

ESTIMATIVA DE PROPRIEDADES TÉRMICAS DE MATERIAIS POLIMÉRICOS COM O MÉTODO DO RECOZIMENTO SIMULADO

Francisco J. C. P. Soeiro – soeiro@uerj.br

Departamento de Engenharia Mecânica, Faculdade de Engenharia, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, CEP 20550-013, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Gil de Carvalho – gilde@iprj.uerj.br

Antônio José da Silva Neto * – ajsneto@iprj.uerj.br

Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, CP 97282, CEP 28601-970, Nova Friburgo, RJ, Brasil.

***Resumo.** Tem sido observada uma demanda crescente pelo desenvolvimento de novos materiais e conseqüentemente a caracterização térmica destes. Neste trabalho é apresentada a solução de um problema inverso com o método de Levenberg-Marquardt(LM), e com o método de recozimento simulado (SA – simulated annealing), para a estimativa simultânea da condutividade térmica e do calor específico de novos materiais poliméricos. São utilizados dados experimentais reais obtidos com a amostra de um polímero que contém lignina, um subproduto do bagaço de cana, em sua composição.*

***Palavras – chave :** Problemas inversos, Caracterização Térmica, Levenberg-Marquardt, Recozimento Simulado.*

1. INTRODUÇÃO

A solução de problemas inversos em transferência de calor por condução possui diversas aplicações de interesse em engenharia. O problema clássico nesta área é aquele onde são estimadas condições de contorno, ou seja, são obtidas estimativas, tanto para o fluxo de calor quanto para a própria temperatura. Este problema vem sendo tratado já há trinta anos, mas ainda tem atraído a atenção de muitos pesquisadores (Al-Khalidy, 1998, Ji e Jang, 1998, Frankel e Keyhani, 1997, Zongrui e Zhongwu, 1994, Vogel et al., 1993). O problema inverso de estimativa de condições de contorno é conhecido pela sigla IHCP (Inverse Heat Conduction Problem), ou então IBHCP (Inverse Boundary Heat Conduction Problem).

A estimativa de condições iniciais (Muniz et al., 1999, Silva Neto e Özisik, 1994), e de fontes térmicas com dependência no espaço e no tempo (Silva Neto e Su, 1999, Su e Silva Neto, 1999, Silva Neto e Özisik, 1993, 1994a, Orlande e Özisik, 1993, Al-Najem, 1993, Borukhov e Kolesnikov, 1988) tem também sido investigada intensamente. O primeiro é o conhecido *backward heat transfer problem* e o segundo é o IHGP (Inverse Heat Generation Problem).

* Autor para correspondência.

Complementando a classe de problemas inversos em condução de calor encontra-se então a estimativa de propriedades térmicas. Artyukhin(1982) estimou a dependência da condutividade térmica com a temperatura considerando uma expansão em splines cúbicos. Ved et al.(1992) estimou esta dependência da condutividade térmica para materiais cerâmicos. Jurkowski et al.(1997) estimaram a condutividade térmica de termoplásticos com base na comparação entre temperaturas medidas e calculadas no processo de resfriamento do polímero.

Vozár e Srámková(1997) e Griesinger et al.(1997) usaram métodos baseados em um aquecimento em degrau (*step heating*) para a estimativa da difusividade térmica. Shai et al. (1993) desenvolveram um método baseado na sobreposição de fontes térmicas que leva à determinação da difusividade térmica usando apenas medidas de tempo.

Diversos trabalhos têm sido realizados visando a determinação simultânea de duas ou mais propriedades térmicas usando medidas transientes de temperatura. Flach e Özisik (1989), Artyukhin e Nenarokomov (1988) e Artyukhin(1993) estimaram simultaneamente a condutividade térmica e o calor específico. Guimarães et al.(1995) estimaram a condutividade e a difusividade térmica, e Lima e Silva et al.(1998) estimaram estas propriedades de materiais não-metálicos usando apenas um sensor de temperatura. Beck e Al-Araji (1974) estimaram a condutividade térmica, o calor específico, a difusividade e a condutância de contato térmico com resultados obtidos de um único experimento.

Carvalho et al.(1996) determinaram experimentalmente a condutividade térmica de polímeros usando o método do fio quente. Usando os mesmos dados experimentais destes pesquisadores em uma abordagem de problemas inversos Silva Neto e Carvalho(1999) estimaram simultaneamente a condutividade térmica e o calor específico de um novo polímero que contém lignina, um subproduto do bagaço de cana, em sua composição (Carvalho e Silva Neto, 1999). Estes autores usaram o método de Levenberg-Marquardt, que é equivalente ao uso do funcional de Tikhonov com o termo de regularização quadrático (Silva Neto e Moura Neto, 1999). O espaço de solução do problema inverso não é convexo e apresenta muitos mínimos locais. Métodos tradicionais de programação matemática baseados no cálculo de gradientes da função a ser minimizada, como o de Levenberg-Marquardt, garantem apenas a convergência para o mínimo local mais próximo da estimativa inicial.

Buscou-se então um algoritmo de otimização global denominado recozimento simulado (*simulated annealing*) que é um método estocástico baseado em idéias da mecânica estatística e na analogia com o processo de recozimento de um material (Bueno e Soeiro, 1998).

Neste trabalho são apresentados de forma sucinta o método de Levenberg-Marquardt e o método de recozimento simulado e a aplicação destes na estimativa da condutividade térmica e do calor específico de um material polimérico a partir de dados experimentais obtidos com o método do fio quente.

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA DIRETO

Considere a situação representada na Fig. 1 onde uma resistência elétrica linear é inserida no centro de uma amostra para a qual se deseja determinar as propriedades térmicas.

A modelagem matemática do problema de transferência de calor por condução em uma amostra cilíndrica de raio R , com uma fonte linear de calor no centro, trocando calor com o ambiente que a envolve, na temperatura T_{amb} , é dada por

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + g(t) \delta(r) = \rho c_p \frac{\partial T(r,t)}{\partial t} \quad \text{em } 0 \leq r \leq R, \text{ para } t > 0 \quad (1a)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} = h(T - T_{amb}) \quad \text{em } r = R, \text{ para } t > 0 \quad (1b)$$

$$T(r, 0) = T_{\text{amb}} \quad \text{para } t = 0 \quad (1c)$$

onde k é a condutividade térmica, $g(t)$ é a densidade volumétrica de potência, ρ é a massa específica, c_p é o calor específico, h é o coeficiente de troca térmica por convecção e $\delta(r)$ é o delta de Dirac indicando que a fonte térmica está posicionada em $r = 0$.

Observe que está implícita nesta formulação a hipótese de que a amostra é longa o bastante de forma que a transferência de calor é considerada unidimensional, na direção radial.

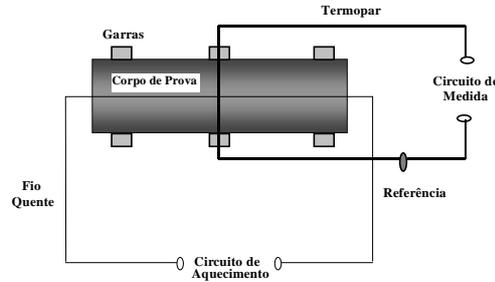


Figura 1 – Arranjo experimental da técnica padrão do Fio Quente

Quando a geometria, as propriedades materiais, as condições de contorno, a condição inicial e o termo fonte são conhecidos, o problema (1) pode ser resolvido fornecendo o conhecimento da distribuição da temperatura $T(r,t)$ para qualquer posição, r , e tempo t . Este problema é denominado então de problema direto.

Quando alguma das características descritas no parágrafo anterior, ou uma combinação das mesmas, é desconhecida, mas informações adicionais como por exemplo a distribuição transiente de temperaturas em algum ponto do meio, estão disponíveis, pode-se tentar estimar as grandezas desconhecidas. Este problema é denominado então de problema inverso.

Nos algoritmos considerados neste trabalho para a solução do problema inverso é usada a solução do problema direto empregando as estimativas para as incógnitas obtidas a cada iteração do procedimento iterativo. Para a solução do problema direto (1) foi usada, portanto, uma aproximação por diferenças finitas.

3. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA INVERSO

Neste trabalho é considerado o problema inverso de estimativa do vetor de incógnitas

$$\vec{Z} = \{k, c_p\}^T \quad (2)$$

usando o conhecimento da distribuição transiente de temperatura em algum ponto do meio.

Beck(1988) classifica os problemas inversos em dois grupos: (i) estimativa de parâmetros e (ii) estimativa de funções. O problema inverso aqui considerado consiste, portanto, em uma estimativa de parâmetros. Conforme apresentado na Tabela 1, Silva Neto e Moura Neto(1999) optaram por uma classificação que leva em consideração os objetos matemáticos envolvidos. Neste caso o problema sob análise é um problema inverso do Tipo II, uma vez que o modelo é dado por uma equação diferencial parcial e as grandezas a serem determinadas são de dimensão finita.

Devido ao provável excesso de dados experimentais com relação ao número de incógnitas, o problema inverso aqui tratado é resolvido como um problema de otimização de dimensão finita, onde é minimizado o funcional dado pela soma dos resíduos quadrados,

$$Q(\vec{Z}) = \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^L [T_{calc}(r_m, t_l) - T_{med}(r_m, t_l)]^2 \quad \text{ou} \quad Q = \sum_{i=1}^I (T_i - Y_i)^2 = \vec{F}^T \vec{F} \quad (3)$$

onde M é o número de sensores de temperatura utilizados, L é o número de medidas experimentais efetuadas por cada sensor e T_i e Y_i representam em uma notação compacta, respectivamente, a temperatura calculada e a temperatura medida para um mesmo sensor, no mesmo instante de tempo, com $i = 1, 2, \dots, I$ onde $I = M \times L$, e deve ser observado ainda que $F_i = T_i - Y_i$.

Tabela 1 – Classificação de Problemas Inversos

Dimensão do modelo	Dimensão da grandeza a ser estimada	
	Finita (constante)	Infinita (função)
Finita ¹	Tipo I	não se aplica
Infinita ²	Tipo II	Tipo III

¹ Por exemplo: sistema de equações algébricas.

² Por exemplo: equação diferencial parcial ou equação integro-diferencial.

4. SOLUÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

Silva Neto e Carvalho (1999) usaram o método de Levenberg-Marquardt (LM) para resolver o problema inverso descrito na seção anterior. Foi observado que este método é extremamente eficiente do ponto de vista computacional, mas apesar do uso do fator de amortecimento (parâmetro de regularização) existe uma ampla região de estimativas iniciais para a qual a convergência do método é extremamente dificultada. Além disso, foi observada a possibilidade de ocorrência de mínimos locais. Por este motivo buscou-se um algoritmo de otimização global, o método do recozimento simulado (SA – simulated annealing). Porém, este método apesar de garantir a convergência para o mínimo global a partir de qualquer estimativa inicial, apresenta um baixo desempenho computacional. Delineou-se então uma estratégia em que os dois métodos, LM e SA, são combinados de forma a aproveitar as melhores características de cada um deles.

4.1 Método de Levenberg-Marquardt

Este método é equivalente ao uso do funcional de Tikhonov com o termo de regularização quadrático (Silva Neto e Moura Neto, 1999), ou seja, a partir da Eq. (3) escreve-se

$$Q(\vec{Z}) = \vec{F}^T \vec{F} + \alpha \|\vec{Z}\|^2 \quad (4)$$

onde α é o parâmetro de regularização.

O ponto de mínimo satisfaz a equação de ponto crítico, i.e. $\partial Q / \partial \vec{Z} = 0$. Para resolver este sistema de equações é feita uma expansão de Taylor levando então a uma formulação equivalente àquela obtida com o método de Levenberg-Marquardt (Silva Neto e Carvalho, 1999)

$$(J^T J + \alpha I) \Delta \vec{Z} = -J^T \vec{F} \quad (5)$$

onde I é a matriz identidade, $\Delta \vec{Z}$ é a correção do vetor de incógnitas, e J é a matriz Jacobiana com os elementos

$$J_{ps} = \partial T_p / \partial Z_s, \quad p = 1, 2, \dots, I \quad e \quad s = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

onde N é o número total de incógnitas. No problema inverso considerado neste trabalho tem-se $N = 2$.

A Eq.(5) é escrita na forma a ser usada em um procedimento iterativo,

$$\Delta \vec{Z}^n = - (J^{nT} J^n + \alpha^n I)^{-1} J^{nT} \vec{F}^n \quad (7)$$

onde n representa o contador de iterações e uma nova estimativa para o vetor de incógnitas é calculada usando

$$\vec{Z}^{n+1} = \vec{Z}^n + \Delta \vec{Z}^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8)$$

onde \vec{Z}^0 é uma estimativa inicial.

O procedimento iterativo descrito pelas Eqs. (7) e (8) é interrompido quando um critério de convergência definido a priori é satisfeito, como por exemplo

$$\left| \Delta Z_s^n / Z_s^n \right| < \varepsilon, \quad s = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

onde ε é um número pequeno, e. g. 10^{-5} .

4.2 Método do Recozimento Simulado

O método do recozimento simulado (SA) se baseia em princípios da mecânica estatística. Consideremos os átomos de um metal em estado de fusão a uma elevada temperatura de equilíbrio. A probabilidade de existência de uma configuração após uma variação de energia (ΔE) do sistema, numa certa temperatura de equilíbrio T, é dada pela expressão

$$p(\Delta E) = \exp(-\Delta E/k_B T) \quad (10)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. Uma questão fundamental na mecânica estatística é determinar o que acontece com o sistema no limite inferior de temperatura. Se, por exemplo, os materiais permanecem fluidos ou sólidos e, no caso de se solidificarem, se formam um sólido cristalino ou não. Isto está relacionado com o nível de energia interna do material. No entanto, baixa temperatura não significa que baixos níveis de energia serão obtidos. Se a temperatura inferior de um metal fundido for obtida através de cuidadoso recozimento, ou seja de lento resfriamento, obtém-se um cristal puro com um nível baixo de energia e conseqüentemente baixo nível de tensões internas. Caso isso não tenha ocorrido (resfriamento mais rápido), o cristal obtido terá um nível mais alto de energia (material temperado) o que produzirá propriedades mecânicas diferentes no material. Esta é a idéia que está por trás da proposta de Kirkpatrick et al. (1983) em utilizar a simulação do processo de recozimento de um material em otimização. A função objetivo Q de um problema de otimização (função a ser minimizada) será associada ao nível de energia de um sistema qualquer. Para um valor alto do parâmetro T, que é correspondente à temperatura no recozimento real, diversas variações randômicas das variáveis do problema (variáveis de projeto) são consideradas e o valor da função objetivo relacionada a cada variação é calculado. Se uma variação resulta num valor mais baixo da função objetivo, é imediatamente aceita. Se isto não ocorrer, ou seja, o valor da função objetivo aumentar, então a probabilidade que esta configuração seja aceita é dada pela

Eq. (10). Nesta expressão a constante de Boltzmann k_B torna-se um fator de escala que normalmente é igualado à unidade. Note-se que esta probabilidade é maior a altas temperaturas, ou seja, no estágio inicial da simulação onde a aceitação de níveis mais altos de energia pode facilitar a obtenção de uma configuração final com um nível mais baixo de energia. Este é o mecanismo que possibilita a fuga dos mínimos locais. Um número finito de variações randômicas são consideradas numa determinada temperatura, constituindo um ciclo de avaliações no processo de otimização. A temperatura é então diminuída de acordo com um esquema de "resfriamento" preestabelecido até o valor final especificado, conforme a expressão abaixo.

$$T^{n+1} = r_t \cdot T^n \quad (11)$$

onde o índice n representa as diversas "temperaturas" do processo e r_t é a taxa de "resfriamento" que estabelece o esquema de recozimento desejado. Em cada temperatura o procedimento descrito acima é repetido. O fluxograma do algoritmo básico do recozimento simulado, apresentado na Figura 2, foi elaborado por Corana et al.(1987) e implementado por Goffe et al.(1992).



Figura 2 - Fluxograma do método do Recozimento Simulado

4.3 Combinação dos métodos LM e SA

Os métodos baseados em programação matemática normalmente apresentam uma boa taxa de convergência. Têm a desvantagem de convergirem para o mínimo mais próximo do ponto de partida. São por isso denominados de métodos de otimização local. Já os métodos estocásticos têm a vantagem de independermos do ponto de partida para convergirem para o mínimo global. No entanto, isto normalmente é obtido à custa de um enorme esforço computacional. No presente trabalho procurou-se aproveitar as vantagens dos dois métodos de modo a se ter convergência para o mínimo global com um menor esforço computacional.

Observando-se o comportamento do método verifica-se que após alguns poucos ciclos o melhor ponto obtido já está próximo do mínimo global. Pode-se, assim, abreviar o processo, utilizando o recozimento simulado (SA) por apenas alguns ciclos e, então, completar com o Levenberg-Marquardt (LM) até a convergência. Caso não convirja, prossegue-se com o SA até um ponto suficientemente próximo para o LM funcionar. Este procedimento produziu resultados satisfatórios como será mostrado no item a seguir.

5. RESULTADOS

Um volume significativo de dados experimentais já foi obtido com o método do fio quente para novos materiais poliméricos e compósitos. Usando a metodologia de problemas inversos descrita neste trabalho foram obtidas as seguintes estimativas para uma amostra de material polimérico com 25 % em massa de lignina, $k = 0,07319 \pm 0,00006 \text{ W / m } ^\circ\text{C}$ e $c_p = 1563 \pm 3 \text{ J / kg } ^\circ\text{C}$, onde os intervalos de confiança foram calculados considerando 99% de probabilidade que o valor exato esteja entre estes limites.

Inicialmente, utilizou-se apenas o método LM. Para diversos pares de estimativa inicial o resultado acima foi obtido. Como exemplo, considere-se o par de estimativas $\vec{Z}^0 = (k^0, c_p^0) = (0,05; 1000)$. Os valores obtidos em cada iteração bem como o valor da função objetivo Q são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 : Caso 1 $\vec{Z}^0 = (0,05; 1000)$ – LM

Iteração	k (W/m °C)	c (J/kg °C)	Q (°C ²)
0	0,05	1000,0	4285,75
1	0,06584	1361,6	262,53
2	0,07245	1537,7	2,6314
3	0,07319	1563,0	0,1179
4	0,07319	1563,0	0,1179

Se partirmos agora do ponto $\vec{Z}^0 = (0,005; 3500)$ verifica-se que há convergência para um outro ponto, provavelmente um mínimo local, como mostrado na Tabela 3.

Tabela 3 : Caso 2 $\vec{Z}^0 = (0,005; 3500)$ – LM

Iteração	k (W/m °C)	c (J/kg °C)	Q (°C ²)
0	0,0050	3500,0	42124,58
1	0,0106	5602,83	5461,03
2	0,0224	6838,62	264,75
3	0,0418	4629,64	17,53
4	0,0418	4629,64	17,53

O caso acima foi resolvido utilizando o recozimento simulado (SA). Os parâmetros utilizados para a solução foram: $T_0 = 5,0$, $r_t = 0,75$, $N = 200$ (número de avaliações de Q em cada ciclo) e $\epsilon = 1.0\text{E-}03$ (tolerância de convergência da função objetivo, baseado nos valores de 4 ciclos sucessivos). Foram necessárias 7000 avaliações de Q para a convergência. O resultado está mostrado na Tabela 4.

Tabela 4 : Caso 2 $\vec{Z}^0 = (0,005; 3500)$ – (SA)

Ciclo	k (W/m °C)	c (J/kg °C)	Q (°C ²)
0	0,0050	3500,0	42124,58
1 (T=0,5)	0,0509	3492,1	6,415
2(T=0,375)	0,0539	3160,3	4,441
3(T=0,281)	0,0576	2752,3	2,625
5(T=1,582)	0,0708	1705,6	0,164
35(T=2,825E-4)	0,0732	1563,3	0,118

Testou-se o uso do método LM após cada ciclo do Recozimento Simulado. Houve convergência após o quinto ciclo, como mostra a Tabela 5. O esforço computacional foi reduzido para cerca de 1000 avaliações da função objetivo.

Tabela 5 : Caso 2 $\vec{Z}^0 = (0,005;3500)$ – LM após o quinto ciclo do SA

Iteração	k (W/m °C)	c (J/kg °C)	Q (°C ²)
0	0,0708	1705,6	0,164
1	0,0731	1561,7	0,132
2	0,0732	1563,0	0,118

6. CONCLUSÕES

No presente trabalho utilizou-se um método estocástico de otimização global denominado Recozimento Simulado no problema inverso de estimativa de propriedades térmicas de materiais poliméricos a partir de resultados experimentais. O método mostrou-se bastante robusto, determinando sempre o mínimo global, independente da estimativa inicial. A desvantagem demonstrada pelo método é o excessivo esforço computacional requerido para a sua convergência. Procurou-se reduzir este esforço através da combinação do (SA) com um método de otimização local como o Levenberg-Marquardt. Os resultados obtidos mostraram que a metodologia desenvolvida é bastante confiável, garantindo a obtenção do mínimo global no problema inverso estudado com uma considerável economia de esforço computacional. A aplicação desta metodologia em outros tipos de problemas inversos é uma natural continuação do presente trabalho.

Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte financeiro parcial da FAPERJ – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro.

REFERÊNCIAS

- Al – Khalidy, N., 1998, On the Solution of Parabolic and Hyperbolic Inverse Heat Conduction Problems, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 41, pp. 3731 – 3740.
- Al – Najem, N. M., 1993, Inverse Heat Generation Problem in a Hollow Cylinder, *Proc. 1st International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practise*, Florida, USA, pp. 243 – 251.
- Artyukhin, E. A., 1982, Recovery of the Temperature Dependence of the Thermal Conductivity Coefficient from the Solution of the Inverse Problem, *High Temperature*, Vol. 19, No. 5, pp. 698 – 702.
- Artyukhin, E. A., 1993, Iterative Algorithms for Estimating Temperature-Dependent Thermophysical Characteristics, *Proc. 1st International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice*, Florida, USA, pp. 101 – 108.
- Artyukhin, E. A. e Nenarokomov, A. V., 1988, Coefficient Inverse Heat-Conduction Problem, *Journal of Engineering Physics*, Vol. 53, No. 3, pp. 1085 – 1090.
- Beck, J. V., 1988, Combined Parameter and Function Estimation in Heat Transfer with Application to Contact Conductance, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 110, pp. 1046 – 1058.
- Beck, J. V. e Al-Araji, S., 1974, Investigation of a New Simple Transient Method of Thermal Property Measurement, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 96, pp. 59 – 64.

- Borukhov, V. T. e Kolesnikov, P. M., 1988, Method of Inverse Dynamic Systems and Its Application for Recovering Internal Heat Sources, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 31, No. 8, pp. 1549 – 1556.
- Bueno, V. C. e Soeiro, F. J. C.P., 1998, Aplicação da Técnica do Reozimento Simulado na Avaliação de Danos em Estruturas, V Congresso de Engenharia Mecânica N-NE, Vol. II, pp. 487 – 494.
- Carvalho, G. e Silva Neto, A. J., 1999, An Inverse Analysis for Polymers Thermal Properties Estimation, Proc. 3rd International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice, Port Ludlow, USA.
- Carvalho, G., Frollini, E. e Santos, W. N., 1996, Thermal Properties of Polymers by Hot – Wire Method, *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 62, pp. 2281 – 2285.
- Corana, A., Marchesi, M., Martini, C. e Ridella, S. , 1987, Minimizing Multimodal Functions of Continuous Variables With the Simulated Annealing Algorithm, *ACM Transactions of Mathematical Software* , Vol.13, pp 262-280.
- Flach, G. P. e Özisik, M. N., 1989, Inverse Heat Conduction Problem of Simultaneously Estimating Spatially Varying Thermal Conductivity and Heat Capacity per Unit Volume, *Numerical Heat Transfer, Part A*, Vol. 16, pp. 249 – 266.
- Frankel, J. I. e Keyhani, M., 1997, A Global Time Treatment for Inverse Heat Conduction Problems, *Journal of Heat Transfer*, Vol. 199, pp. 673 –683.
- Goffe, W.L., Ferrier, G.D., Rogers, J., 1992, Global Optimization of Statistical Functions With Simulated Annealing, *Journal of Econometrics*, Vol. 60, pp 65-99.
- Griesinger, A., Hurler, W. e Pietralla, M., 1997, A Photothermal Method with Step Heating for Measuring the Thermal Diffusivity of Anisotropic Solids, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, No. 13, pp. 3049 – 3056.
- Guimarães G., Philippi, P. C. e They, P. 1995, Use of Parameters Estimation Method in the Frequency Domain for the Simultaneous Estimation of Thermal Diffusivity and Conductivity, *Rev. Sci. Instrum.*, Vol. 66, No. 3, pp. 2582 – 2588.
- Ji, C. – C. e Jang, H. Y., 1998, Experimentation in Inverse Heat Conduction Problems, *Numerical Heat Transfer, Part A*, Vol. 34, pp. 75 – 91.
- Jurkowski, T., Jarny, Y. e Delaunay, D., 1997, Estimation of Thermal Conductivity of Thermoplastics under Moulding Conditions: An Apparatus and an Inverse Algorithm, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 40, No. 17, pp. 4169 – 4181.
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. e Vecchi, M. P., 1983, Optimization by Simulated Annealing, *Science*, Vol. 220, pp. 671 – 680.
- Lima e Silva, S. M. N., Duarte, M. A. V. e Guimarães, G., 1998, A Correlation Function for Thermal Properties Estimation Applied to a Large Thickness Sample with a Single Surface Sensor, *Rev. Sci. Instrum.*, Vol. 69, No. 9, pp. 3290 – 3297.
- Muniz, W. B., Campos Velho, H. F. e Ramos, F. M., 1999, A Comparison of Some Inverse Methods for Estimating the Initial Condition of the Heat Equation, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 103, pp. 145 – 163.
- Orlande, H. R. B. e Özisik, M. N., 1993, Determination of the Reaction Function in a Reaction-Diffusion Parabolic Problem, Proc. 1st International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice, Florida, USA, pp. 117 –124.
- Shai, I., Laor, V. e Gilad, I., 1993, Superposition of Thermal Loads Model for Measuring Thermal Diffusivity in Solids, *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 36, No. 4, pp. 925 – 930.

- Silva Neto, A. J. e Carvalho, G., 1999, O Projeto de Experimentos para a Caracterização Térmica de Polímeros com a Solução de Problemas Inversos, Anais XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Águas de Lindóia, São Paulo.
- Silva Neto, A. J. e Moura Neto, F. D., 1999, Escolha de Modelos – Problemas Inversos em Engenharia, Notas de Aula do Minicurso Técnico MC05, XXII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Santos.
- Silva Neto, A. J., e Özisik, M.N., 1993, Simultaneous Estimation of Location and Timewise Varying Strength of a Plane Heat Source, J. Numer. Heat Transfer, Part A, Vol. 24, pp. 467 – 477.
- Silva Neto, A. J. e Özisik, M. N., 1994, An Inverse Heat Conduction Problem of Unknown Initial Condition, Proc. 10th International Heat Transfer Conference, Brighton, England.
- Silva Neto, A. J. e Özisik, M. N., 1994a, The Estimation of Space and Time Dependent Strength of a Volumetric Heat Source in a One-Dimensional Plate, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 37, No. 6, pp. 909 – 915.
- Silva Neto, A. J. e Su, J., 1999, The Estimation of Heat Source Strength in Plate-Type Fuel Elements with Cladding, Proc. 3rd International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice, Port Ludlow, USA.
- Su, J. e Silva Neto, A. J., 1999, Heat Source Estimation with the Conjugate Gradient Method in Inverse Linear Diffusive Problems, Proc. 1st International Conference on Engineering Thermophysics, Beijing, China, pp. 377 – 384.
- Ved, V. E., Ivanov, V. A., Lushpenko, S. F. e Matsevityi, Y. M., 1992, Determining the Thermal Conductivity of Ceramic Materials by Solving the Inverse Heat – Conduction Problem, Journal of Engineering Physics, Vol. 61, No. 05, pp. 1400 – 1405.
- Vogel, J., Sára, L. e Krejčí, L., 1993, A Simple Inverse Heat Conduction Method with Optimization, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 36. No. 17, pp. 4215 – 4220.
- Vozár, L. e Srámková, T., 1997, Two Data Reduction Methods for Evaluation of Thermal Diffusivity from Step – Heating Measurements, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 40, No. 7, pp. 1647 – 1655.
- Zongrui, L. e Zhongwu, L., 1994, A Control Theory Method for Solutions of Inverse Transient Heat Conduction Problems, Journal of Heat Transfer, Vol. 116, pp. 228 – 230.

THERMAL PROPERTIES ESTIMATION OF POLYMERIC MATERIALS WITH THE SIMULATED ANNEALING METHOD

Abstract. An ever-growing demand has been observed for the development and thermal characterization of new materials. In this work we present the solution on an inverse problem with the Levenberg-Marquardt (LM) method and the Simulated Annealing (SA) method for the simultaneous estimation of the thermal conductivity and specific heat of new polymeric materials. Real experimental data obtained with a sample of a polymeric material with lignin, a by-product of the sugar cane bagasse, are used.

Key-words: Inverse Problems, Thermal characterization, Levenberg-Marquardt, Simulated Annealing.