13566-970, São Carlos, SP  
E-mail: analice@sc.usp.br, seleghim@sc.usp.br

**Resumo:** O principal objetivo deste trabalho é contribuir para o desenvolvimento de uma técnica de estimativa do coeficiente de convecção através de medições não intrusivas. Para isso é necessário resolver um problema termo-convectivo inverso intrinsecamente mal condicionado. As trajetórias de convergência geradas pela aplicação do método de Newton foram estudadas com auxílio de um problema teste. As anomalias observadas são explicadas pela presença de um vale de eixo longitudinal curvilíneo circundando o mínimo global. Esta patologia, associada a um fator de relaxação insuficiente, impede a trajetória de convergência de acompanhar o eixo do vale. O mau condicionamento da matriz Hessiana e a atração dos mínimos difuso e locais são fatores que causam as instabilidades observadas. Estas características sugerem o desenvolvimento de um método híbrido de solução, combinando o método de Newton ao da Inclinação Máxima, além da filtragem das correções através da realização de médias.

## 1. Introdução

Processos industriais envolvendo transferência de calor são extremamente comuns em aplicações de áreas tão diversas quanto o setor petroquímico e a secagem de grãos na agroindústria. Em particular, a convecção forçada ou natural é provavelmente o processo mais difundido dentre as diversas modalidades de transferência de calor. Assim, a determinação experimental do coeficiente de convecção é base para o desenvolvimento de novas tecnologias aplicáveis aos processos que envolvem transferências convectivas. Em muitos casos o coeficiente de convecção deve ser determinado através de medições indiretas, seja por questões de segurança (um auto-forno, por exemplo), seja porque a superfície onde ele ocorre não é acessível. Isso implica

em resolver um problema térmico inverso, sabidamente mal condicionado e, portanto, extremamente sensível a erros de natureza experimental ou numérica [7].

O objetivo deste trabalho é contribuir para o desenvolvimento de uma técnica de estimativa do coeficiente de convecção através de medições não intrusivas. O problema termo-convectivo inverso é formulado através de um funcional de erro comparando resultados experimentais (modelo físico) a valores aproximados obtidos a partir de um modelo prospectivo [5]. O modelo prospectivo contém uma aproximação do coeficiente de convecção a ser refinado durante o processo de minimização do funcional de erro. Entretanto, conforme relatado em [3], este funcional possui características topológicas (patologias) que criam dificuldades extremas para que este refinamento convirja para a solução correta (mínimo global). Conforme veremos a seguir, a análise das instabilidades e anomalias das respectivas trajetórias de convergência fornece subsídios importantes para o desenvolvimento de uma técnica de otimização especializada para esse tipo de problema.

## 2. Formulação do Problema Termo-Convectivo Inverso

A equação diferencial que governa a condução de calor pode ser deduzida a partir do princípio da conservação de energia. Sejam  $T$  o potencial térmico e  $k$  a condutibilidade térmica do meio. Nestes termos a conservação de calor se escreve como:

$$\vec{\nabla} \cdot (-k \vec{\nabla} T) = 0 \quad \text{em } \Omega, \quad (1)$$

em que  $\Omega$  denota o domínio do problema. A interação entre  $\Omega$  e o ambiente externo ocorre

por meio de seu contorno  $\partial\Omega$  e é definida pelas relações entre excitação e resposta térmicas, dadas por

$$T = T_0 \quad \text{em } \partial\Omega_1, \quad (2)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial n} = h(T - T_\infty) + q \quad \text{em } \partial\Omega_2, \quad (3)$$

em que  $n$  é o vetor normal,  $h$  é o coeficiente de convecção,  $T_\infty$  é a temperatura ambiente e  $q$  é o fluxo de calor imposto no contorno. Se as equações (1)–(3) possuísem parâmetros totalmente conhecidos, formariam um problema matematicamente bem posto, podendo ser resolvido por técnicas numéricas convencionais [2]. Porém, este não é o caso aqui estudado, no qual um ou mais parâmetros normalmente são desconhecidos em partes do contorno.

A estratégia para a solução consiste em suprir esta deficiência de informação através da medição de condições de contorno redundantes nas suas partes acessíveis. Neste trabalho isto será modelado pela subdivisão do contorno  $\partial\Omega_2$  em três partes, i.e.

$$\partial\Omega_2 = \partial\Omega_{2,1} + \partial\Omega_{2,2} + \partial\Omega_{2,3} \quad (3.1)$$

em que  $\partial\Omega_{2,1}$  representa uma região externa acessível ( $\partial\Omega_{2,1}$ ), sobre a qual medidas experimentais podem ser feitas, e regiões internas inacessíveis, porém onde os parâmetros da equação (3) são totalmente conhecidos a priori ( $\partial\Omega_{2,2}$ ) ou onde eles devem ser determinados ( $\partial\Omega_{2,3}$ ). Em suma, o perfil do coeficiente de convecção ocorrendo em  $\partial\Omega_{2,3}$  deve ser determinado a partir de condições de contorno redundantes (excitação e resposta) sobre  $\partial\Omega_{2,1}$ , além de informações a priori sobre  $\partial\Omega_{2,2}$ .

O problema inverso é formulado como um problema de minimização de um funcional de erro quantificando a diferença entre as temperaturas medidas sobre  $\partial\Omega_{2,1}$ , denotadas  $T_{\text{real}}$ , e temperaturas  $T_{\text{num}}$  obtidas de um modelo prospectivo. Estas temperaturas são calculadas a partir da solução de (1) com as mesmas condições sobre a parte conhecida do contorno, porém impondo-se um perfil prospectivo para o coeficiente de convecção, denotado  $h_{\text{num}}$ , na parte inacessível

do contorno ( $\partial\Omega_{2,3}$ ). Matematicamente este funcional pode ser expresso como

$$e(h_{\text{num}}) = \|T_{\text{real}} - T_{\text{num}}\|. \quad (4)$$

A norma euclidiana será adotada para o cálculo da equação (4). Neste trabalho, as temperaturas medidas, ou sintéticas, são geradas numericamente da mesma forma que  $T_{\text{num}}$ , porém com o perfil correto  $h_{\text{real}}$  imposto sobre  $\partial\Omega_{2,3}$  na equação (3). Assim, um procedimento numérico capaz de produzir refinamentos sucessivos em  $h_{\text{num}}$  de maneira que o erro seja minimizado, conduz, hipoteticamente, à solução do problema, fazendo com que  $h_{\text{num}} = h_{\text{real}}$ .

O método de Newton [4] pode ser usado para encontrar o perfil do coeficiente de convecção que minimiza o funcional de erro (4). Mais especificamente, a seqüência minimizante é dada por

$$h_{k+1} = h_k - \lambda \Delta h_k, \quad (5)$$

$$H(h_k) \Delta h_k = -\vec{\nabla} e(h_k), \quad (6)$$

em que  $\lambda$  representa um fator de relaxação,  $\Delta h$  são correções no vetor  $h$ ,  $H$  corresponde a matriz Hessiana e o índice  $k$  indica o  $k$ -ésimo ciclo de otimização. Os históricos de  $h_k$  correspondem às trajetórias de convergência e revelam aspectos extremamente importantes sobre o mau condicionamento do problema. Este método é muito eficiente se a matriz Hessiana for bem condicionada. Como o problema é inverso e, portanto, intrinsecamente mal condicionado, é esperado que  $H$  seja problemática em algum sentido. Em outras palavras, as correções  $\Delta h_k$  em (5), obtidas da resolução do problema gradiente-Hessiana (6) deve conduzir a uma trajetória de convergência errática, contendo anomalias e instabilidades.

Estas características problemáticas da trajetória de convergência são causadas pelas patologias do funcional de erro, conforme mostrado nos trabalhos [6] e [3]. Estas patologias correspondem, por exemplo, a platôs, múltiplos mínimos locais, vales estreitos, pontos de sela, mínimos difusos, etc. Estas estruturas topológicas impedem que a seqüência minimizante (5) convirja para o mínimo global, seja por sua captura por

mínimos locais ou difuso, seja devido à irregularidade da superfície de otimização.

O comportamento das trajetórias de convergência mostradas a seguir pode ser explicado por uma patologia ainda não mapeada, caracterizada por um vale de eixo curvilíneo, contendo um grande número de mínimos locais. Isso será mostrado em detalhes na seção seguinte.

### 3. Experimentos Numéricos

Considere-se um domínio bidimensional quadrado de lados unitários com  $k = 1$  em todo o domínio e  $T_\infty = 0$  em todo o contorno. Os demais parâmetros são definidos conforme mostra a Figura 1. A condição de contorno mista (3) foi assumida em todos os lados do quadrado. Neste trabalho a equação governante (1), em coordenadas cartesianas, foi discretizada pelo método de elementos finitos [1] em uma malha computacional de  $31 \times 31$  pontos, gerando 961 nós igualmente espaçados ( $\delta x = \delta y = 0,033$ ) e 1800 elementos triangulares. Tanto a variação da temperatura quanto da condutibilidade térmica foram assumidas lineares no interior dos elementos.

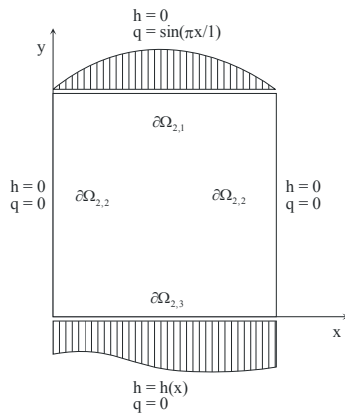


Figura 1: Geometria do problema simulado numericamente.

O problema de referência foi definido a partir do perfil de  $h_{\text{real}}$  no lado inferior do quadrado ( $y = 0$ ) a ser reconstruído através da minimização da função de erro. Mais especificamente, ao fixar  $h_{\text{real}}$  obtêm-se as temperaturas ( $T_{\text{num}}$ ) que seriam medidas do lado superior ( $y = 1$ ) como resposta a aplicação do fluxo de calor no mesmo lado (excitação), isto é, sobre  $\partial\Omega_{2,1}$ . Com a diminuição do erro (4) durante o processo de

otimização as temperaturas obtidas do modelo numérico deveriam convergir para as temperaturas do problema de referência e, conseqüentemente, o  $h_{\text{num}}$  convergiria para o  $h_{\text{real}}$ .

Para ilustrar a patologia mencionada anteriormente, adota-se uma função triangular para o coeficiente de convecção real conforme

$$h_{\text{real}} = \begin{cases} 2 - 4x & \text{para } 0 \leq x \leq 0,5 \\ -2 + 4x & \text{para } 0,5 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (7)$$

Uma forma de representar a superfície de erro em duas dimensões consiste em gerar distribuições prospectivas ( $h_{\text{num}}$ ) perturbando  $h_{\text{real}}$  da seguinte maneira

$$h_{\text{num}} = \begin{cases} 2(b-a)x + a, & 0 \leq x \leq 0,5, \\ 2(a-b)x + (2b-a), & 0,5 \leq x \leq 1, \end{cases} \quad (8)$$

$$a = 1 + \frac{i}{100}, \quad (9)$$

$$b = 0,5 - \frac{j}{100} \left(1 - \frac{j}{200}\right), \quad (10)$$

em que  $i$  e  $j$  variam entre  $0, 1, \dots, 200$  e representam as variáveis do suporte. Com isso o funcional de erro (4) pode ser plotado em função dos parâmetros  $i$  e  $j$ , do que se obtém uma superfície de otimização cujo mínimo global está inserido num vale estreito de eixo curvo, além de ser cercado por diversos mínimos locais, conforme mostrado na Figura 2.

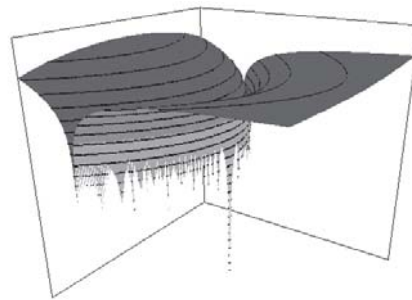


Figura 2: Superfície de erro contendo patologia tipo vale de eixo curvo.

As trajetórias de convergência são geradas aplicando-se recursivamente a fórmula

de Newton (5), a partir de uma estimativa inicial conforme

$$h_0 = h_{\text{real}} + \delta, \quad (11)$$

em que  $\delta$  corresponde a um vetor de perturbações aleatórias uniformes centrados em torno do zero, e com desvio padrão definido previamente. Isto garante que a estimativa inicial em (11) seja tomada progressivamente mais distante da solução correta de  $h_{\text{real}}$ . Neste trabalho considere três estimativas iniciais dadas pela equação abaixo e mostradas na Figura 3.

$$\delta = \begin{cases} \delta_1 \in [-0,5, +0,5] & \text{caso 1,} \\ \delta_2 \in [-1,0, +1,0] & \text{caso 2,} \\ \delta_3 \in [-2,0, +2,0] & \text{caso 3.} \end{cases} \quad (12)$$

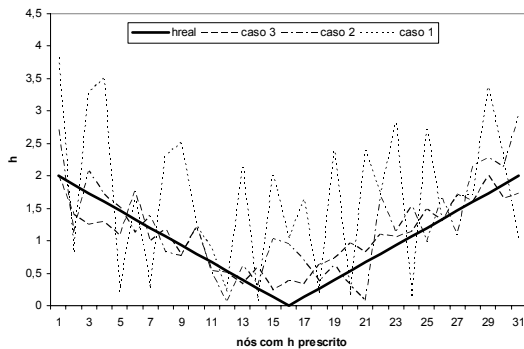


Figura 3: Estimativas iniciais e solução real do coeficiente de convecção.

#### 4. Resultados e Discussões

Foram realizados um total de nove testes considerando as três estimativas iniciais definidas em (12) e três valores do parâmetro de relaxação  $\lambda$ , conforme a equação (5). Cada teste demandou aproximadamente 50 horas, totalizando cerca de 19 dias, simulados em três computadores Pentium Dual Core 2,8 GHz, 2,0 GB RAM.

As Figuras 4, 5 e 6 apresentam as trajetórias de convergência correspondentes ao caso 1 (equação (12)) para  $\lambda = 0,02$ ,  $\lambda = 0,01$  e  $\lambda = 0,005$  na equação (5). A principal característica da trajetória de convergência, mostrada na Figura 4 é o aumento do valor da norma do erro, o que, a princípio, é anômalo relativamente à estratégia do método de Newton. Isto pode ser explicado, muito provavelmente, pela patologia mostrada na

Figura 2. A conjunção de um valor excessivamente grande do parâmetro de relaxação ( $\lambda = 0,02$ ) com as normas do gradiente e da Hessiana, as correções  $\Delta h$  executam uma trajetória curvilínea mais aberta que aquela do vale contendo o mínimo global, conforme esquematizado na Figura 13. Também pode ser observado que a trajetória de convergência ultrapassa a região do mínimo global sendo em seguida novamente atraída para ele, passando por uma singularidade.

Diminuindo o valor de  $\lambda$  para 0,01 este efeito é parcialmente mitigado conforme pode ser observado na Figura 5, sendo que foi possível atingir valores menores da norma do erro. Por volta da centésima iteração, a trajetória se torna bastante irregular até que passa por uma singularidade que a ejeta para mais próximo do vale contendo a solução. A partir da iteração 500 a trajetória é capturada pelo vale e passa a sofrer oscilações extremamente fortes devido à presença de múltiplos mínimos locais conforme mostrado na Figura 2. Em outras palavras, estas instabilidades impedem a convergência para valores inferiores da norma porque, sempre que a trajetória é capturada pelo vale ou se aproxima do mínimo global, passa a sofrer influência da topologia patológica da superfície de erro.

A Figura 6 apresenta a trajetória de convergência para o valor de  $\lambda = 0,005$  na qual estas instabilidades foram bastante suavizadas. Porém, mesmo tendo realizado um número maior de iterações a norma ainda não desceu abaixo do patamar de 0,1 correspondente ao caso anterior. É importante ressaltar que nestes três últimos casos não se obteve convergência para o mínimo global e, mesmo que o número de iterações fosse infinito, muito provavelmente não teria sido obtida esta convergência.

Partindo-se então de uma estimativa inicial um pouco mais distante da solução (caso 2) trajetórias de convergência análogas foram reproduzidas conforme mostradas nas Figuras 7, 8 e 9. Neste caso, pode-se constatar que a trajetória não sofre mais influência dos mínimos locais que se avizinham do mínimo global, porém é fortemente dominada pela estrutura curvilínea do vale da solução. Uma característica importante pode ser observada na Figura 7, por volta da iteração de número

200, que é a trajetória de convergência mudando de lado em relação ao vale e passando por duas singularidades marcantes. A diminuição do fator de relaxação não produziu efeitos significativos em termos de possibilitar a convergência para a solução, nem tampouco quanto a suavizar instabilidades.

As simulações para as estimativas iniciais mais distantes do mínimo global (caso 3) são mostradas nas Figuras 10, 11 e 12. Podem-se constatar instabilidades muito grandes geradas por correções praticamente aleatórias na fórmula de Newton. A explicação para este fato é que a trajetória de convergência provavelmente está sendo capturada pelo mínimo difuso, onde não somente as derivadas de primeira ordem mas também as de segunda ordem que compõem a matriz Hessiana estão tendendo a zero. Nestas condições, a solução do problema (6) se torna numericamente instável e as correções resultantes são fortemente influenciadas por erros de truncamento numérico, por exemplo. Uma característica importante, comum aos três casos, é a passagem por uma quase-singularidade (iterações 370, 700 e 1200 aproximadamente) o que levou a trajetória a um aprisionamento definitivo pelo mínimo difuso.

A análise das anomalias e instabilidades das trajetórias de convergência sugerem modificações a serem implementadas no método de minimização do funcional de erro para que a solução (mínimo global) possa ser alcançada. Em particular, a atração exercida pelo mínimo difuso e pelos mínimos locais deve ser anulada ou diminuída para que o mínimo global possa capturar a trajetória de convergência.

Uma forma de satisfazer estas exigências é o desenvolvimento de um método híbrido, combinando as vantagens do método de Newton (rapidez de convergência, robustez, etc.) e de um método baseado no gradiente, por exemplo, o método da Inclinação Máxima, menos susceptível à atração do mínimo difuso. Além disso, as instabilidades causadas pelo mal condicionamento da Hessiana podem ser suavizadas pela introdução de inércia na trajetória de convergência, impedindo que mudanças abruptas possam ocorrer. Isso pode ser feito fazendo uma média entre a correção atual  $\Delta h_k$  e as correções nos passos anteriores

de otimização, isto é,  $\Delta h_{k-1}, \dots, \Delta h_{k-N}$ . Matematicamente, estas idéias podem ser implementadas através da fórmula

$$h_{k+1} = h_k - \lambda \overline{\Delta h}_k, \quad (13)$$

$$\overline{\Delta h}_k = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Delta h_n, \quad (14)$$

$$\Delta h_k = [\alpha H(h_k)^{-1} + (1-\alpha)I] \vec{\nabla} e(h_k), \quad (15)$$

em que  $\alpha$  é um parâmetro de ponderação entre o método de Newton e da Inclinação Máxima e  $N$  indica o número de correções anteriores a serem consideradas na média.

## 5. Conclusões

Neste trabalho foram estudadas as trajetórias de convergência geradas pela aplicação do método de Newton a um problema termo-convectivo inverso. Um problema teste foi definido e, a partir das patologias do funcional de erro, foram identificadas as principais causas das anomalias e instabilidades observadas. Mais precisamente, as anomalias estão associadas à presença de um vale curvilíneo circundando o mínimo global. Esta patologia, associada a um fator de relaxação insuficiente, impede a trajetória de convergência de acompanhar o eixo do vale, fazendo uma curva mais aberta que este, conforme observado nas Figuras 4 a 12 e esquematizado na Figura 13. Outra conclusão importante refere-se às instabilidades observadas, principalmente, nas Figuras 10, 11 e 12. Isso se deve à atração pelo mínimo difuso, região em que as derivadas de primeira e segunda ordem tendem a zero. Com isso, a solução do problema gradiente-Hessiana (equação (6)) se torna numericamente instável.

Estas características sugerem o desenvolvimento de um método híbrido de solução, combinando o método de Newton ao da Inclinação Máxima, além da filtragem das correções através da realização de médias (equações (13), (14) e (15)).

Futuras pesquisas deverão envolver uma análise mais detalhada das trajetórias de convergência com auxílio de normas mais específicas metrificando, por exemplo, a distância entre a solução real ( $h_{\text{real}}$ ) e a solução

prospectiva ( $h_{num}$ ). Da mesma maneira, outros casos de referência devem ser estudados, bem como domínios de formas mais representativas de situações reais.

## **Agradecimentos**

Agradecemos à FAPESP pelo apoio financeiro no desenvolvimento deste trabalho, processo 04/15185-7.

## **Referências**

- [1] E.B. Becker, G.F. Carey and J.T. Oden, “Finite Elements: An Introduction”, vol. I, Prentice-Hall, 1981.
- [2] L. Borcea, Electrical impedance tomography, *Inv. Prob.*, 18 (2003) R99-R136.
- [3] A.C. Brandi e P. Seleglim Jr., Determinação não intrusiva do coeficiente de convecção em um escoamento interno - Análise da patologia do problema inverso, XXX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional – CNMAC, CD-ROM, Florianópolis, Brasil, 2007.
- [4] J. Nocedal e S.J. Wright, “Numerical Optimization”, Springer, 1999.
- [5] M.N. Özisik and H.R.B. Orlande, “Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications”, Taylor & Francis, 2000.
- [6] V.P. Rolnik e P. Seleglim Jr., A specialized genetic algorithm for the electrical impedance tomography of two-phase flows, *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. and Eng.*, 28 (2006) 378-389.
- [7] P. Seleglim Jr. e F.E. Milioli, Improving the determination of bubble size histograms by employing wavelet de-noising techniques, *Powder Technol.*, 115 (2001) 114-123.

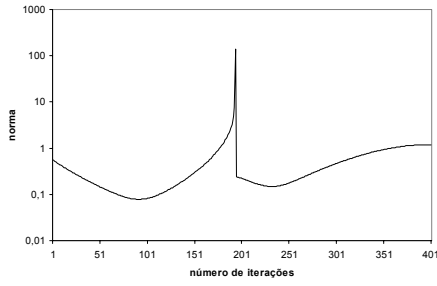


Figura 4: Caso 1 para  $\lambda = 0,02$ .

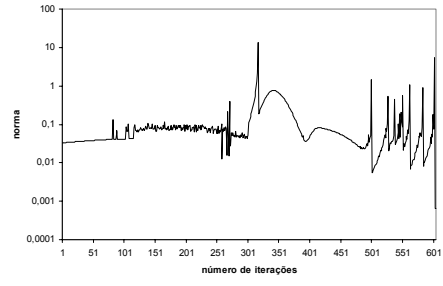


Figura 5: Caso 1 para  $\lambda = 0,01$ .

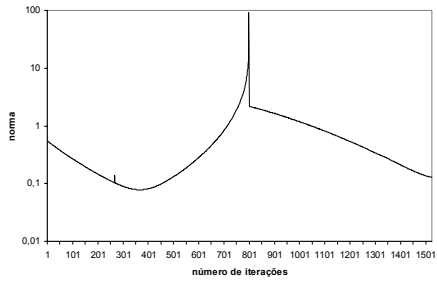


Figura 6: Caso 1 para  $\lambda = 0,005$ .

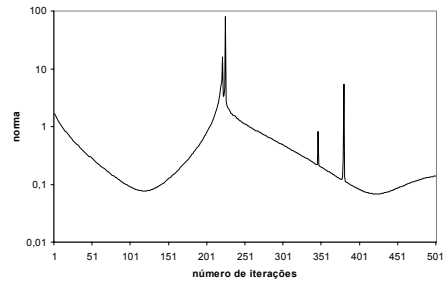


Figura 7: Caso 2 para  $\lambda = 0,02$ .

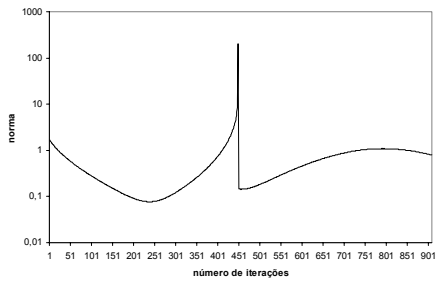


Figura 8: Caso 2 para  $\lambda = 0,01$ .

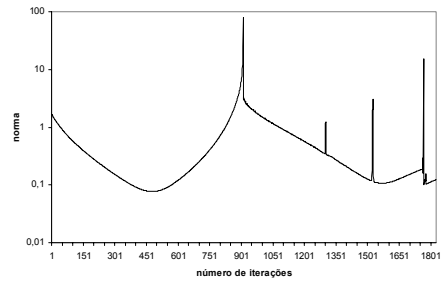


Figura 9: Caso 2 para  $\lambda = 0,005$ .

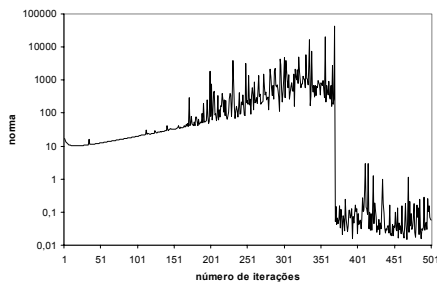


Figura 10: Caso 3 para  $\lambda = 0,02$ .

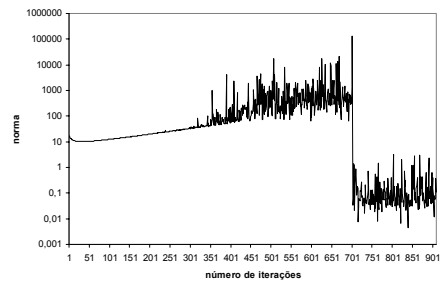


Figura 11: Caso 3 para  $\lambda = 0,01$ .

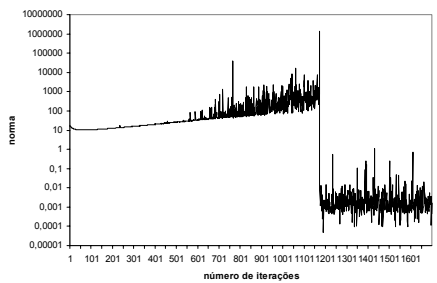


Figura 12: Caso 3 para  $\lambda = 0,005$ .

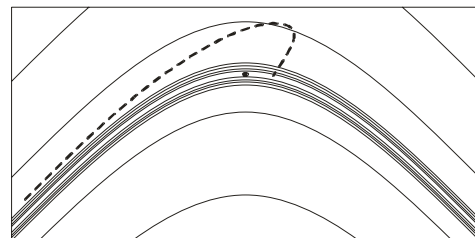


Figura 13: Trajetória anômala esquematizada.