

IV Simpósio Paranaense de Modelagem, Simulação e Controle de Processos ISSN : 1984-7521	Artigo: 05
	Páginas: 32 - 39

APLICAÇÃO DE ALGORITMOS DE CLASSIFICAÇÃO NA DETERMINAÇÃO DO PRINCIPAL MECANISMO DE TROCA TÉRMICA EM CAVIDADES COM OBSTÁCULO

Mariana Marques da Cunha¹, Miguel Queiroz Valentin^{1*}, Éliton Fontana¹

*1 – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná – UFPR, - Curitiba /PR, -
miguelvalentin@gmail.com

Resumo – É analisada a interferência da posição e do tamanho de um obstáculo inserido em uma cavidade trapezoidal no tipo de mecanismo de troca térmica predominante: convecção ou condução. A modelagem da cavidade é baseada em uma de suas paredes verticais mantida aquecida, a outra resfriada e as demais termicamente isoladas. A resolução das equações governantes foi feita através do método de volumes finitos, com a aplicação do software ANSYS CFX. Algoritmos de classificação foram aplicados para se estabelecer um meio de previsão do principal mecanismo de troca térmica. Primeiramente, testou-se quatro diferentes classificadores, usando a ferramenta Confusion Matrix, e verificou-se qual obteve melhor êxito para classificar os dados. Então o algoritmo gerou modelos de configurações nas quais acontece a troca da predominância de um tipo de troca de calor para outro.

Palavras-chave: convecção natural, cavidades trapezoidais, aprendizado de máquina, confusion matrix.

Introdução

Existem três formas com que o calor pode ser transportado. São elas: a condução, a convecção e a radiação. No caso da convecção, a partir de uma gradiente de temperatura em um meio fluido, o transporte de energia acontece pelo mecanismo microscópico, através da difusão das moléculas, e pelo mecanismo macroscópico, com o deslocamento do próprio fluido. A convecção analisada nesse artigo é a do tipo natural (também chamada de livre), já que foi considerado o movimento do fluido em análise não forçado e gerado pela diferença de densidades do fluido, que surgem na medida em que partes dele adquirem diferentes temperaturas [1][2]. Por sua vez, a radiação não depende de meio material pra acontecer, sendo inclusive desfavorecida num meio não vácuo. Corpos com temperatura acima do zero absoluto emitem ondas eletromagnéticas, o que configura a transferência de calor por radiação [1].

Nos estudos de Silva et al [3], Moukalled et al [4], Fontana et al [5] e Reynolds et al [6], especialmente nos dois últimos devido a maior semelhança da geometria aplicada, a convecção natural é estudada em meios controlados nos quais são inseridos objetos defletores. A análise de situações cotidianas, como a troca de calor em cômodos, e da situação em questão neste artigo podem se amparar nesses trabalhos para prosseguir. No caso estudado aqui, a influência da convecção natural e da condução em uma cavidade trapezoidal com um defletor inserido é investigada em diferentes configurações internas que esse conjunto pode tomar.

Com a finalidade de organizar as configurações que cada um dos dois tipos de troca de calor citados tem maior influência, algoritmos de inteligência artificial são aplicados neste trabalho. Algoritmos lógicos de inteligência artificial são os responsáveis pela capacidade de tomadas de decisões e processamento inteligente de dados da máquina. Existem, basicamente, quatro tipos de algoritmos de aprendizado de

máquina (*machine learnig*) amplamente usados. Os dois mais populares são o de Aprendizado Supervisionado e o de Aprendizado Não Supervisionado.

Para classificação dos dados, nesse estudo foram usados os de Aprendizado Supervisionado, os quais utilizam um banco de dados com diversas entradas e suas saídas correspondentes para aprender o padrão que essas saídas seguem e, então, prever os resultados de entradas seguintes. Tais sistemas são muito empregados para discernir futuros prováveis a partir de dados históricos como, por exemplo, a probabilidade de uma transação bancária realizada ser uma fraude.

Os algoritmos de classificação são um tipo de aprendizagem supervisionada e são importantes devido a crescente utilização de documentos e dados digitais e a necessidade de organizá-los. Eles são construídos por um processo indutivo de forma que a máquina, automaticamente, se torne um classificador de dados analisando as características de outros dados previamente fornecidos e classificados [7]. O uso desse tipo de tecnologia, ao invés de classificadores definidos manualmente por especialistas no domínio, traz vantagens econômicas, já que retira uma parte do processo garantido por força de trabalho especializado, além de ser mais eficaz e facilmente trocado de áreas de aplicação com diferentes domínios [7].

Existem algoritmos de aprendizado supervisionado mais simples, como a regressão linear de mínimos quadrados, e outros mais complexos, como *Gradient Boost*. Alguns outros exemplos desse tipo de algoritmos são: *Random Forest*, Classificação Naive Bayes, Regressão Logística e K-Vizinhos Mais Próximos (K-nn), todos os quatro avaliados no decorrer desse projeto. O uso desses tipos de algoritmos aplicados em situações de indústrias químicas podem ser vistos em estudos como os de Sadiku et al [8], Betrie et al [9] e Gertrudes et al [10], onde classificadores parecidos são aplicados para facilitar a solução dos problemas.

Para a avaliação da precisão das previsões feitas pelos algoritmos, foi usada a *Confusion Matrix*, ou matriz confusão, que é um resumo dos valores previstos por um algoritmo classificador e dos valores reais, organizados de uma forma que fiquem mais evidentes os possíveis erros de categorização do algoritmo. Simplesmente comparando o número de valores previstos corretamente com o total de valores testados não é suficiente para uma boa avaliação da precisão que determinado algoritmo tem quando aplicado a um determinado conjunto de dados. O conceito básico dessa ferramenta, então, é de gerar uma matriz cujas colunas representam os valores reais e cujas linhas representam os valores previstos pelo classificador. Aplicando a *confusion matrix* à situação e avaliando alguns conceitos os quais a ela são associados, é descrito o desempenho dos algoritmos testados.

O objetivo deste trabalho consiste em aplicar algoritmos de classificação em dados obtidos computacionalmente para a convecção natural em cavidades trapezoidais, permitindo prever o mecanismo de troca térmica predominante e o início da convecção natural em função dos parâmetros geométricos do sistema, em particular o tamanho e posição do obstáculo.

Metodologia

Para a aplicação da modelagem matemática, foi proposta a geometria apresentada na Fig.1, composta de duas paredes verticais paralelas delimitadas por duas superfícies, sendo a inferior plana, enquanto a superior possui uma inclinação (ϕ) de 15° . Na região interior à cavidade inseriu-se um obstáculo sólido, esse foi deslocado ao longo do trapézio em quatro diferentes posições, variando-se a distância do defletor até a parede esquerda (L_b), entre os valores de 0.2, 0.4, 0.6 e 0.8 do comprimento total (L) da cavidade. Ademais, o obstáculo teve sua altura variada entre 0, 0.25, 0.5 0.75 e 1 da altura total da parede esquerda (H). O comprimento L foi considerado 4 vezes maior

que a altura H , enquanto a espessura do defletor (W_b) foi determinada como $L/20$. O obstáculo segue as proporções da cavidade, sendo também composto de duas paredes verticais e uma superior com inclinação ϕ . As temperaturas das paredes laterais da geometria foram nomeadas como T_H , para a temperatura quente e T_C , para a temperatura fria. Os casos acima mencionados foram examinados variando a parede a ser considerada quente, ora sendo à esquerda, ora sendo a direita. Porém, para a análise dos resultados, foram usados apenas os dados considerando a parede à direita com a parede quente.

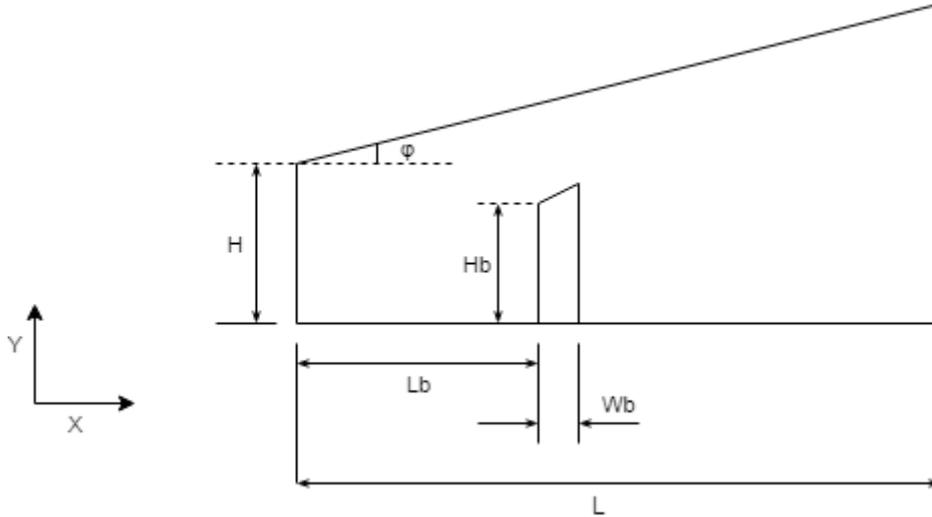


Figura 1 – Geometria proposta

O meio fluido do interior do trapezoide foi estipulado como ar atmosférico, em um regime laminar e estado estacionário. Todas as propriedades foram mantidas constantes com a exceção à densidade na direção do eixo y , devido a ação da força da gravidade, onde é aplicada a aproximação de Boussinesq.

Para o equacionamento do fluido no interior da cavidade foram utilizadas as equações da conservação da massa, momento e energia, apresentadas nas equações (1) a (3). Em que o termo $\vec{v} = (u, v)$, representa as componentes adimensionais u e v da velocidade nos eixos x e y , respectivamente. O vetor unitário na direção y é representado por \vec{j} , a pressão adimensional por p , enquanto a temperatura adimensional é representada por $\theta = (T - T_C)/(T_H - T_C)$.

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{1}{Pr} (\vec{v} \cdot \nabla \vec{v}) = -\nabla p + \nabla^2 \vec{v} + Ra\theta \vec{j} \quad (2)$$

$$\vec{v} \nabla \theta = \nabla^2 \theta \quad (3)$$

Os números adimensionais de Pradtl e Rayleigh são definidos como:

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} Ra = \frac{g\beta(T_H - T_C)H^3}{\nu\alpha} \quad (4)$$

o termo $\nu = \mu/\rho$ corresponde a viscosidade cinemática, sendo μ a viscosidade dinâmica e ρ a densidade do fluido. A expansividade térmica é descrita por β , $\alpha = k/\rho c_p$ é a difusividade térmica, em que k e c_p caracterizam, respectivamente, a condutividade e a

capacidade calorífica. Para representar o ar atmosférico, foi estipulado o valor fixo de $Pr = 0.7$, ao passo que diversos valores de Ra foram analisados.

As condições de contorno de velocidade são determinadas por:

$$\begin{aligned} u(x = 0, y) = v(x = 0, y) = u(x = L, y) = v(x = L, y) = u(x, y = 0) \\ = v(x, y = 0) = u(x, y = H + L * tg(\varphi)) \\ = v(x, y = H + L * tg(\varphi)) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

As condições de contorno para as superfícies isoladas termicamente são escritas como:

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial \theta}{\partial y} \right|_{y=H+L*tg(\varphi)} = 0 \quad (6)$$

Entretanto, as condições de contorno de temperatura variam de acordo com o caso a ser tratado. As condições prescritas nas superfícies quando a parede quente é direita e a esquerda a fria resultam em:

$$\theta(x = 0, y) = 0 \quad \theta(x = L, y) = 1 \quad (7)$$

Na fase sólida, a conservação de energia pode ser simplificada para:

$$\nabla^2 \theta = 0 \quad (8)$$

A continuidade do fluxo de calor na interface sólido/fluido pode ser expressa como:

$$n \cdot \vec{\nabla} \theta = (n \cdot \vec{\nabla} \theta) k_r \quad (9)$$

na qual k_r é a razão entre a condutividade térmica da fase sólida e da fase fluida, considerado como um valor próximo a 50 neste trabalho.

Para mensurar a importância da convecção em comparação com a condução, foram avaliados os valores do número de Nusselt, definido como:

$$Nu = \frac{hL}{k} \quad (10)$$

sendo h o coeficiente convectivo de transferência de calor, L o comprimento característico da geometria e k a condutividade térmica. Desse modo, valores de Nu maiores que 1 indicam maior influência da convecção na troca térmica, enquanto que valores menores que 1 indicam a predominância da condução.

As equações foram resolvidas utilizando o pacote ANSYS CFX versão 19.1, programa computacional para simulações no campo da engenharia, voltado para o estudo de fluidos, em que as equações são solucionadas simultaneamente, utilizando como parâmetro de convergência um valor inferior a 10^{-12} para a soma dos valores absolutos normalizados de cada elemento da malha no domínio da solução.

A execução do projeto seguiu a ordem apresentada pelo fluxograma de etapas na Fig.2. Ressalta-se que para a obtenção dos dados foi usado programa de simulações

citado no parágrafo anterior, sendo as demais etapas executadas por programas escritos em linguagem Python.

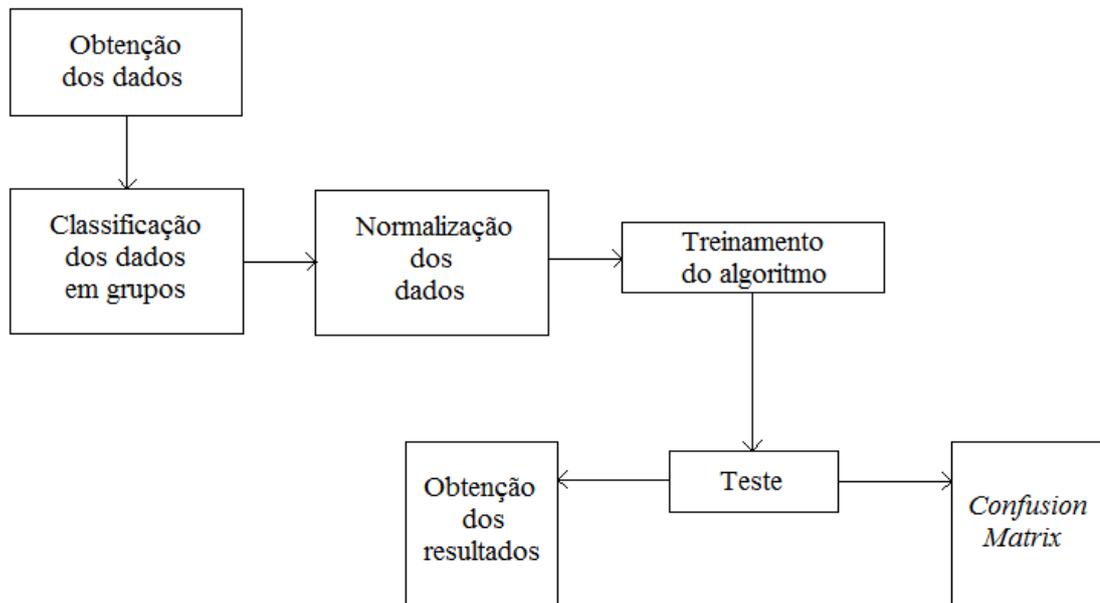


Figura 2 – Fluxograma de etapas.

A obtenção de dados garantiu o conjunto de entradas e saídas necessárias para o “aprendizado” do algoritmo. Dessa forma, a entrada de cada simulação feita consistiu nos valores de Hb, Lb e Rayleigh (Ra). A saída correspondente aos três valores de entrada é o número de Nusselt (Nu), indicando o tipo de troca térmica predominante para aquela determinada configuração definida pelos valores de entrada. Em seguida esses dados foram divididos em dois grupos, os com valor Nu maior que um e Nu menor que um, adquirindo um “rótulo”. Devido à grande diferença de ordem de grandeza entre os valores, tanto na entrada como na saída dos dados, esses passaram por um procedimento de normalização com a intenção de melhorar a acurácia dos classificadores. Os dados normalizados são então avaliados pelos algoritmos de classificação (K-Vizinhos Mais Próximos (K-*nn*), Regressão Logística, Classificação Naive-Bayes e *Random Forest*) e testados gerando a *Confusion Matrix* para cada algoritmo. A partir dessa matriz, tem-se o F_1 -score de cada classificador que indica qual deles obteve previsões mais condizentes com a realidade. Com o algoritmo mais acurado para o caso, obteve-se o limiar de valores de Ra, para diversas combinações de Hb e Lb, onde acontece o aumento na convecção (Nu=1).

Destaca-se que o valor do F_1 -score é calculado com base em outros dois parâmetros ligados à *Confusion Matrix*, o *Precision* e o *Recall*. O *Precision* de um classificador é o quociente da quantidade de previsões positivas corretas (chamadas de *true positives*) pela quantidade total de previsões positivas feitas. Já o *Recall* é dado pela razão entre as “*true positives*” e o total instâncias de saída positiva reais. Desse modo, o F_1 -score é calculado efetuando a média harmônica não ponderada dos valores dos dois parâmetros:

$$F_1score = 2 \frac{(precision) \cdot (recall)}{(precision) + (recall)} \quad (11)$$

Resultados e Discussão

Inicialmente, para a determinação do algoritmo mais adequado para a situação em que a parede quente é a direita, os quatro classificadores foram submetidos a 30 testes seguidos com o mesmo conjunto de dados (no total, 218). A *Confusion Matrix* em todos os casos foi gerada a partir de 25% do conjunto de dados para teste e 75% para o treinamento do algoritmo, valores que foram fixados nessa proporção com o intuito de maximizar a precisão dos algoritmos e para que esse quesito não interferisse na avaliação da diferença entre eles. O F_1 -score de cada classificador foi anotado em cada teste e a média desse valor foi estabelecida. O algoritmo de classificação *Random Forest* foi o que obteve melhores resultados, sendo seu F_1 -score médio de 0.908 (desvio padrão igual a 0.039). Os demais resultados podem ser observados na Tabela 1. Sendo assim, foi esse o algoritmo usado para a construção dos demais resultados.

Tabela 1 – Resultados dos F_1 -score dos algoritmos testados.

	K-nn	Regressão Logística	Naive-Bayes	<i>Random Forest</i>
F_1 -score médio	0.813	0.856	0.852	0.908
Desvio padrão	0.055	0.048	0.055	0.039

Como já dito anteriormente, com o intuito de estimar os valores de Rayleigh a convecção passa a ser significativa, foram geradas curvas do valor de Ra onde $Nu = 1$ em função de Hb para alguns valores fixos de Lb, e vice versa. O chamado “Ra crítico” foi projetado pelo algoritmo de classificação, que foi treinado usando todos os dados do conjunto citado no parágrafo anterior. Depois de gerados gráficos com passos de construção cada vez menores, chegou-se num tamanho de passo onde os resultados não mais variavam significativamente. Dessa forma, as figuras Fig. 3 e Fig. 4 elencam as curvas resultado do Ra crítico em função do Hb e Lb, respectivamente.

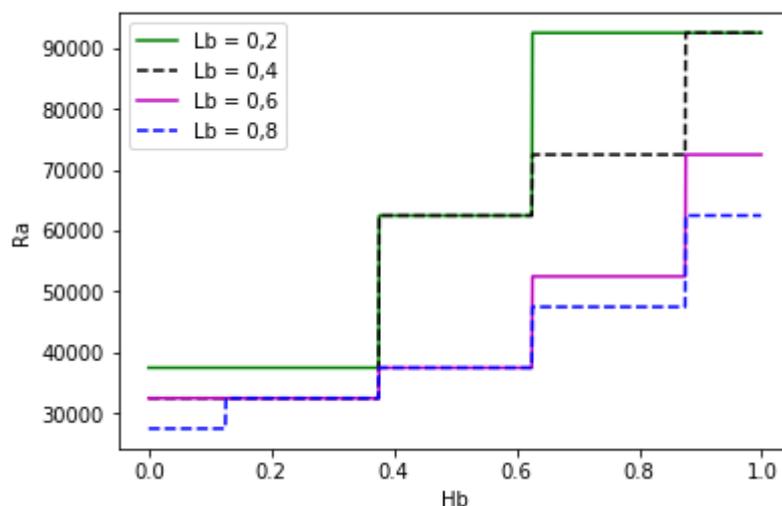


Figura 3 – Rayleigh de troca em função de Hb.

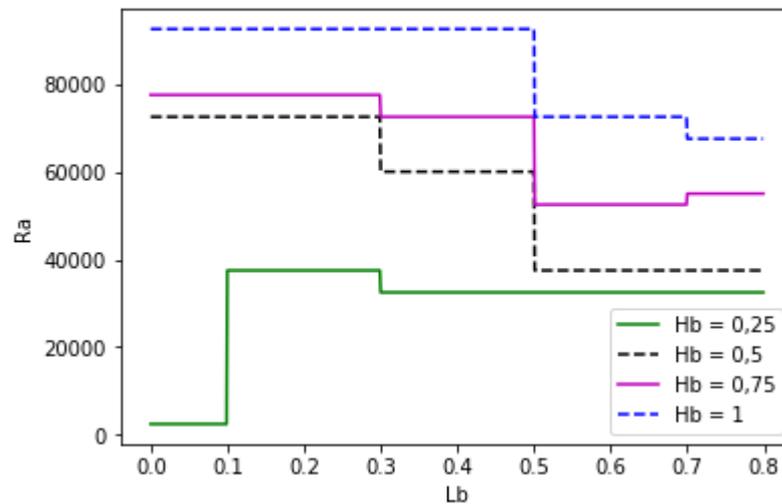


Figura 4 – Rayleigh de troca em função de Lb.

Nota-se que as curvas resultado seguiram um comportamento geral condizente do que se espera fisicamente, já que para maiores valores de Hb (obstáculo maior) os valores de Ra foram maiores, o que indicam a maior dificuldade da troca de calor acontecer por convecção com grandes obstáculos para a movimentação do fluido. Comparando também os resultados obtidos com o conjunto de dados, é possível notar que os valores de Ra crítico previstos pelo algoritmo estiveram dentro da faixa coerente.

O comportamento das curvas, nos dois casos, indica que quanto maior o valor de Lb, menores os valores de Rayleigh. Ou seja, quanto mais perto o defletor da parede quente, menor a predominância da condução no troca de calor do sistema. As curvas apresentam um comportamento na forma de degraus devido ao baixo número de dados fornecidos ao algoritmo, caso um número maior de casos fosse avaliado, as curvas naturalmente iriam obter um formato suave.

Conclusão

Esse artigo fez uso de algoritmos de aprendizado de máquina para avaliar o tipo de troca térmica de maior predominância em cavidades trapezoidais com um defletor. No modelo dessa cavidade a parede direita foi mantida aquecida enquanto a esquerda era mantida fria, sendo as demais paredes mantidas isoladas. O tamanho e a posição do obstáculo dentro da cavidade foram sendo variados e, por meio de cálculos resolvidos utilizando o método de volumes finitos com o uso do pacote ANSYS CFX versão 19.1, os dados necessários para os algoritmos estabelecerem um padrão de comportamento térmico do sistema foram gerados.

Observou-se que os classificadores testados tiveram, em geral, bons resultados prevendo o tipo de troca térmica predominante em cada caso, porém o algoritmo *Random Forest* foi o mais capaz fazer previsões corretas dentro do espectro de dados apresentado. Já que para todos os algoritmos os resultados dos testes de eficácia foram razoáveis, intui-se que dentro conjunto de dados realmente existia um padrão de valores de Nu para determinadas configurações, que foi captado pelos classificadores.

Então, com o algoritmo mais adequado, curvas de valores de Rayleigh crítico foram traçadas em função da posição e do tamanho do defletor. Observando-as, concluiu-se que a presença de obstáculos em meios materiais não pode ser negligenciada no estudo de troca de calor por convecção. O tamanho do defletor, como visto, influi negativamente a troca por convecção, já que limita o espaço em que o fluido circularia. Apesar da dificuldade em se obter um número suficientemente grande de dados, os

resultados mostram que os algoritmos de classificação podem ser aplicados para estudos de transferência de calor de forma satisfatória, permitindo definir a dependência do regime de escoamento em função dos parâmetros do sistema.

Referências

1. Incropera, F. P.; DeWitt D. P.; Bergman, T. L.; Lavine, A. S. Fundamentals of heat and mass transfer, LTC, Rio de Janeiro, 2008.
2. Fontana, É., Ph.D. Tese, Universidade Federal de Santa Catarina, 2014.
3. Silva, A.; Fontana, É.; Mariani V. C.; Marcondes, F. Numerical investigation of several physical and geometric parameters in the natural convection into trapezoidal cavities. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2012, 55, 6808-6818.
4. Moukalled, F. ; Acharya, S. Natural Convection In Trapezoidal Cavities With Baffles Mounted On The Upper Inclined Surfaces. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 2010, 545-565.
5. Fontana, É.; Silva, A.; Marcondes, F.; Mariani, V. C. Natural Convection within Trapezoidal Enclosure with Two Baffles: Effect of Various Angles of Inclination. 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, 2011.
6. Reynolds, D. J.; Morrison, G. L.; Behnia, M. Combined Radiation and Natural Convection in a Trapezoidal Cavity Absorber. *Solar Energy* 76, 2004, 229-234.
7. Sebastiani, F. Machine learning in automated text categorization. *ACM Computing Surveys*, New York, v. 34, n. 1, p. 1-47, 2002.
8. Sadiku, M. N. O.; Musa, S. M.; Musa, O. M. Machine Learning in Chemical Industry. *International Journal of Advances in Scientific Research and Engineering*. 2017, 3, 12-13.
9. Betrie, G. D.; Tesfamariam, S.; Morin, K. A.; Sadiq, R. Predicting copper concentrations in acid mine drainage: a comparative analysis of five machine learning techniques. *Environmental Monitoring and Assessment*. 2013, 185, 4171-4182.
10. Gertrudes, J. C.; Maltarollo, V. G.; Silva, R. A.; Oliveira, P. R.; Honorio, K. M.; da Silva, A. B. F. Machine Learning Techniques and Drug Desing. *Current Medicinal Chemistry*. 2012, 19, 25, 4289-4297.
11. User Guide for ANSYS CFX Release 19.1, ANSYS Inc Ltd.