

## Modelo de Erro de Aproximação para estimativa de fluxo de calor na Equação de Biotransferência de Calor Unidimensional

### *Approximation Error Model applied to the heat flux estimation in the One-Dimensional Bioheat transfer Equation*

Caroline Ribeiro Pereira<sup>1</sup>, Luiz Alberto da Silva Abreu<sup>2</sup>, Diego Campos Knupp<sup>3</sup>

#### RESUMO

Este trabalho trata da aplicação de uma abordagem via modelo de erro de aproximação na estimativa da função de fluxo de calor de contorno em um problema inverso de biotransferência de calor. Em geral, os modelos completos envolvendo biotransferência de calor tem alto custo computacional. O objetivo deste trabalho é utilizar um modelo reduzido, baseado na equação clássica de condução de calor, em conjunto com técnicas de inferência Bayesiana, visando estimar parâmetros e funções em um problema biológico. A partir de medições simuladas, geradas pela solução de um modelo completo, as estimativas no problema inverso são obtidas aplicando o Método Monte Carlo com Cadeia de Markov envolvendo um modelo reduzido e um modelo de erro de aproximação. Os resultados apresentados mostram que a técnica utilizada gerou resultados acurados, permitindo estimar o fluxo de calor em um problema biológico, utilizando um modelo de mais baixo custo computacional, que neste caso tratava-se de uma equação de condução de calor clássica.

**Palavras-chave:** Biotransferência de calor. Problema inverso. Estimativa de funções. Modelo de erro de aproximação.

#### ABSTRACT

This work deals with the application of the approximation error model in the estimation of the boundary heat flux function in an inverse bioheat transfer problem. In general, complete models involving bioheat transfer have a high computational cost. The objective of this work is applying a reduced model, based on the classical heat conduction equation, together with Bayesian inference techniques in order to estimate parameters and functions in a biological problem. From simulated measurements, generated by the solution of a complete model, the estimates in the inverse problem are obtained by applying the Monte Carlo Method with Markov Chain involving a reduced model and an approximation error model. The results reveals that the technique used was capable to produce accurate results, allowing the estimation of the heat flux in a biological problem, using a small computational time model, which in this case was a classical heat conduction equation.

**Keywords:** Bioheat Transfer. Inverse Problem. function estimation. Approximation Error Model.

<sup>1</sup> Engenheira Mecânica. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9228-1740>

<sup>2</sup> Doutor em Engenharia Mecânica. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico. E-mail: [luiz.abreu@iprj.uerj.br](mailto:luiz.abreu@iprj.uerj.br)

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7634-7014>

<sup>3</sup> Doutor em Engenharia Mecânica. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9534-5623>

## 1. INTRODUÇÃO

Problemas inversos apresentam importante e extensa aplicabilidade para a engenharia e as ciências em geral, sendo técnicas de solução amplamente utilizadas em estudos que envolvem biotransferência de calor (ORLANDE, 2021; AGHAYAN et al., 2013; ALAEIAN; ORLANDE, 2017; LOIOLA; ORLANDE; DULIKRAVICH, 2018). Problemas inversos em transferência de calor são aplicados tipicamente em situações em que não é possível realizar uma medição direta de quantidades de interesse, como de propriedades termofísicas, funções com variação espacial ou temporal envolvendo fluxos de calor, coeficientes de troca térmica, etc (ORLANDE, 2012; ÖZISIK; ORLANDE, 2021). Como exemplos de aplicações, pode-se citar trabalhos envolvendo a identificação de tumores (ROJCZYK et al., 2017), análise de dano térmico em tecidos tratados por ablação a laser (LOIOLA et al., 2020) e estimativas de propriedades físicas presentes em modelos matemáticos aplicados à estimulação cerebral profunda (*Deep Brain Stimulation* - DBS) (JARDIM et al., 2020).

Na abordagem Bayesiana os parâmetros do problema são modelados como variáveis aleatórias onde a incerteza associada a estes parâmetros, e sobre as variáveis observáveis, é codificada por meio das distribuições de probabilidade das quantidades de interesse (ORLANDE, 2021; KAIPIO & SOMERSALO, 2004). Para fazer inferência sobre a distribuição a posteriori é aplicado o teorema de Bayes que possibilita entre outras técnicas Bayesianas de estimação, o método Monte Carlo com Cadeia de Markov (*Markov Chain Monte Carlo* - MCMC). Nesse método, as propriedades das cadeias de Markov são utilizadas de modo que a distribuição de probabilidade à posteriori dependa somente do estado atual e não de toda a sequência de informações dos estados que a precederam (KAIPIO & SOMERSALO, 2004; ORLANDE, 2012; ROJCZYK et al., 2017; LOIOLA et al., 2020). Este método vem sendo largamente utilizado nos últimos dez anos e entre suas vantagens, destaca-se a forma natural com que uma análise sob incerteza pode ser realizada nestas abordagens (ORLANDE, 2021). Entretanto, o Método MCMC envolve tipicamente um grande esforço computacional o que muitas vezes podem impossibilitar a utilização do mesmo. Para superar esta limitação, diferentes novas abordagens na inferência Bayesiana vêm sendo propostas, muitas delas com o objetivo de permitir o uso de modelos reduzidos na solução de problemas inversos (DAMIEN et al., 2013; FRIGUIS et al., 2021; KAIPIO; SOMERSALO, 2005; LAMIEN; BARRETO ORLANDE; ENRIQUE ELIÇABE, 2017; NISSINEN et al., 2009; ÖZISIK; ORLANDE, 2021; PONTES et al., 2021).

Desta forma, construindo um modelo para os erros de aproximação e contabilizando-os no processo de estimação é possível obter resultados no método MCMC a partir de um modelo mais simples e computacionalmente mais rápido, mas que leva em conta as características do modelo completo. Estes modelos são denominados como Modelos de Erro de Aproximação (*Approximation Error Model* – AEM) (DAMIEN et al., 2013; FRIGUIS et al., 2021; KAPIO; SOMERSALO, 2005; LAMIEN; BARRETO ORLANDE; ENRIQUE ELIÇABE, 2017; NISSINEN et al., 2009; ÖZISIK; ORLANDE, 2021; PONTES et al., 2021).

Neste trabalho, o AEM é usado para compensar os erros de modelagem relacionados ao uso de um modelo reduzido baseado num problema de condução de calor puro e um modelo completo que envolve a condução de calor em um sistema biológico modelado pela equação de Pennes (PENNES, 1948). Tipicamente, os trabalhos encontrados na literatura aplicam o AEM sendo associado a biotransferência de calor por meio de filtros Bayesianos. Além disso, a literatura atual mostra poucos trabalhos onde as soluções da equação de biotransferência de calor tenha sido resolvida pelo método GITT (COTTA et al., 2010). Neste trabalho, o método AEM foi aplicado na equação de Pennes, o problema direto foi solucionado pela técnica GITT em conjunto com o método MCMC com o objetivo de identificação de uma função temporal de fluxo de calor de contorno. O problema inverso é então resolvido utilizando a equação clássica de condução de calor e os efeitos do erro de modelo são incluídos por meio do AEM. Os resultados do problema inverso utilizando o MCMC para a estimativa de um fluxo de calor aplicado na superfície do problema são apresentados considerando medições de temperatura simuladas.

## 2. METODOLOGIA

Nesta seção são apresentados os problemas físicos com duas diferentes formulações matemáticas, as soluções obtidas para os problemas direto e inverso e a aplicação do modelo de erro de aproximação.

### 2.1 Problema Físico e Modelos Matemáticos

#### 2.1.1 Modelo Completo

Considera-se neste trabalho como modelo completo, um problema de condução de calor em um sistema biológico num período pré-ablação. A camada de tecido tem espessura definida como  $H$  e troca calor por convecção com um meio externo cujo coeficiente de troca térmica e a temperatura são, respectivamente,  $h_{\infty}$  e  $T_{\infty}$ .

Considera-se ainda que é aplicado um fluxo de calor,  $g(t)$ , na face externa do tecido. Devido a capilaridade sanguínea, assume-se, no contorno em  $x = 0$ , que a temperatura interna permanece constante e igual a uma temperatura arterial  $T_b$ . Este problema pode ser modelado de matematicamente de forma geral pelas seguintes equações (PENNES, 1948):

$$\rho C_p \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} + \rho_b C_{p,b} \omega_b [T_b - T(x, t)] + \dot{Q}_{met} + \dot{Q}_{ext}, \quad 0 < x < H \text{ e } t > 0 \quad (1)$$

$$T(x, t) = T_b, \quad x = 0 \text{ e } t > 0 \quad (2)$$

$$k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = h_\infty [T_\infty - T(x, t)] + g(t), \quad x = H \text{ e } t > 0 \quad (3)$$

$$T(x, t) = T_b, \quad 0 \leq x \leq H \text{ e } t = 0 \quad (4)$$

onde  $\rho$ ,  $C_p$  e  $k$  são, respectivamente, a densidade, o calor específico e a condutividade térmica da pele,  $C_{p,b}$  e  $\rho_b$  são, respectivamente, o calor específico e a densidade do sangue,  $\omega_b$  é a taxa de perfusão sanguínea,  $T_b$  é a temperatura arterial interna,  $\dot{Q}_{met}$  é a taxa metabólica do tecido e  $\dot{Q}_{ext}$  é um termo fonte associado ao aquecimento de tecidos biológicos, que pode ser associado por exemplo a um laser (LOIOLA et al., 2020).

### 2.1.2 Modelo Reduzido

Considera-se como modelo reduzido, um meio de espessura  $H$ , inicialmente com temperatura uniforme  $T_b$ . A superfície em  $x = 0$  tem temperatura constante de  $T_b$ . A superfície em  $x = H$  troca calor por convecção com um meio a temperatura  $T_\infty$ . e coeficiente de transferência de calor  $h_\infty$ . Além disso, é aplicado um fluxo de calor,  $g(t)$ . Este problema pode ser modelado matematicamente pelas seguintes equações:

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

$$T(x, t) = T_b, \quad x = 0 \text{ e } t > 0 \quad (6)$$

$$k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = h_\infty [T_\infty - T(x, t)] + g(t), \quad x = H \text{ e } t > 0 \quad (7)$$

$$T(x, t) = T_b, \quad 0 \leq x \leq H \text{ e } t = 0 \quad (8)$$

onde  $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$  onde  $\rho$ ,  $C_p$  e  $k$  são, respectivamente, a densidade, o calor específico e a condutividade térmica.

## 2.2 Solução do Problema Direto

### 2.2.1 Modelo Completo

O problema direto associado com o modelo completo foi resolvido via técnica da transformada integral generalizada. Desta forma, visando melhorar a convergência da solução do problema direto, inicialmente é aplicado um filtro na forma (COTTA, 1993; COTTA; MIKHAĬLOV, 1997; KULACKI, 2018):

$$T(x, t) = T^*(x, t) + T_f(x) \quad (9)$$

Com isso, a solução para o problema filtro,  $T_f(x)$ , é uma função linear, dada por:

$$T_f(x) = T_b + \frac{h_\infty(T_\infty - T_b)}{Hh_\infty + k} x \quad (10)$$

A solução para o problema filtrado,  $T^*(x, t)$ , é obtida aplicando o método da transformada integral generalizada (*Generalized Integral Transform Technique - GITT*). Considerando a equação homogênea associada a equação filtrada, o problema de autovalor de Sturm-Liouville terá solução dada por (COTTA et al., 2018):

$$\varphi_i(x) = \text{sen}(\beta_i x) \quad (11)$$

$$\beta_i \cot(\beta_i H) = -\frac{h_\infty}{k} \quad (12)$$

O par de transformação integral, em termos das autofunções normalizadas,  $\tilde{\varphi}_i(x)$ , é descrito por (COTTA et al., 2018):

$$\text{Transformada: } \bar{T}_i(t) = \frac{1}{\alpha} \int_0^H \tilde{\varphi}_i(x) T^*(x, t) dx \quad (13)$$

$$\text{Inversa: } T^*(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{T}_i(t) \tilde{\varphi}_i(x) \quad (14)$$

sendo

$$\tilde{\varphi}_i(x) = \frac{\varphi_i(x)}{N_i} \quad (15)$$

e

$$N_i = \frac{1}{\alpha} \int_0^H \varphi_i^2(x) dx \quad (16)$$

A determinação de  $\bar{T}_i(t)$  será a partir de uma transformação integral no problema original. Operando a equação principal e a condição inicial obtém-se o seguinte problema transformado

$$\frac{d\bar{T}_i(t)}{dt} + \alpha\beta^2\bar{T}_i(t) = \bar{g}_i(t, \bar{T}_i(t)), \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (17)$$

$$\bar{T}_i(0) = f_i, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (18)$$

com

$$f_i = \frac{1}{\alpha} \int_0^H \tilde{\varphi}_i(x) [T_b - T_f(x)] dx \quad (19)$$

$$\bar{g}_i(t, \bar{T}_i(t)) = \bar{g}_i^{**}(t, \bar{T}_i(t)) - \bar{g}_i^*(t, \bar{T}_i(t)) \quad (20)$$

$$\bar{g}_i^*(t, \bar{T}_i(t)) = \frac{1}{k} \int_0^H \tilde{\varphi}_i(x) \{C_{p,b}\omega_b [T_b - T^*(x, t) - T_f(x)] + \dot{Q}_{met} + \dot{Q}_{ext}\} dx \quad (21)$$

$$\bar{g}_i^{**}(t, \bar{T}_i(t)) = \frac{\frac{g(t)}{k} [\beta_i \cos(\beta_i x) - \text{sen}(\beta_i x)]}{\left(\frac{h_\infty}{k} + 1\right) \sqrt{N_i}} \quad (22)$$

Por fim, somando  $T_f(x)$  a  $T^*(x, t)$ , obtém-se a solução final completa. Além disso, todos os somatórios das equações descritas nessa subseção são truncados em uma ordem  $N$  grande o suficiente para se obter a precisão de convergência necessária.

### 2.2.2 Modelo Reduzido

A solução do problema reduzido foi obtida empregando os mesmos passos descritos na seção anterior, considerando  $\bar{g}_i^{**}(t, \bar{T}_i(t)) = 0$ , pois o problema reduzido não tem em sua formulação os termos associados ao termo fonte e a contribuição de energia devido à interação entre o tecido biológico e o sangue arterial (COTTA et al., 2018).

Para os casos onde  $g(t)$  é constante, é possível resolver o modelo reduzido utilizando método de separação de variáveis (BECKER, 2015; OZISIK, 1993). Nestes casos há, portanto, uma significativa redução de custo computacional.

### 2.3 Solução do Problema Inverso

O problema inverso visa a estimativa do fluxo de calor,  $g(t)$ , aplicado a face externa do tecido. Este problema será resolvido, via inferência Bayesiana, considerando o teorema de Bayes, dado por:

$$\pi(P/Y) = \frac{\pi(P)\pi(Y/P)}{\pi(Y)} \quad (23)$$

onde  $\pi(P/Y)$  é a distribuição a posteriori,  $P$  representa os parâmetros do problema e  $Y$  contém as temperaturas medidas  $\pi(P)$  é a densidade de probabilidade a priori dos parâmetros e contém informações iniciais com relação às variáveis que se pretende estimar.  $\pi(Y/P)$  é a função de verossimilhança que contém a distribuição das variáveis medidas em relação àquelas que se queira estimar. O denominador  $\pi(Y)$  é a densidade de probabilidade marginal das medições e desempenha o papel de uma constante de normalização (KAPIO & SOMERSALO, 2004; ORLANDE, 2012).

Assumindo que os erros de medição são variáveis aleatórias gaussianas independentes, com média e desvio padrão conhecidos, a função de verossimilhança pode ser expressa como:

$$\pi(Y/P) = (2\pi)^{-\frac{D}{2}} |\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}} \text{Exp} \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(P)]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}(P)] \right\} \quad (24)$$

sendo  $\mathbf{T}(P)$  a solução do problema direto,  $D$  o número total de medidas experimentais e  $\mathbf{W}$  a matriz de covariância dos dados experimentais (KAPIO & SOMERSALO, 2004).

Para a solução do problema inverso será utilizado o método MCMC em conjunto com o algoritmo *Metropolis-Hasting*, que pode ser resumido nos seguintes passos (KAPIO; FOX, 2011; KAPO; SOMERSALO, 2005; ORLANDE, 2012; ÖZISIK; ORLANDE, 2021):

1. Fazer  $t = 0$ , e iniciar a cadeia com  $P^t$ ;
2. Gerar o candidato  $P^*$  com distribuição  $q(P^*/P^t)$ ;
3. Avaliar probabilidade de aceitação calculando:

$$\beta = \min \left[ \frac{\pi(P^*/Y)q(P^t/P^*)}{\pi(P^t/Y)q(P^*/P^t)} \right] \quad (25)$$

4. Gerar um número aleatório  $U$  com distribuição uniforme em  $(0,1)$ ;
5. Se  $U < \beta$ , aceita  $P^*$  e faz  $P^{t+1} = P^*$ . Caso contrário, descarta  $P^*$  e faz  $P^{t+1} = P^t$ ;
6. Voltar para o passo 2 e repetir o processo gerando a sequência  $\{P^1, P^2, \dots, P^N\}$ .



Para os casos onde  $\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^t + \boldsymbol{\varepsilon}$  e com  $\boldsymbol{\varepsilon}$  sendo um vetor de variáveis aleatórias com distribuição  $q_1(\boldsymbol{\varepsilon})$ , sendo  $q(\mathbf{P}^*/\mathbf{P}^t) = q_1(\boldsymbol{\varepsilon})$ , se a distribuição proposta for simétrica, isto é  $q_1(\boldsymbol{\varepsilon}) = q_1(-\boldsymbol{\varepsilon})$  ou  $q(\mathbf{P}^*/\mathbf{P}^t) = q(\mathbf{P}^t/\mathbf{P}^*)$ , a Equação (25) se reduz a (ÖZISIK; ORLANDE, 2021):

$$\beta = \min \left[ 1, \frac{\pi(\mathbf{P}^*/\mathbf{Y})}{\pi(\mathbf{P}^t/\mathbf{Y})} \right] \quad (26)$$

Considerando um número aleatório,  $\omega_j$ , obtido com uma distribuição Gaussiana com média zero e desvio padrão  $\zeta_j$ , para a densidade de proposta tem-se:

$$P_j^* = P_j^t + \omega_j \quad (27)$$

Dessa forma, considerando a sequência  $\{\mathbf{P}^1, \mathbf{P}^2, \dots, \mathbf{P}^N\}$ , apenas os estados após a convergência da cadeia para distribuição a posteriori deverão ser mantidos para as inferências estatísticas dos parâmetros estimados (ÖZISIK; ORLANDE, 2021).

## 2.4 Modelo de Erro de Aproximação

No Modelo de Erro de Aproximação a aproximação do erro de modelo é construída de forma estatística e representada como um erro adicional no modelo de medição. Inicialmente, assumindo que as incertezas nas medições de temperatura são aditivas e independentes dos parâmetros, o vetor de medidas experimentais é dado por (NISSINEN, 2011; NISSINEN et al., 2009; ÖZISIK; ORLANDE, 2021; PONTES et al., 2021):

$$\mathbf{Y} = \mathbf{T}_p(\mathbf{P}) + \mathbf{e} \quad (28)$$

onde  $\mathbf{T}_p(\mathbf{P})$  é a solução mais precisa do modelo, denominada solução do modelo completo. O vetor de incertezas de medição,  $\mathbf{e}$ , é assumido com distribuição normal, média zero e matriz de covariância conhecida  $\mathbf{W}$ . Assim, a função de verossimilhança será da forma da Equação (24) com  $\mathbf{T}(\mathbf{P}) = \mathbf{T}_p(\mathbf{P})$ . Considera-se agora que  $\mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r)$  seja a solução de um modelo reduzido com um vetor de parâmetros,  $\mathbf{P}_r$ , que pode conter apenas alguns elementos do vetor de parâmetros completo  $\mathbf{P}$ , a Equação (28) pode ser reescrita da seguinte forma (ÖZISIK; ORLANDE, 2021):

$$\mathbf{Y} = \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r) + [\mathbf{T}_p(\mathbf{P}) - \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r)] + \mathbf{e} \quad (29)$$

onde o erro entre o modelo completo e o modelo reduzido será:

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{P}) = \mathbf{T}_p(\mathbf{P}) - \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r) \quad (30)$$

de forma que a Equação (29) pode ser reescrita como:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r) + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{P}) \quad (31)$$



onde

$$\boldsymbol{\eta}(\mathbf{P}) = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{P}) + \mathbf{e} \quad (32)$$

Nesta abordagem, a função de verossimilhança da Equação (24) é reescrita da seguinte forma (ÖZISIK; ORLANDE, 2021):

$$\pi(\mathbf{Y}/\mathbf{P}_r) = (2\pi)^{-\frac{D}{2}} |\mathbf{W}_r|^{-\frac{1}{2}} \text{Exp} \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r) - \bar{\boldsymbol{\eta}}]^T \mathbf{W}_r^{-1} [\mathbf{Y} - \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_r) - \bar{\boldsymbol{\eta}}] \right\} \quad (33)$$

onde  $\bar{\boldsymbol{\eta}} \approx \bar{\boldsymbol{\epsilon}}$ , é a média de  $\boldsymbol{\epsilon}$  ao considerarmos o chamado *Enhanced Error Model* que é uma simplificação bem aceita e aplicável em inúmeros problemas práticos do denominado modelo de erro de aproximação completo (LAMIEN & ORLANDE, 2013; ÖZISIK & ORLANDE, 2021).

A partir das soluções diretas dos modelos completos e reduzidos, as amostras,  $\boldsymbol{\epsilon}_{(l)}$  do erro de aproximação, sua covariância,  $\mathbf{W}_r$ , e sua média são obtidas com (LAMIEN & ORLANDE, 2013; ÖZISIK & ORLANDE, 2021).

$$\boldsymbol{\epsilon}_{(l)} = \mathbf{T}_p(\mathbf{P}_{(l)}) - \mathbf{T}_r(\mathbf{P}_{r(l)}) \quad (34)$$

$$\bar{\boldsymbol{\epsilon}} = \frac{1}{N_s} \sum_{l=1}^{N_s} \boldsymbol{\epsilon}_{(l)} \quad (35)$$

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

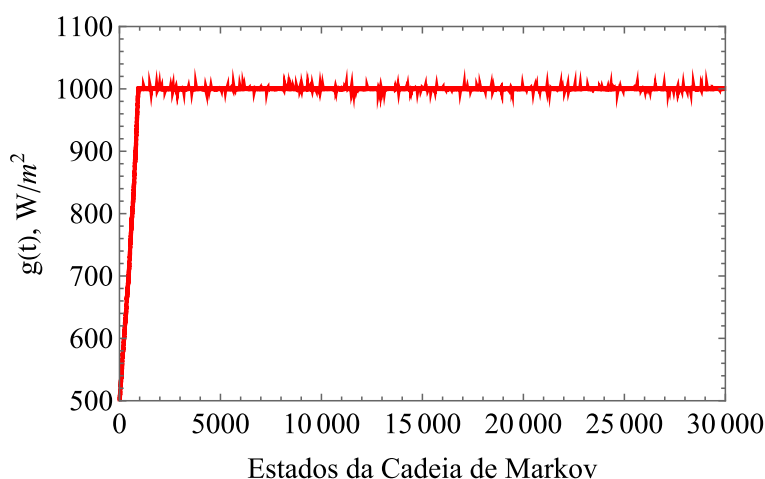
Neste trabalho os resultados foram obtidos por meio de códigos desenvolvidos no software Wolfram Mathematica11.2. Os parâmetros do problema, considerados deterministicamente conhecidos, estão listados na Tabela 1, sendo  $g(t)$  o parâmetro que se deseja estimar no problema inverso.

**Tabela 1.** Valores atribuídos aos parâmetros.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
$T_{\infty}$	25 °C	$T_b$	37 °C
$h_{\infty}$	10 W/(m <sup>2</sup> K)	$\dot{Q}_{met}$	170 W/m <sup>3</sup>
$H$	0,003 m	$\omega_b$	0,0028 s <sup>-1</sup>
$\rho$	1140 kg/m <sup>3</sup>	$\rho_b$	1000 kg/m <sup>3</sup>
$C_p$	3110 J/(kgK)	$C_{p,b}$	4100 J/(kgK)
$k$	0,512 W/(mK)	$\dot{Q}_{ext}$	0,0W/m <sup>3</sup>

Assumindo um tempo final de  $t_f = 30$  segundos, primeiramente foi estudado um problema considerando  $g(t)$  como sendo constante em todos os tempos. Medidas simuladas de temperatura foram obtidas com a solução do problema direto completo, na posição  $x = H$ , para diferentes instantes de tempo entre 0 e o tempo final,  $t_f$ , acrescentando-se a essas medidas erros experimentais com distribuição normal, média zero e desvio padrão conhecido e de  $0,05$  °C. Posteriormente, o método MCMC foi aplicado, utilizando o modelo reduzido, para obter uma primeira estimativa, sem nenhuma priori, para  $g_{r,estimado}$  a partir apenas das medidas. Considerando como estado inicial um valor de  $g = 500 \frac{W}{m^2}$  e desprezando os 1000 estados de *burn-in*, foi encontrada a média e o desvio padrão para a estimativa do fluxo de calor de contorno  $g_{r,estimado} = 780,3 \frac{W}{m^2}$  e  $\sigma_{g_{r,estimado}} = 5,3 \frac{W}{m^2}$ .

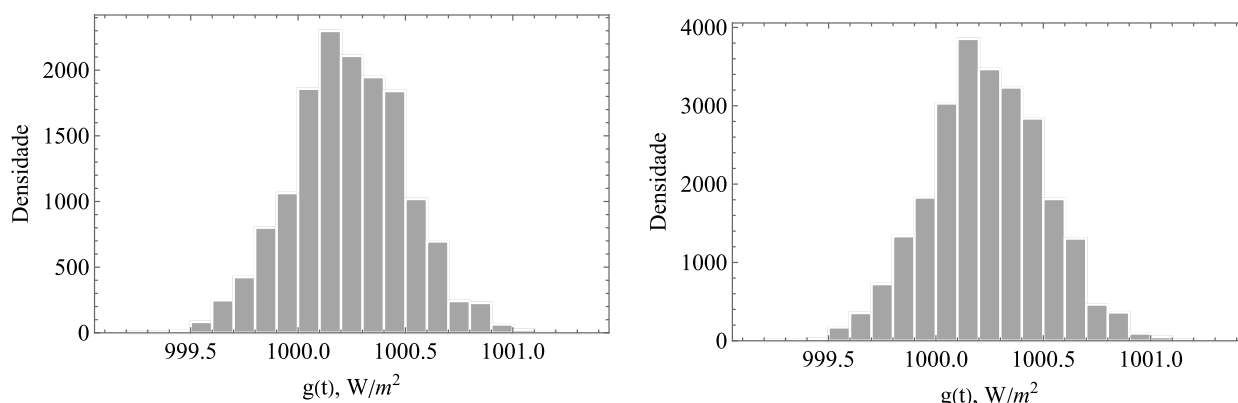
Em seguida, gerou-se 1000 valores aleatórios com média e desvio padrão definidos pela primeira estimativa para  $g$ , a partir da média e desvio padrão calculados anteriormente como priori. Para cada novo  $g_{(i)}$  foram recalculadas as temperaturas obtidas nos problemas diretos completo e reduzido. Assim, foi possível calcular os valores da média do erro de modelo,  $\bar{\epsilon}$ . Lembrando que na abordagem aplicada neste trabalho  $\bar{\eta} \approx \bar{\epsilon}$  e utilizando agora a Equação (33) para a função de verossimilhança, o método MCMC foi aplicado novamente para obter  $g_{estimado}$  considerando o erro de modelo, e desta forma obter a solução do problema levando em conta o erro de modelo. Na Figura 1 encontra-se a Cadeia de Markov para o parâmetro estimado.



**Figura 1.** Estados da Cadeia de Markov para  $g_{estimado} = 1000,24 \frac{W}{m^2}$  considerando na solução do problema inverso o modelo reduzido.

Na Figura 2(a) encontra-se o histograma gerado para os valores da cadeia de Markov no intervalo entre os estados 5000 e 20000 e na Figura 2(b) o histograma gerado para os valores da cadeia entre 5000 e 30000. Como os histogramas mantêm as mesmas características, considera-se que houve boa convergência das cadeias de Markov.

Desprezando os 1000 primeiros estados de *burn-in* foi obtida a média de  $g_{\text{estimado}} = 1000,24 \frac{W}{m^2}$  e desvio padrão de  $\sigma_{g_{\text{estimado}}} = 0,3 \frac{W}{m^2}$ . Assim, a solução apresenta erro relativo percentual de 0,009%. O tempo computacional, neste caso, foi entorno de 2 horas em um computador Intel CORE i7 com 8GB de memória RAM.

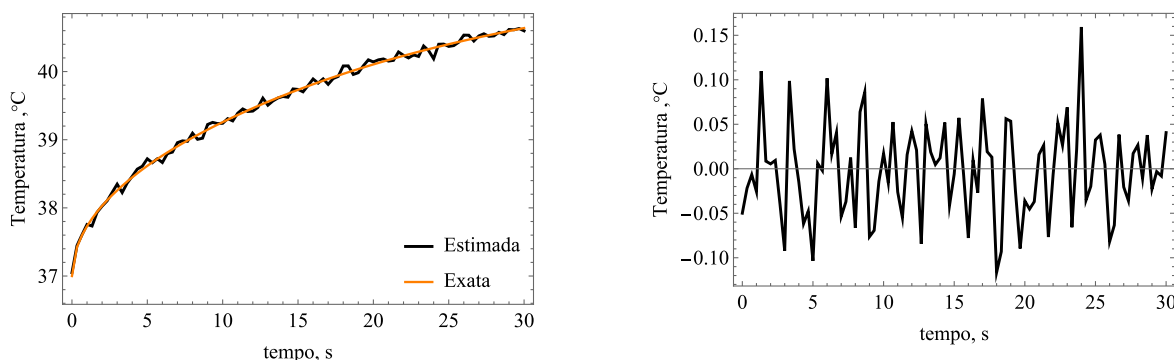


(a) Entre os estados 5000 e 20000

(b) Entre os estados 5000 e 30000.

**Figura 2.** Histogramas para o caso com  $g_{\text{estimado}} = 1000,24 \frac{W}{m^2}$  considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov.

A Figura 3 mostra que o resíduo entre as soluções foi baixo e não correlacionado. Assim, após encontrar o erro de modelo,  $\bar{\epsilon}$ , e de posse de medidas experimentais  $Y$  relacionadas a um problema completo, é possível obter boas estimativas para parâmetros desconhecidos utilizando para isso um modelo reduzido de solução mais simples e em geral computacionalmente mais rápida.



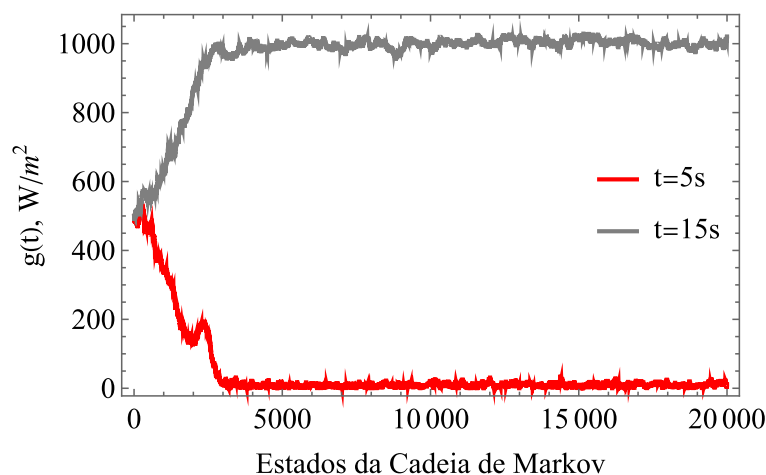
(a) Temperaturas.

(b) Resíduo.

**Figura 3.** Solução do problema completo obtida com  $g_{\text{estimado}}$  e temperatura experimental simulada. (b) Resíduo ao longo do tempo em  $x = H$ .

Assumindo um tempo final de  $t_f = 30$  segundos, em um segundo caso teste, mais desafiador, foi considerando fluxo de calor aplicado a face externa do tecido como uma função degrau, onde  $g(t) = 1000 \frac{W}{m^2}$  se  $10s < t < 20s$  e  $g(t) = 1,0 \frac{W}{m^2}$ , caso contrário. A simulação foi realizada considerando os mesmos dados utilizados no caso anterior. Neste segundo caso teste, considerou-se uma informação a priori não informativa do tipo *Total Variation Function* (ÖZISIK & ORLANDE, 2021).

Por meio da análise das Cadeias de Markov, considerando como estimativa inicial o valor de  $g(t) = 500 \frac{W}{m^2}$  e desprezando os 5000 primeiros estados da cadeia de Markov (*burn-in*), foram obtidas a média e o desvio padrão para  $g(t)$  em 50 tempos discretos. Novamente, considerou-se duas etapas na solução. Na primeira, obteve-se resultados sem levar em consideração o erro de modelo e com estes resultados a média do erro de modelo e sua matriz de covariância foram obtidos e utilizados para uma nova estimativa, agora considerando o erro de modelo. A Figura 4 mostra a Cadeia de Markov em dois instantes de tempo, já considerando o erro de modelo.



**Figura 4.** Estados da Cadeia de Markov para  $g_{\text{estimado}}(t)$  considerando na solução do problema inverso.

Desprezando os 5000 estados de burn-in foi obtido  $g_{\text{médio}}(t)$  que pode ser visto na Figura 5 juntamente com o fluxo de calor exato. É possível notar que o fluxo estimado é acurado e está em torno do valor de fluxo exato. Na Figura 6 mostra-se o gráfico para a solução do problema completo obtida com  $g_{\text{estimado}}(t)$  considerando o erro de modelo, juntamente com a temperatura experimental.

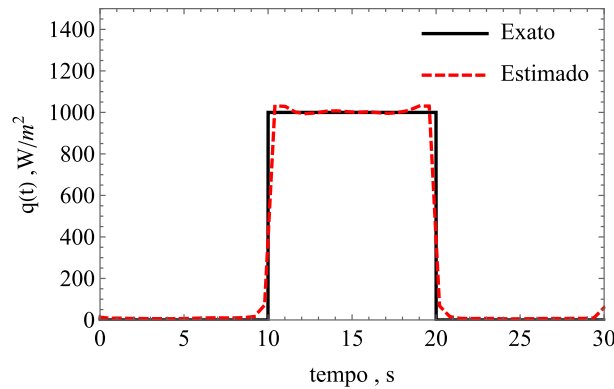


Figura 5. Fluxo de calor aplicado a face externa do tecido,  $g(t)$ , exato e estimado.

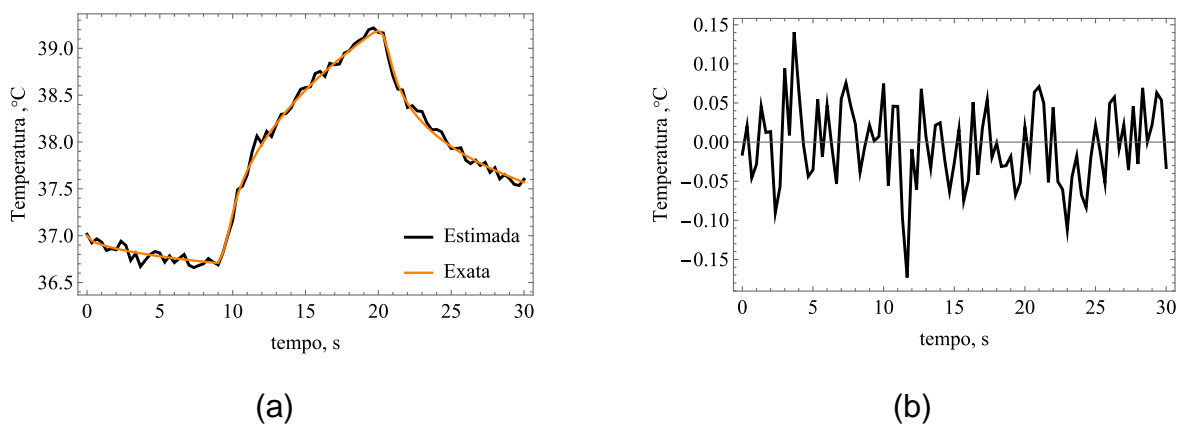


Figura 6. (a) Solução do problema completo obtida com  $g_{\text{estimado}}(t)$  e temperatura experimental. (b) Resíduo (diferença entre a temperatura estimada e experimental) ao longo do tempo em  $x = H$ .

#### 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho teve como finalidade avaliar a estimativa do fluxo de calor aplicado na superfície de um tecido biológico, modelado pela equação clássica de biotransferência de calor. Com o intuito de diminuir o custo computacional, foi utilizando um modelo reduzido baseado apenas na equação de condução de calor, na solução do problema inverso via método MCMC, utilizando uma abordagem aplicando o método AEM para levar em conta o erro entre os modelos. Analisou-se dois casos distintos, o primeiro para um valor constante do fluxo de calor de contorno e um segundo com variação temporal do fluxo de calor. Para o segundo caso, a Figura 6 mostra que a solução encontrada oscila em torno da solução exata de forma acurada demonstrando em especial que a eficácia da presente abordagem indica que outras técnicas de solução de problemas inversos, que sejam baseadas apenas na equação convencional de condução de calor, possam ser empregadas futuramente neste tipo de problema.

## AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ).

## REFERÊNCIAS

- AGHAYAN, S. A. et al. An Inverse Problem of Temperature Optimization in Hyperthermia by Controlling the Overall Heat Transfer Coefficient. **Journal of Applied Mathematics**, v. 2013, p. 1–9, 2013.
- ALAEIAN, M.; ORLANDE, H. R. B. Inverse Photoacoustic Technique for Parameter and Temperature Estimation in Tissues. **Heat Transfer Engineering**, v. 38, n. 18, p. 1573–1594, 12 dez. 2017.
- BECKER, S. M. Analytical Bioheat Transfer. Em: **Heat Transfer and Fluid Flow in Biological Processes**. [s.l.] Elsevier, 2015. p. 77–124.
- BERGER, Julien; ORLANDE, Helcio RB; MENDES, Nathan. Proper Generalized Decomposition model reduction in the Bayesian framework for solving inverse heat transfer problems. **Inverse Problems in Science and Engineering**, v. 25, n. 2, p. 260-278, 2017.
- COTTA, R. M. et al. Hybrid integral transforms analysis of the bioheat equation with variable properties. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 49, n. 9, p. 1510–1516, set. 2010.
- COTTA, R. M. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Boca Raton, Fla: CRC Press, 1993.
- COTTA, R. M.; MIKHAÏLOV, M. D. **Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation**. Chichester ; New York: Wiley, 1997.
- COTTA, Renato M; KNUPP, Diego C; QUARESMA, João Nazareno N. Analytical methods in heat transfer. **Handbook of Thermal Science and Engineering**, 2018.
- DA SILVA JARDIM, Lucas Correia et al. Brain Thermal and Electrical Properties Estimation Using Experimental Data From Deep Brain Stimulation Lead. **Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão**, v. 5, n. 6, 2020.
- DAMIEN, P. et al. (EDS.). **Bayesian Theory and Applications**. [s.l.] Oxford University Press, 2013.
- FRIGUIS, M. S. et al. Inverse Population Dynamics Problem Employing a Low Cost Integral Transform Solution and Bayesian Inference with Approximation Error Model. **International Journal of Applied and Computational Mathematics**, v. 7, n. 5, p. 189, out. 2021.
- KAPIO, J. P.; FOX, C. The Bayesian Framework for Inverse Problems in Heat Transfer. **Heat Transfer Engineering**, v. 32, n. 9, p. 718–753, ago. 2011.

- KAIPPIO, J.; SOMERSALO, E. **Statistical and Computational Inverse Problems**. New York: Springer-Verlag, 2005. v. 160
- KAIPPIO, Jari; SOMERSALO, Erkki. **Statistical and computational inverse problems**. New York (NY): Springer Science & Business Media, 2006.
- KULACKI, F. A. **Handbook of thermal science and engineering**. New York, NY: Springer Berlin Heidelberg, 2018.
- LAMIEN, B.; BARRETO ORLANDE, H. R.; ENRIQUE ELIÇABE, G. Particle Filter and Approximation Error Model for State Estimation in Hyperthermia. **Journal of Heat Transfer**, v. 139, n. 1, p. 012001, 1 jan. 2017.
- LAMIEN, Bernard; ORLANDE, Helcio RB. Approximation error model to account for convective effects in liquids characterized by the line heat source probe. In: **Proceedings of the 4th Inverse Problems, Design and Optimization Symposium**. Albi, France. 2013.
- LOIOLA, B. R.; ORLANDE, H. R. B.; DULIKRAVICH, G. S. Thermal damage during ablation of biological tissues. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, v. 73, n. 10, p. 685–701, 19 maio 2018.
- LOIOLA, Bruna R.; ORLANDE, Helcio RB; DULIKRAVICH, George S. Approximate Bayesian computation applied to the identification of thermal damage of biological tissues due to laser irradiation. **International Journal of Thermal Sciences**. v. 151, p. 106243, 2020.
- MAGALHÃES, Maycon CF. **Uso do modelo do erro de aproximação para estimativa de fluxo de calor na usinagem por brunimento**. Tese (Doutorado). Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2014.
- NISSINEN, A. et al. Compensation of errors due to discretization, domain truncation and unknown contact impedances in electrical impedance tomography. **Measurement Science and Technology**, v. 20, n. 10, p. 105504, 1 out. 2009.
- NISSINEN, A. **Modelling Errors in Electrical Impedance Tomography**. Dissertation in Forestry and Natural Sciences—Finland: University of Eastern Finland, 2011.
- ORLANDE, H. R. B. Inverse Problems in Heat Transfer: New Trends on Solution Methodologies and Applications. **Journal of Heat Transfer**, v. 134, n. 3, p. 031011, 2012.
- ORLANDE, Helcio RB. Inverse Problems in Heat Transfer: New Trends in Solution Methodologies and Applications. **ASME J. of Heat Transfer**. v. 134, p. 031011, 2012.
- OZISIK, M. N. **Heat Conduction**. John Wiley & Sons, 1993.
- ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. **Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications**. 2. ed. CRC Press, 2021.
- PENNES, HH. Analysis of tissue arterial blood temperature in the resting forearm. **Journal of Applied Physiology**. v. 1, n. 2, p. 93–122, 1948.
- PONTES, P. C. et al. Approximation error model (AEM) approach with hybrid methods in the forward-inverse analysis of the transesterification reaction in 3D-microreactors. **Inverse Problems in Science and Engineering**, v. 29, n. 11, p. 1586–1612, 2 nov. 2021.



ROJCZYK, MJ. et al. Inverse heat transfer problems: an application to bioheat transfer. **Computer Assisted Methods in Engineering and Science.** v.22, n. 4, p. 365-3823, 2017.

SILVA, NP. et al. (2021), Monte Carlo parameter estimation and direct simulation of in vitro hyperthermia-chemotherapy experiment. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications.** v. 80, n. 5, p. 185-209.