

Funções de Base Radial: Análise Comparativa durante a Reconstrução de Parâmetros via Método Pseudoespectral de Chebyshev e Evolução Diferencial Melhorada

Vanda M. Luchesi¹, José Laércio Doricio², Milena A. L. Brandão³
 ICENP, Universidade Federal de Uberlândia, Ituiutaba, MG

Resumo. Este trabalho analisa a reconstrução do parâmetro de condutividade térmica, modelado por equações diferenciais parciais (EDPs), resolvidas numericamente pelo Método Pseudoespectral de Chebyshev (MPC) em conjunto com o método de Crank-Nicolson (CN). O MPC converte as EDPs em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), que, em seguida, é resolvido pelo método de Crank-Nicolson para o caso dependente do tempo. Na reconstrução do parâmetro, o Problema Inverso (PI) é otimizado por meio do método de Evolução Diferencial Melhorada (EDM), empregado para a minimização da função objetivo em que o parâmetro $K(x, y)$ é estimado em todo o domínio. Este estudo destaca a análise comparativa entre diversas soluções que envolvem as funções de base radial (FBR), utilizadas para a interpolação de dados multivariados dispersos durante a discretização das EDPs pelos métodos numéricos. Os resultados evidenciam a eficácia do EDM, combinado com o MPC, em encontrar soluções de alta qualidade para problemas complexos, além de demonstrar a importância da interpolação com FBRs na malha discretizada, o que reduz significativamente o tempo computacional.

Palavras-chave. funções de base radial, condutividade térmica, evolução diferencial melhorada, Método Pseudoespectral de chebychev

1 Introdução

Uma função $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ cujo valor depende apenas da magnitude de seu argumento é chamada de função radial. Por exemplo $g(x) = \phi(\|x\|) = \phi(r)$, onde $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ e r é o comprimento do vetor x . Isso significa que ϕ é constante para vetores do mesmo comprimento. Chamamos ϕ de função de base radial (FBR). A Tabela 1 mostra os tipos clássicos de funções radiais.

Tabela 1: Tipos clássicos de funções radiais. Fonte: [5]

Função de base radial	$\phi(r)$	fator	ordem
FBR Gaussiana	$e^{-(cr)^2}$	$c > 0$	0
FBR Spline Poliharmônico	$r^{2\alpha-1}$	$\alpha \in \mathbb{N}$	$m = \alpha$
FBR Spline Poliharmônico	$r^{2\alpha} \log r$	$\alpha \in \mathbb{N}$	$m = \alpha + 1$
FBR MultiQuadráticas	$\sqrt{r^2 + c^2}$	$c > 0$	1
FBR MultiQuadráticas inversas	$\frac{1}{\sqrt{r^2 + c^2}}$	$c > 0$	0
FBR Quadráticas inversas	$\frac{1}{r^2 + c^2}$	$c > 0$	0

¹vanda.luchesi@ufu.br

²jldoricio@ufu.br

³milenabrandao@ufu.br

As FBR são condicionalmente definidas positivas de acordo com a ordem m veja Tabela 1 (m refere-se à ordem de $\phi(x)$, veja [5]). Suponha que temos dados dispersos multivariados da forma (x_i, f_i) e queremos encontrar uma interpolação $s(x)$, $x \in \mathbb{R}^d$ satisfazendo $s(x_i) = f_i$, $i = 1, 2, \dots, n$. Para a interpolação $s(x)$, devemos ter

$$s(x, y) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \phi(\|x - x_i\|) + a_0 + a_1 x + a_2 y, \quad e \tag{1}$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i \phi(\|x_j - x_i\|) = f_j, \quad j = 1, 2, \dots, n \tag{2}$$

Na forma matricial, temos $\Phi \lambda = \mathbf{F}$, onde $\mathbf{F} = [f_1 \ f_2 \ \dots \ f_n \ 0 \ 0 \ 0]^T$, $\lambda = [\lambda_1 \ \lambda_2 \ \dots \ \lambda_n, a_0, a_1, a_2]^T$ e

$$\Phi := \begin{bmatrix} \phi(\|x_1 - x_1\|) & \phi(\|x_2 - x_1\|) & \dots & \phi(\|x_n - x_1\|) & 1 & x & y \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi(\|x_1 - x_n\|) & \phi(\|x_2 - x_n\|) & \dots & \phi(\|x_n - x_n\|) & 1 & x & y \\ 1 & \dots & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & \dots & \dots & x_n & 0 & 0 & 0 \\ y_1 & \dots & \dots & y_n & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{(n+3) \times (n+3)} \tag{3}$$

De acordo com [8], existe a seguinte relação entre a precisão da interpolação e o número de condição espectral da matriz Φ :

$$cond \Phi = \frac{\sigma_{min}}{\sigma_{max}} \tag{4}$$

onde σ representa os valores singulares, com os índices max e min indicando o valor máximo e mínimo, respectivamente, ou seja, $\Phi v_i = \sigma_i u_i$, com $\{v_i\}$ base ortonormal do espaço linha e $\{u_i\}$ base ortonormal do espaço coluna do \mathbb{R}^n . Neste trabalho, para melhorar a precisão tomamos como fator da interpolação $c = 1$, veja Tabela 1.

Para analisar as diferentes interpolações na reconstrução de parâmetros modelaremos a transferência de calor como um problema de condução transiente bidimensional, com tensor de condutividade variável nas direções x e y , visando o estudo de materiais isotrópicos e anisotrópicos. Para isso consideraremos a seguinte EDP que descreve o problema de transporte no domínio $\Omega \times (0, t_f]$, $t_f > 0$, com $\Omega = (0, l_1) \times (0, l_2) \subseteq \mathbb{R}^2$.

$$C(x, y) \frac{\partial T}{\partial t}(x, y, t) = \nabla \cdot [K(x, y) \nabla T(x, y, t)] + G(x, y, t) \tag{5}$$

com tensor condutividade térmica dado pela matriz $K(x, y) = [k_{ij}(x, y)]_{2 \times 2}$. As condições de contorno são do tipo mistas, descritas como

$$-k(0, y) \frac{\partial T}{\partial x}(0, y, t) + h_1(y)(T(0, y, t) - f_1(y, t)) = 0 \quad \text{para } y \in (0, l_2), t \in (0, \bar{t}), \tag{6}$$

$$k(l_1, y) \frac{\partial T}{\partial x}(l_1, y, t) + h_2(y)(T(l_1, y, t) - f_2(y, t)) = 0 \quad \text{para } y \in (0, l_2), t \in (0, \bar{t}), \tag{7}$$

$$-k(x, 0) \frac{\partial T}{\partial y}(x, 0, t) + h_3(x)(T(x, 0, t) - f_3(x, t)) = 0 \quad \text{para } x \in (0, l_1), t \in (0, \bar{t}), \tag{8}$$

$$k(x, l_2) \frac{\partial T}{\partial y}(x, l_2, t) + h_4(x)(T(x, l_2, t) - f_4(x, t)) = 0 \quad \text{para } x \in (0, l_1), t \in (0, \bar{t}), \tag{9}$$

$$T(x, y, 0) = T_0 \quad \text{na região } \Omega. \tag{10}$$

Neste modelo, $T(x, y, t)$ representa a temperatura, $C(x, y) = C > 0$ é a capacidade térmica constante, h_i (para $i = 1, 2, 3, 4$) são as funções de transferência de calor, e f_i (para $i = 1, 2, 3, 4$) representam as funções de fluxo de calor na fronteira. Para resolver este problema, a EDP da Eq. (5) é transformada em um sistema de EDOs dependentes do tempo por meio do método CPM. No problema resultante, aplicamos o método de Crank-Nicolson (CN) devido à sua simplicidade (baseado na regra do trapézio), precisão de segunda ordem e, especialmente, por sua estabilidade. Para mais detalhes, consulte [1] e [2].

1.1 Método pseudoespectral de Chebyshev (MPC)

Para aplicar o MPC, tomamos no domínio $\Gamma = (0, l_1) \times (0, l_2) \subseteq \mathbb{R}^2$ uma malha composta por $(n + 1) \times (n + 1)$ pontos que será transformada em $(n + 1)$ Chebyshev Gauss-Lobatto x_i e y_i nas direções horizontal e vertical, respectivamente. Para cada direção, seja \hat{x}_i um ponto de colocação otimizada, denominado ponto Chebyshev Gauss-Lobatto:

$$\hat{x}_i = \frac{1}{2} [1 - \cos(i\pi/n)], \quad i = 0, 1, \dots, n. \tag{11}$$

Desta forma, temos pontos não igualmente afastados e vamos associá-los aos polinômios de Chebyshev $\phi(\hat{x}_i)$. Nos métodos espectrais aproximamos a função desejada, $u(x)$ (unidimensional), pela série de Chebyshev truncada. Para o método pseudo-espectral tomamos esses valores nos pontos de colocação \hat{x}_i . Assim

$$u_N(\hat{x}_i) \approx \sum_{i=0}^N c_i \phi(\hat{x}_i) \quad \text{com } c_i = \frac{\langle u, \phi_i \rangle_w}{\langle \phi_i, \phi_i \rangle_w} \tag{12}$$

onde w uma função peso que produza a ortogonalidade do polinômio de Chebyshev em relação ao produto interno. Para a diferenciação de Chebyshev, por exemplo, seja p um polinômio interpolador, dado um conjunto de valores $u(\hat{x}_j) = p(\hat{x}_j)$, $j = 1, \dots, N$, de uma função unidimensional u , a derivada discreta em relação a x no ponto de colocação \hat{x}_i pode ser aproximada por $u'(\hat{x}_i) \approx p'(\hat{x}_i)$. Como esta operação é linear podemos escrever $u'(\hat{x}_i) = e_j^T D u^T$, onde e_j é o $(j + 1)$ -ésimo vetor canônico de ordem $N + 1$. A matriz $D = [d_{ij}]$, com $0 \leq i, j \leq N$, é chamada de matriz diferenciação. Seja D a matriz de diferenciação de Chebyshev $(n + 1) \times (n + 1)$ podemos construir a seguinte decomposição (por linha ou por coluna):

$$D = \begin{bmatrix} r_0^T \\ r_1^T \\ \vdots \\ r_n^T \end{bmatrix} = [d_0, d_1, \dots, d_n], \quad r_i, d_i \in \mathbb{R}^{n+1}, \quad i = 0, \dots, n. \tag{13}$$

Aplicando o MPC no termo que possui a diferencial em relação a variável x da parte principal da EDP da Eq. (5) obtemos

$$\mathbf{T}_j^x := \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x_0, y_j) \frac{\partial T(x_0, y_j, t)}{\partial x} \right) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x_n, y_j) \frac{\partial T(x_n, y_j, t)}{\partial x} \right) \end{bmatrix} \approx D(\mathbf{K}_j^x \dot{\mathbf{T}}_j), \quad j = 0, \dots, n, \tag{14}$$

onde \mathbf{K}_j^x é a matriz diagonal $\mathbf{K}_j^x = \text{diag}(k(x_0, y_j), k(x_1, y_j), \dots, k(x_n, y_j))$, $j = 0, 1, \dots, n$.

Usando Eq. (14) e $\dot{\mathbf{T}}_j \approx D\mathbf{T}_j$, obtemos

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x_i, y_j) \frac{\partial T(x_i, y_j, t)}{\partial x} \right) \approx r_i^T (\mathbf{K}_j^x D\mathbf{T}_j), \quad i = 1, \dots, n-1, \quad j = 0, \dots, n. \quad (15)$$

Aplicando o MCP nas Eqs. (6)–(9), para os pontos (x_0, y_j) , $j = 0, \dots, n$, e para (x_n, y_j) , $j = 0, \dots, n$. Com aproximação similar dada na Eq. (14) obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_j^x &\approx \sum_{i=0}^n d_i k(x_i, y_j) \frac{\partial T(x_i, y_j, t)}{\partial x} & (16) \\ &= d_0 k(x_0, y_j) \frac{\partial T(x_0, y_j, t)}{\partial x} + \sum_{i=1}^{n-1} d_i k(x_i, y_j) \frac{\partial T(x_i, y_j, t)}{\partial x} + d_n k_{11}(x_n, y_j) \frac{\partial T(x_n, y_j, t)}{\partial x} \\ &= [h_1(y_j) d_0 e_1^T + D_1 \tilde{\mathbf{K}}_j^x D_2 - h_2(y_j) d_n e_{n+1}^T] \mathbf{T}_j - d_0 h_1(y_j) f_1(y_j, t) + d_n h_2(y_j) f_2(y_j, t) \\ &\quad \doteq \mathbf{A}_j \mathbf{T}_j + \mathbf{b}_j, & (17) \end{aligned}$$

onde

$$\mathbf{A}_j = h_1(y_j) d_0 e_1^T + D_1 \tilde{\mathbf{K}}_j^x D_2 - h_2(y_j) d_n e_{n+1}^T \quad \text{e} \quad (18)$$

$$\mathbf{b}_j = -d_0 h_1(y_j) f_1(y_j, t) + d_n h_2(y_j) f_2(y_j, t), \quad (19)$$

$$D_1 = [d_1, \dots, d_{n-1}], \quad D_2 = \begin{bmatrix} r_1^T \\ \vdots \\ r_{n-1}^T \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$\tilde{\mathbf{K}}_j^x = \text{diag}(k(x_1, y_j), \dots, k(x_{n-1}, y_j)) \quad (21)$$

Analogamente, aplicando o MPC no termo que possui a diferencial em relação a variável y da parte principal da EDP da Eq. (5) obtemos a diferencial em relação a variável y .

2 Evolução Diferencial Melhorada

O Evolução Diferencial Melhorada (EDM) utiliza um algoritmo de Evolução Diferencial (ED) para criar uma população inicial de indivíduos, amostrada aleatoriamente na região viável com distribuição uniforme [6]. Após ordenação crescente dos valores da função objetivo, a população é dividida em conjuntos, nos quais o ED é executado de forma independente. Na etapa de evolução, as subpopulações são embaralhadas e redistribuídas, assegurando a troca de informações [4]. A implementação paralela do EDM ocorre da seguinte forma: (1) o processador mestre gera aleatoriamente a população inicial, dividindo-a em k subconjuntos, distribuídos entre até k processadores; (2) cada subconjunto executa o ED sequencialmente até alcançar um critério de parada; (3) as subpopulações são reunidas, embaralhadas e redistribuídas em novas subpopulações. O fluxograma da implementação está na Figura 1, veja [3] e [7] para mais detalhes. No processo de reconstrução do parâmetro $K(x, y)$ o EDM foi utilizado no processo de minimização dado por:

$$\text{Min } E = \|T(x, y, tf) - \tilde{T}(x, y, tf)\|, \quad \text{s.a } K_{min} < K(x, y) < K_{max}, \quad (22)$$

onde $K(x, y)$ foi buscado em todo domínio Ω discretizado $h \times h$, com $h = 9$, no entanto para otimizar o processo de busca é feita uma malha mais grossa com $h = 4$ e posteriormente interpolada para a malha mais fina com $h = 9$ usando FBR para calcular o valor de $T(x, y, t)$ aproximado usando os métodos de discretização MCP e CN. No processo de eqs. 22 são conhecidos o valor inicial de

$T(x, y, 0)$ e o valor final de $T(x, y, t_f)$ que, neste caso, é dado por uma solução analítica. Os dados na construção da solução são:

$$T(x, y, t) = e^{-t/2}(\text{sen}(xy) + \text{cos}(xy)), \tag{23}$$

usando nas equações (5) a (10) os valores: $k_{ii}(x, y) = 20 \text{sen}(xy) + 20 \text{cos}(xy)$, $k_{12}(x, y) = 0 = k_{21}(x, y)$, $h_1(y) = 3 \text{sen}(y)$, $h_2(y) = 3 \text{cos}(y)$, $h_3(x) = 3 \text{sen}(x)$, $h_4(x) = 3 \text{cos}(x)$, $f_1(y, t) = -20ye^{-t/2} + 3 \text{sen}(y)e^{-t/2}$, $f_2(y, t) = 20ye^{-t/2}(\text{cos}^2 y - \text{sen}^2 y) + 3 \text{cos}(y)e^{-t/2}(\text{sen}(y) + \text{cos}(y))$, $f_3(x, t) = -20xe^{-t/2} + 3 \text{sen}(x)e^{-t/2}$, $f_4(x, t) = 20xe^{-t/2}(\text{cos}^2 x - \text{sen}^2 x) + 3 \text{cos}(x)e^{-t/2}(\text{sen}(x) + \text{cos}(x))$, com o termo fonte descrito por

$$G(x,y,t) = e^{-\frac{t}{2}} \left\{ -\frac{1}{2} [\text{sen}(xy) - \text{cos}(xy)] \right\} + 80 \left\{ y^2 \text{cos}(xy) \text{sen}(xy) + x^2 \text{cos}(xy) \text{sen}(xy) \right\} \tag{24}$$

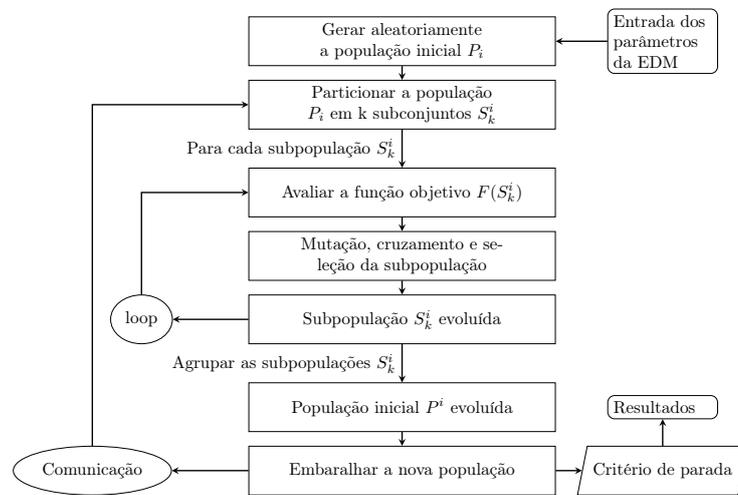


Figura 1: Fluxograma do Método de Evolução Diferencial Melhorada. Fonte: dos autores.

3 Resultados e Considerações Finais

Neste trabalho, realizamos uma análise comparativa dos resultados da reconstrução do tensor de condutividade, alternando as funções de base radial no processo de interpolação de dados multivariados dispersos. Nesse contexto, o EDM apresentou excelente desempenho, com um tempo computacional médio de convergência de 8,4 minutos. Vale ressaltar que a execução do mesmo código, sem o procedimento de interpolação via FBR, resulta em um tempo computacional significativamente maior, de aproximadamente 55,34 horas.

Na Figura 2, são apresentados os gráficos da temperatura e da reconstrução do parâmetro de condutividade térmica utilizando a interpolação com FBR do tipo Gaussiana. Conforme indicado na Tabela 2, os erros de interpolação via FBR estão na ordem de 10^{-2} ou inferiores, sendo que a FBR Gaussiana se mostrou a mais adequada, com um erro absoluto aproximado de $3,9 \times 10^{-3}$ (ou 5×10^{-3} na norma infinita).

Para a análise comparativa das soluções envolvendo diferentes FBRs, mostramos na Figura 3 os erros da modelagem da temperatura $T(x, y)$ (analítico vs. numérico) e, na Figura 4, os erros da reconstrução do parâmetro $K(x, y)$ (analítico vs. numérico).

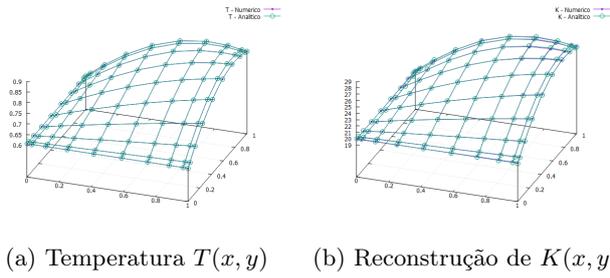


Figura 2: Gráficos da Temperatura e da condutividade térmica para FBR Gaussiana. Fonte: dos autores.

Tabela 2: Normas do erro absoluto entre K analítico e K numérico.

Função de Base Radial	Norma de Frobenius	Norma Infinita
FBR Gaussiana	0,00389398	0,00497074
FBR Spline poliharmônica logarítmica	0,00515004	0,00741237
FBR Multiquadrática inversa	0,00704072	0,00960926
FBR Quadrática inversa	0,00805675	0,010718
FBR Multiquadrática	0,00618249	0,00902886
FBR Spline poliharmônica	0,0131798	0,0185124

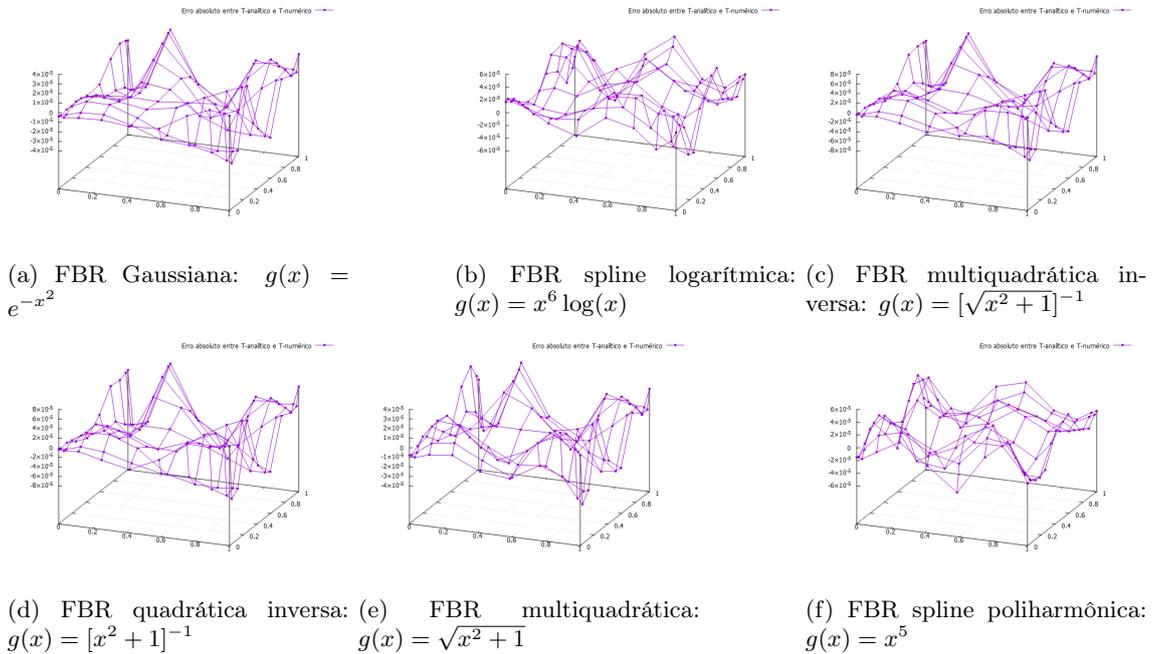


Figura 3: Erro da modelagem da Temperatura $T(x, y)$ analítico vs numérico. Fonte: dos autores.

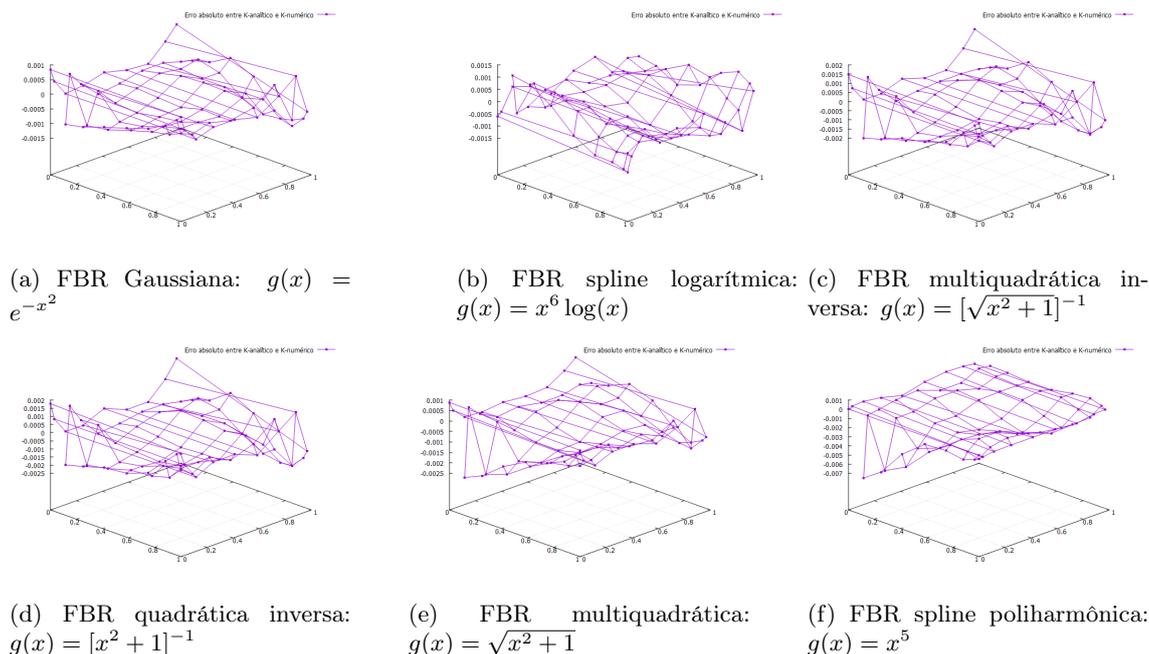


Figura 4: Erro da reconstrução do parâmetro $K(x,y)$ analítico vs numérico. Fonte: dos autores.

Referências

- [1] E. Boos, F. S. V. Bazán e V. M. Luchesi. “Thermal conductivity reconstruction method with application in a face milling operation”. Em: **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow** 33.8 (2023).
- [2] E. Boos, V. M. Luchesi e F. S. V. Bazán. “Chebyshev pseudospectral method in the reconstruction of orthotropic conductivity”. Em: **Inverse Problems in Science and Engineering** 29.5 (2021), pp. 681–711.
- [3] M. A. L. Brandão, J. L. Dorício e S. F. P. Saramago. **Otimização Avançada: Evolução Diferencial Melhorada em Paralelo**. Vol. 99. Notas em Matemática Aplicada. São Carlos: SBMAC, 2024.
- [4] Q.A. Duan, V.k. Gupta e S. Sorooshian. “A parallel differential evolution algorithm”. Em: **Journal of Optimization Theory and Applications** 76.3 (1993).
- [5] M.J. Powell. **Five lectures on radial basis functions**. Rel. técn. Informatics e Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 2005.
- [6] K.V. Price, R.M. Storn e J.A. Lampinen. **Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization**. Springer, 2005.
- [7] S.F.P. Saramago, J. L. Dorício e M. A. L. Brandão. “Optimum design of 3r robot manipulador by using improved differential evolution implemented in parallel computation”. Em: **Brazilian Electronic Journal of Mathematics** 1.2 (2020), pp. 83–103.
- [8] R. Schaback. “Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation”. Em: **Advances in Computational Mathematics** 3 (1995), pp. 251–264.