

Estimativa de Propriedades Térmicas Empregando o Método de Monte Carlo Hamiltoniano via STAN

Josiele da S. Teixeira¹, Antônio J. da S. Neto²

IPRJ, Nova Friburgo, RJ

Rafael C. Fernandez³, Helio dos S. Migon⁴, Carlos T. P. Zanini⁵

DME/IM/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Resumo. Este trabalho tem como objetivo formular e resolver o problema inverso de identificação de propriedades térmicas utilizando Inferência Bayesiana via STAN. Foram consideradas duas versões do problema direto de transferência de calor: uma homogênea e uma não homogênea. A versão homogênea foi resolvida por meio do Método de Separação de Variáveis, enquanto a não homogênea foi abordada com o Método de Diferenças Finitas (MDF) em sua formulação explícita. Para a solução dos respectivos problemas inversos de identificação de propriedades térmicas, empregou-se o Método de Monte Carlo Hamiltoniano (HMC), implementado utilizando a ferramenta estatística STAN, permitindo assim a estimação das distribuições de probabilidade *a posteriori* dos parâmetros de interesse.

Palavras-chave. Transferência de Calor, Diferenças Finitas, Separação de Variáveis, Hamiltoniano de Monte Carlo, STAN.

1 Introdução

A determinação de propriedades físicas de materiais, que consiste na sua caracterização macroscópica, tem sido o objeto de estudo de grande parte da comunidade científica nos últimos anos. Sua importância emerge da necessidade de diversos setores industriais em obter materiais com propriedades físicas e químicas bem definidas e com pequenas incertezas. Pode-se destacar, por exemplo, a indústria de desenvolvimento de materiais não-homogêneos, como a de nanocompósitos, que lida com o problema de caracterização das propriedades físicas de seus produtos, caso a caso, com o intuito de garantir sua eficiência em uso, visto que, existem inúmeras possibilidades de composição das fases e arranjo de cada uma [3]. Dessa forma, desenvolver materiais novos de alto desempenho é de grande importância na evolução da indústria moderna, onde tais avanços são utilizados em grande parte dos produtos de uso cotidiano com alto impacto social. Portanto, estimar propriedades materiais tornou-se uma prioridade para a indústria [2].

Destacada a importância da estimação de propriedades físicas materiais, o presente trabalho propõe a aplicação da inferência Bayesiana para a formulação e solução do problema inverso de identificação de propriedades térmicas da placa termicamente fina. Devido à sua grande aplicabilidade e eficiência, os métodos Bayesianos estão, cada vez mais, sendo utilizados pela comunidade científica. Essa abordagem permite incorporar informações a priori sobre os parâmetros de interesse ao processo de estimação, tratar explicitamente incertezas e assimilar novas informações em

¹jteixeira@iprj.uerj.br

²ajsneto@iprj.uerj.br

³rafaelc@dme.ufrj.br

⁴migon@im.ufrj.br

⁵carlostanini@dme.ufrj.br

contextos adaptativos. Nesta abordagem, as grandezas do problema são modeladas como variáveis aleatórias e, ao final do processo, obtém-se uma aproximação da Função Densidade de Probabilidade (PDF) a posteriori dos parâmetros de interesse, da qual é possível inferir várias propriedades estatísticas, tais como média, desvio padrão e intervalos de credibilidade [1, 4, 8]

2 Problema Direto

A determinação da distribuição de temperatura em corpos sólidos pode ser realizada mediante a resolução da *equação da condução de calor*, submetida a um conjunto específico de condições de contorno e iniciais. Neste trabalho, considera-se uma placa plana de espessura L , cuja temperatura $T(x, t)$ é função do tempo $t[s]$ e varia exclusivamente ao longo da coordenada unidimensional x . Inicialmente, a placa apresenta uma distribuição de temperatura uniforme T_0 , com uma taxa de geração interna de energia uniforme g . A superfície localizada em $x = 0$ encontra-se termicamente isolada, enquanto a superfície em $x = L$ está sujeita à transferência de calor por convecção com um meio circundante, caracterizado por um coeficiente de transferência de calor h . A formulação matemática para esse problema de transferência de calor é dada por

$$w \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + g, \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad t > 0 \quad (2)$$

$$-k \left. \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right|_{x=L} + hT(L, t) = hT_0, \quad t > 0 \quad (3)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad 0 < x < L \quad (4)$$

onde ρ é a massa específica do material $[kg/m^3]$, c_p é o calor específico do material $[J/kg K]$, $w = \rho c_p$ é a capacidade térmica volumétrica $[J/m^3 K]$ e k é a condutividade térmica do material $[W/m K]$.

A solução da Equação (1) não pode ser obtida empregando diretamente o método analítico Separação de Variáveis, visto que este método só é aplicável a problemas homogêneos (equação governante e condições de contorno homogêneas) tornando necessário a utilização de métodos analíticos mais sofisticados como a Técnica da Transformada Integral Clássica (CITT) ou métodos numéricos. Para esse problema, também é possível fazer uso de filtros analíticos que podem ser aplicados ao problema não-homogêneo, e portanto, não-separável a priori, para torná-lo homogêneo. No presente trabalho, serão resolvidos uma versão homogênea do problema de transferência de calor via Separação de Variáveis e o problema não homogêneo via Método de Diferenças Finitas. O objetivo dessas análises é demonstrar a utilização da ferramenta estatística STAN tanto para problemas com solução analítica quanto para problemas com soluções obtidas por métodos numéricos.

Na versão homogênea que será considerado no presente trabalho, não há geração interna de calor, isto é $g = 0$, além disso, as condições de contorno consideradas são homogêneas e prescritas, a condição inicial, $p(x)$, é uma função do espaço. A formulação desse problema é dada como

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (5)$$

$$T(0, t) = T(1, t) = 0, \quad t > 0 \quad (6)$$

$$T(x, 0) = p(x) = \begin{cases} x & \text{se } x < 0,5 \\ 1 - x & \text{se } x \geq 0 \end{cases}, \quad 0 < x < 1 \quad (7)$$

onde $\alpha = \rho c_p / k$. Esse problema pode ser facilmente resolvido analiticamente via método de separação de variáveis, que será descrito resumidamente a seguir.

2.1 Solução do Problema Direto Não Homogêneo

Para obtenção de uma solução aproximada, fisicamente satisfatória, da Equação (8) que modela o problema físico abordado, o Método das Diferenças Finitas (MDF) será empregado. De modo geral, o MDF pode ser resumido em dois passos principais; o primeiro passo consiste na discretização do domínio de interesse, i.e., a solução do problema deixa de ser contínua e passa a ser calculada em pontos discretos da malha. No segundo passo, as derivadas do potencial $T(x, t)$ são aproximadas por expansões de Taylor usando os nós da malha discretizada. O domínio contínuo (x, t) é substituído por uma malha computacional onde cada nó (x_i, t_n) é identificado pelo par de índices (i, n) , onde $T(x_i, t_n) = T_i^n$, com $i = 0, \dots, N_x$ e $n = 1, \dots, N_t$.

Considerando as expansões em séries de Taylor para as derivadas, o domínio discretizado e a formulação explícita com diferenças avançadas no tempo e centradas no espaço, a Equação (1) pode ser então aproximada por

$$T_i^{n+1} = rT_{i-1}^n + (1 - 2r)T_i^n + rT_{i+1}^n + \frac{\Delta t}{\rho c_p} g_i, \quad (8)$$

onde $r = \frac{\kappa \Delta t}{\rho c_p (\Delta x)^2}$, $n = 0, 1, 2, \dots, N_t$ e $i = 1, \dots, N_x - 1$. Para a representação das condições de contorno, são consideradas diferenças avançadas em $x = 0$ e atrasadas em $x = L$, resultando

$$-3T_1^{n+1} + 4T_2^{n+1} - T_3^{n+1} = 0, \quad n = 0, \dots, N_t - 1, \quad (9)$$

$$T_{N_x-2}^{n+1} - 4T_{N_x-1}^{n+1} + \left(\frac{2h\Delta x}{\kappa} + 3 \right) T_{N_x}^{n+1} = \frac{2h\Delta x}{\kappa} T_0, \quad n = 0, \dots, N_t - 1. \quad (10)$$

A condição inicial, Equação (4), também é discretizada como $T_i^0 = T_0$, $i = 1, \dots, N_x - 1$.

Conforme discutido na literatura especializada [5], a abordagem numérica explícita utilizada neste trabalho, representada pela Equação (8), apresenta uma restrição relacionada à malha. Isso ocorre porque essa formulação é condicionalmente estável, exigindo que o parâmetro r satisfaça a condição $r < 0.5$ para garantir a convergência da solução.

2.2 Solução do Problema Direto Homogêneo via Separação de Variáveis

No Método de Separação de Variáveis, se considera que a solução pode ser escrita como o produto de duas funções, uma dependendo apenas do espaço (x) e outra apenas do tempo (t)

$$T(x, t) = \Psi(x) \times \Gamma(t). \quad (11)$$

Substituindo (11) na equação do calor (5), obtêm-se duas equações diferenciais ordinárias, uma em função do tempo e outra em função do espaço. Essas equações podem ser analiticamente resolvidas, cujas soluções gerais são dadas por

$$\Gamma_i(t) = e^{-\alpha \mu_i^2 t} \quad (12)$$

$$\Psi_i(x) = \sin(\mu_i x), \mu_i = i\pi, \quad i = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Aplicando as respectivas condições de contorno e inicial, a solução geral é dada por

$$T(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} B_i \sin(\mu_i \pi x) \cdot e^{-\alpha \mu_i^2 t}, \quad B_i = \frac{1}{N_i} \int_0^1 \Psi_i(x) p(x) dx, \quad N_i = \int_0^1 \Psi_i^2(x) dx. \quad (14)$$

Para tornar a solução computacionalmente viável, a série infinita da Equação (15) precisa ser truncada em um número finito de termos. Sendo assim, a solução final aproximada passa a ser

$$T_N(x, t) = \sum_{i=1}^N B_i \sin(\mu_i \pi x) \cdot e^{-\alpha \mu_i^2 t} \quad (15)$$

onde N é a ordem de truncamento, que deve ser escolhida baseada em uma análise de convergência da série.

3 Problema Inverso via STAN

Os métodos de resolução de problemas inversos vêm sendo objeto de pesquisa há muitas décadas, onde diversas metodologias foram desenvolvidas. Os métodos baseados em abordagens Bayesianas têm se mostrado eficientes e robustos, com grande diferencial em relação às abordagens clássicas. Dentre as principais vantagens, se destacam a modelagem dos parâmetros do modelo como variáveis aleatórias e a capacidade de descrever explicitamente qualquer conhecimento prévio que se tenha disponível sobre os parâmetros desconhecidos. Esse conhecimento é modelado por meio de densidades de probabilidade a priori. Além disso, a conexão entre os dados observados e o modelo é realizada via função de verossimilhança, que modela o processo de medição e qualquer discrepância do modelo. Ao final do processo de estimação, tem-se uma estimativa da densidade de probabilidade a posteriori dos parâmetros de interesse, que por sua vez caracteriza o conhecimento a posteriori sobre os parâmetros [4, 6].

Nesse sentido, a plataforma de código aberto STAN é uma ferramenta estatística poderosa e flexível projetada para resolver diversos problemas empregando a inferência Bayesiana. Ela permite que usuários especifiquem modelos estatísticos complexos e realizem inferência Bayesiana usando métodos avançados de amostragem, como o Hamiltonian Monte Carlo (HMC), suportando uma ampla gama de modelos, desde modelos lineares simples até modelos hierárquicos, dinâmicos e não lineares. Além disso, é otimizado para lidar com modelos de alta dimensão e dados complexos. O Hamiltonian Monte Carlo (HMC) é o método principal usado pelo STAN. Esse método se destaca por ser particularmente eficiente para modelos de alta dimensão, onde métodos tradicionais como o Metropolis-Hastings podem ser lentos ou ineficientes. Por fim, O STAN pode ser usado com várias linguagens de programação, incluindo R (via pacote rstan), Python (via pystan ou cmdstanpy), Julia (via Stan.jl) e Matlab (via MatlabStan).

O STAN funciona em três etapas principais: (1) Especificação do Modelo - O usuário define o modelo probabilístico em uma linguagem de modelagem própria do STAN; (2) Compilação do Modelo - O código do modelo é compilado em código C++ para otimização de desempenho; (3) Amostragem e Inferência - utiliza sua biblioteca de métodos como HMC para amostrar da distribuição a posteriori dos parâmetros.

Para a especificação do modelo é necessário a definição da verossimilhança, para isso, considere θ como o vetor composto pelos parâmetros de interesse e \mathbf{f}_{obs} os dados observados. Dessa forma a verossimilhança é dada por $\mathbf{f}_{obs} | \theta, \phi \sim N[\mathbf{f}(\theta), \phi^{-1} \mathbf{I}]$, onde $\mathbf{f}(\theta)$ é a solução do Problema Direto, ϕ é a precisão dos dados experimentais, $\theta \sim p(\theta)$ e $\phi \sim p(\phi)$ são as priors dos parâmetros de interesse e da precisão. Os códigos com as especificações dos modelos para o problema homogêneo e não homogêneo são apresentados no repositório no GitHub: Modelos STAN -Transferência de Calor [7].

3.1 Resultados e Discussões

A solução do problema direto homogêneo resolvido via separação de variáveis foi obtida considerando uma placa com comprimento $L = 1\text{m}$ e uma malha computacional com $N_x = 51$ pontos

no espaço, $\Delta x = L/(N_x - 1)\text{m}$, $\Delta t = 2 * 10^{(-4)} \text{ s}$, tempo final de simulação $t_f = 0.08\text{s}$, ordem de truncamento da série $OT = 50$ e posição de medição dos dados experimentais no meio da placa $x_{medicao} = 0,05\text{m}$. A solução do problema não homogêneo resolvido via Método das Diferenças Finitas Explícito foi obtida considerando uma placa com comprimento $L = 0.03\text{m}$ e uma malha computacional com $N = 31$ pontos no espaço, $\Delta x = L/(N_x - 1)\text{m}$, $\Delta t = 0,5 \text{ s}$, tempo final de simulação $t_f = 1000\text{s}$ e uma geração interna de energia uniforme (fonte) $g = 100.000\text{W}/\text{m}^3$. Além disso, foi considerado para ambos os casos um coeficiente de transferência de calor $h = 15\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ e $T_0 = 20 \text{ }^\circ\text{C}$.

A Figura 1 apresenta as superfícies solução obtidas para o problema homogêneo (Caso 1) e não homogêneo (Caso 2).

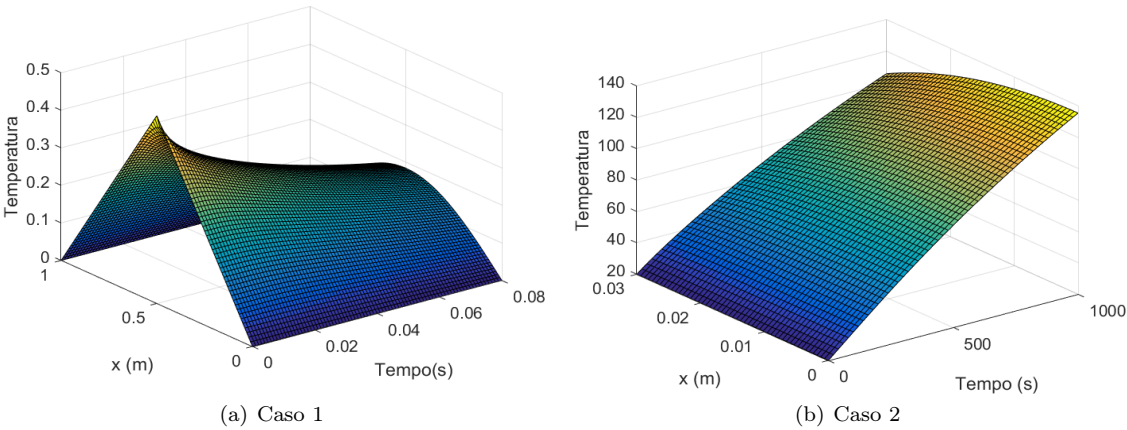


Figura 1: Superfícies Solução dos Problemas Homogêneo e Não Homogêneo. Fonte: O autor.

As Figuras 2 e 3 apresentam as cadeias de Markov simuladas e as densidades a posteriori marginais estimadas dos parâmetros de interesse nos casos 1 e 2. A Tabela 1 apresenta as estimativas obtidas para os parâmetros de interesse, para os casos 1 e 2, com a média estimada, o desvio padrão e também os intervalos obtidos com 95% de credibilidade.

Tabela 1: Resumo das distribuições a posteriori dos parâmetros.

| Casos | Parâmetro | Exato | Média | Desvio Padrão (DP) | Intervalo Credibilidade (IC) |
|--------|---------------|---------|-----------|--------------------|------------------------------|
| Caso 1 | α | 1,0 | 0,9958 | 0,0045 | [0,9868; 1,0046] |
| | σ_{e1} | 0,01 | 0,0101 | 0,0003 | [0,0094; 0,0108] |
| | w | 720.000 | 719.999,2 | 10,8935 | [719978,3; 720020,6] |
| Caso 2 | k | 0,6 | 0,5994 | 0,0005 | [0,5984; 0,6004] |
| | σ_{e2} | 0,01 | 0,0092 | 0,00008 | [0,0090; 0,0094] |

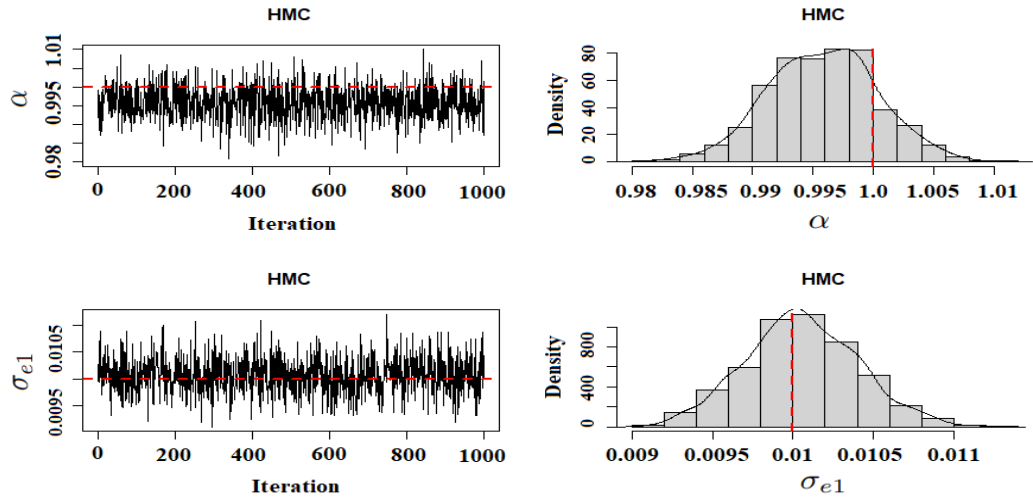


Figura 2: Cadeias de Markov e densidades marginais a posteriori para o problema homogêneo - Caso 1.
Fonte: O autor.

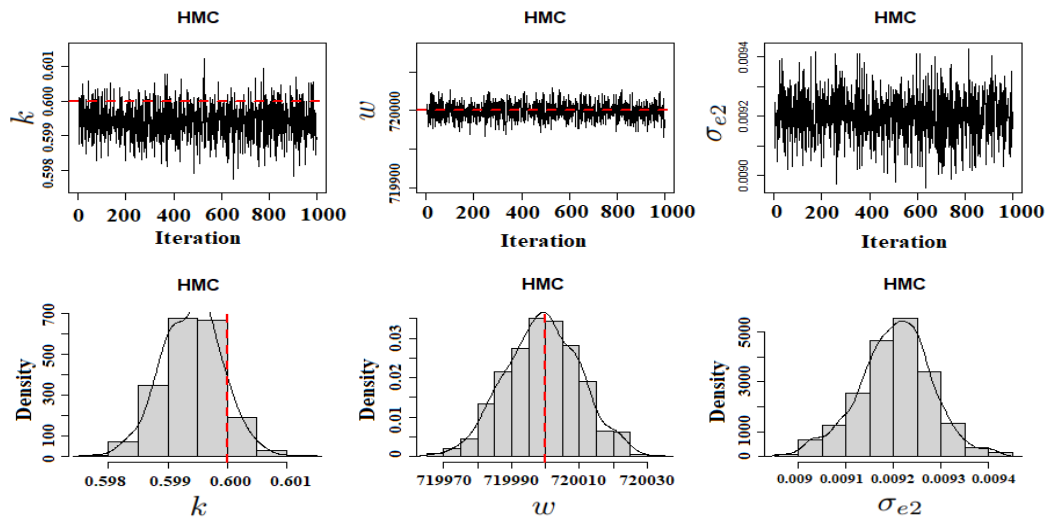


Figura 3: Cadeias de Markov e densidades marginais a posteriori para o problema não homogêneo - Caso 2. Fonte: O autor.

Como pode ser observado pelos resultados obtidos, o Método HMC, implementado utilizando a ferramenta STAN, apresentou resultados acurados, com erros relativos percentuais baixos, sendo o maior erro relativo obtido da ordem de 10^{-2} para σ_{e2} , resultando em estimativas dos parâmetros de interesse próximas dos respectivos valores exatos. Além disso, o tempo de uma execução do método foi baixo, em torno de 130 segundos, mostrando assim a eficiência computacional da ferramenta adotada. Além disso, o presente trabalho logrou êxito em demonstrar a utilização do STAN como ferramenta útil e eficaz para a resolução de problemas inversos, mostrando assim que a mesma tem

grande potencial de aplicação para diversos problemas de engenharia.

4 Conclusões

O presente trabalho teve como objetivo principal a utilização da ferramenta estatística STAN, que utiliza a abordagem Bayesiana, para a estimação de propriedades termofísicas de uma placa termicamente fina. Apresentou-se uma formulação do problema direto para o problema homogêneo e não homogêneo, cujas soluções foram obtidas empregando-se os Métodos de Separação de Variáveis e de Diferenças Finitas Explícito, respectivamente. O problema inverso foi formulado via Inferência Bayesiana onde foi utilizado o Método HMC implementado no STAN para resolver os problemas inversos de estimação de parâmetros associados aos problemas homogêneo e não homogêneo. Observou-se que a ferramenta empregada, nas condições adotadas neste trabalho, apresentou resultados adequados, conseguindo estimar acuradamente os parâmetros de interesse de cada caso abordado.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido pela FAPERJ, pela CAPES – Código de Financiamento 001 e pelo CNPq.

Referências

- [1] L. A. S. Abreu, H. R. B. Orlande, J. Kaipio, V. Kolehmainen, R. M. Cotta e J. N. N. Quaresma. “Identification of Contact Failures in Multilayered Composites with the Markov Chain Monte Carlo Method”. Em: **Journal of Heat Transfer** 136.10 (2014), pp. 101302.1–9. DOI: 10.1115/1.4027364.
- [2] D. C. S. Cuevas. “Estimativa de Parâmetros de Materiais Heterogêneos com o Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov”. Dissertação de mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, COOPE, UFRJ, 2015.
- [3] I. H. Kumlutas D.; Tavman. “A Numerical and Experimental Study on Thermal Conductivity of Particle Filled Polymer Composites”. Em: **Journal of Thermoplastic Composite Materials** 19 (2006), pp. 441–455. DOI: 10.1177/0892705706062203.
- [4] H. S. Migon, D. Gamerman e F. Louzada. **Statistical Inference - An Integrated Approach**. 2ª ed. Vol. 1. Boca Raton: FL: Chapman Hall, 2014, p. 367. ISBN: 978-1439878804.
- [5] M. N. Ozisik e H. R. B. Orlande. **Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications**. 1a. ed. New York: Taylor & Francis, 2000. DOI: 10.1201/9780203749784.
- [6] M. A. Tanner. **Tools for Statistical Inference. Methods for the Exploration of Posterior Distributions and Likelihood Functions**. New York: Springer Verlag, 1993. DOI: 10.1007/978-1-4612-4024-2.
- [7] J. S. Teixeira. **Códigos STAN - Problemas de Transferência de Calor**. Online. Acessado em 20/05/2025. <https://github.com/josyelly1/Codigos-STAN---Problemas-de-Transferencia-de-Calor/blob/main/Modelos%20STAN.pdf>. 2025.
- [8] J. S. Teixeira, L. T. Stutz, D. C. Knupp e A. J. Silva Neto. “A New Adaptive Approach of the Metropolis-Hastings Algorithm Applied to Structural Damage Identification Using Time Domain Data”. Em: **Applied Mathematical Modelling** 34 (2020), pp. 587–606. DOI: 10.1016/j.apm.2020.01.021.