



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciência
Instituto Politécnico

Lucas da Silva Asth

**Estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos em
problemas de convecção-difusão em microcanais**

Nova Friburgo

2024

Lucas da Silva Asth

**Estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos em problemas de
convecção-difusão em microcanais**



Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Diego Campos Knupp, D.Sc.

Orientador: Prof. Leonardo Tavares Stutz, D.Sc.

Nova Friburgo

2024

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

A853 Asth, Lucas da Silva.
Estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos em
problemas de convecção-difusão em microcanais / Lucas da Silva
Asth - 2024.
95 f. : il.

Orientadores: Diego Campos Knupp e Leonardo Tavares Stutz.
Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado do Rio de
Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Calor - Transferência - Teses. 2. Modelos matemáticos -
Teses. 3. Problemas inversos (Equações diferenciais) - Teses. I.
Knupp, Diego Campos. II. Stutz, Leonardo Tavares. III.
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV.
Título.

CDU 519.6:536.24

Bibliotecária Fernanda Souza Cruz CRB7/7361

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta
dissertação, desde que citada a fonte.

Assinatura

Data

Lucas da Silva Asth

**Estimação de Parâmetros e Seleção de Classes de Modelos em Problemas de
Convecção-Difusão em Microcanais**

Dissertação apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 01 de Março de 2024.

Banca Examinadora:

Prof. Diego Campos Knupp, D.Sc. (Orientador)
Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Leonardo Tavares Stutz, D.Sc. (Orientador)
Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Luiz Alberto da Silva Abreu, D.Sc.
Instituto Politécnico - UERJ

Prof. Carlos Frederico Trotta Matt, D.Sc.
Centro de Pesquisas de Energia Elétrica - CEPEL

Nova Friburgo

2024

DEDICATÓRIA

À minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pelo dom da vida.

Agradeço aos meus pais, Luiz Carlos Asth e Neuza de Fátima da Silva Asth, pelo amor incondicional, pelo incentivo em cada etapa da minha vida, por serem exemplos e pilares na minha caminhada. Esta conquista é em grande parte de vocês! Também agradeço à minha irmã Lívia Asth e aos demais familiares por sempre estarem presentes.

À minha namorada e companheira, Yasmim Pereira, por todo o carinho, apoio e paciência. A cada dia, você me motiva a ser uma pessoa melhor.

Aos meus orientadores, Prof. Diego Campos Knupp e Prof. Leonardo Tavares Stutz, pelo apoio intelectual, pelo conhecimento transmitido e pelas contribuições significativas para minha formação como profissional. Por estarem sempre dispostos.

Ao Prof. Luiz Alberto da Silva Abreu, pelas colaborações proporcionadas, conversas construtivas e pelo suporte durante o período do mestrado.

A todos os professores e funcionários do Instituto Politécnico, meu agradecimento.

Agradeço à CAPES pela bolsa concedida inicialmente no curso de mestrado. O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Também agradeço à FAPERJ pela concessão da bolsa de Mestrado Nota 10.

Por fim, agradeço a todos os meus amigos da pós-graduação, em especial aos alunos Eduardo Classe, Adson Braga e Lucas Lopes, pelas inúmeras conversas, discussões e colaborações que foram essenciais durante o curso.

O sucesso é a soma de pequenos esforços repetidos dia após dia.

Robert Collier

RESUMO

ASTH, Lucas da Silva. *Estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos em problemas de convecção-difusão em microcanais*. 2024. 95 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

A análise da transferência de calor na microescala têm sido amplamente empregada nas últimas décadas devido aos avanços tecnológicos na indústria dos sistemas miniaturizados de transporte de fluidos. Neste trabalho são formulados e resolvidos, segundo a abordagem Bayesiana, problemas inversos de estimação de parâmetros e de seleção de classe de modelos em problemas de convecção-difusão em microcanais. O primeiro sistema físico de interesse é o resfriamento de uma fonte de calor simulando um processador por meio de um dissipador térmico com microcanal. No segundo problema que será analisado, é feita a modelagem de um microcanal, levando em consideração o escorregamento de velocidade (*slip flow*) e o salto de temperatura nas paredes. Os resultados, utilizando medidas simuladas de temperatura, mostram que o método utilizado é capaz de qualitativa e quantitativamente identificar o modelo mais plausível para diferentes problemas físicos no contexto da transferência de calor em microcanais.

Palavras-chave: transferência de calor; microcanais; seleção de classes de modelos; abordagem Bayesiana.

ABSTRACT

ASTH, Lucas da Silva. *Parameter estimation and model class selection in convection-diffusion problems in microchannels*. 2024. 95 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

The analysis of heat transfer at the microscale has been widely employed in recent decades due to technological advancements in the industry of miniaturized fluid transport systems. In this work, inverse problems of parameter estimation and model class selection in convection-diffusion problems in microchannels are formulated and solved using a Bayesian approach. The first physical system of interest involves cooling a heat source simulating a processor through a thermal dissipation system with microchannels. In the second problem to be analyzed, a microchannel is modeled, taking into account slip flow and temperature jump at the walls. The results, using simulated temperature measurements, show that the method employed is capable of qualitatively and quantitatively identifying the most plausible model for different physical problems in the context of heat transfer in microchannels.

Keywords: heat transfer; microchannel; modelo class selection; Bayesian approach.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Representação do problema físico	23
Figura 2 - Representação esquemática do problema físico	27
Figura 3 - Posições onde são realizadas as comparações na superfície do dissipador térmico	39
Figura 4 - Comparação das soluções - Regime estacionário	40
Figura 5 - Resíduo entre as soluções - Regime estacionário	40
Figura 6 - Comparação das soluções - Regime transiente	41
Figura 7 - Resíduo entre as soluções - Regime transiente	41
Figura 8 - Comparação das soluções dos modelos - Regime estacionário	42
Figura 9 - Resíduos entre as soluções dos modelos - Regime estacionário	43
Figura 10 - Comparação das soluções dos modelos - Regime transiente	43
Figura 11 - Posições onde são realizadas as medições experimentais simuladas	45
Figura 12 - h_i Estimado e Intervalos de Credibilidade (95%): Caso 1	47
Figura 13 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em $y = 0,001\text{m}$ e regime estacionário : Caso 1	48
Figura 14 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em $x = \frac{L_y}{2}\text{m}$ e regime estacionário: Caso 1	49
Figura 15 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1	49
Figura 16 - Estimação dos parâmetros do Caso 1 para a classe de modelo \mathcal{M}_1	51
Figura 17 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%): Caso 2	52
Figura 18 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) - Regime esta- cionário: Caso 2	53
Figura 19 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2	54
Figura 20 - Estimação dos parâmetros do Caso 2 para a classe de modelo \mathcal{M}_1	55
Figura 21 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%): Caso 3	56
Figura 22 - Respostas Estimadas e Intervalos de Credibilidade (95%) Regime Es- tacionário: Caso 2	57
Figura 23 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 3	58
Figura 24 - Estimação dos parâmetros do Caso 3 para a classe de modelo \mathcal{M}_2	59
Figura 25 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%) - Caso 4	60
Figura 26 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) - Regime esta- cionário: Caso 4	61

Figura 27 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 4	62
Figura 28 - Estimação dos parâmetros do Caso 4 para a classe de modelo \mathcal{M}_2 . . .	63
Figura 29 - Malhas de elementos finitos analisadas	64
Figura 30 - Comparação das soluções obtidas para cada uma das malhas de elementos finitos	64
Figura 31 - Fluxos de calor considerados para a geração dos dados experimentais sintéticos no problema	66
Figura 32 - Posição onde são tomadas as medições experimentais simuladas	68
Figura 33 - Fluxos estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1	70
Figura 34 - Campos de temperaturas estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1	71
Figura 35 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1	72
Figura 36 - Fluxos estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2	74
Figura 37 - Campos de temperaturas estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2	75
Figura 38 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2	76
Figura 39 - Configurações Iniciais do Estudo	83
Figura 40 - Parâmetros definidos	84
Figura 41 - Criação das geometrias	85
Figura 42 - Temperatura inicial	86
Figura 43 - Condição de contorno de convecção interna	87
Figura 44 - Condição de contorno de fluxo de calor	87
Figura 45 - Velocidade de entrada do fluido	88
Figura 46 - Malha de elementos finitos	88
Figura 47 - Perfil de temperatura ($z = L_z$ e $t = 300s$)	89
Figura 48 - Linha transversal em $\frac{L_x}{2}$	89
Figura 49 - Linha transversal em $\frac{L_y}{4}$	90
Figura 50 - Ponto em $\frac{L_x}{2}$ e $\frac{L_y}{16}$	90

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades termo-físicas da água e do polímero.	38
Tabela 2 - Parâmetros conhecidos	39
Tabela 3 - Modelos de referência para gerar os dados observados nos Casos 1, 2, 3 e 4.	44
Tabela 4 - Modelos utilizados nas inversões dos problemas relacionados ao dissipador de calor	45
Tabela 5 - Estimação do vetor de parâmetros incertos para os diferentes modelos considerados: Caso 1	46
Tabela 6 - Seleção de modelos: Caso 1	50
Tabela 7 - Estimação do vetor de parâmetros incertos para os diferentes modelos considerados: Caso 2	52
Tabela 8 - Seleção de modelos: Caso 2	54
Tabela 9 - Estimação dos parâmetros do vetor incerto para os diferentes modelos considerados - Caso 3.	56
Tabela 10 - Seleção de modelos: Caso 3	58
Tabela 11 - Estimação dos parâmetros do vetor incerto para os diferentes modelos considerados: Caso 4.	60
Tabela 12 - Seleção de modelos: Caso 4	62
Tabela 13 - Erros absolutos na análise de malha	65
Tabela 14 - Modelos considerados para o fluxo de calor $Q(X)$: Caso de referência 1.	66
Tabela 15 - Modelos considerados para o fluxo de calor $Q(X)$: Caso de referência 2.	67
Tabela 16 - Valores atribuídos aos parâmetros.	68
Tabela 17 - Média dos parâmetros estimados para cada modelo utilizado no processo de inversão: Caso 1	69
Tabela 18 - Seleção de modelos: Caso 1	72
Tabela 19 - Média dos parâmetros estimados para cada modelo utilizado no processo de inversão: Caso 2	73
Tabela 20 - Seleção de modelos Bayesiana: Caso de Referência 2	76

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MEMS	Microelectromechanical Systems
MCMC	Markov Chain Monte Carlo
TMCMC	Transitional Markov Chain Monte Carlo
HCPV	High Concentration Photovoltaics
EDL	Electroosmotic Drag Layer
MAP	Maximum a Posteriori
DCM	Dynamic Causal Model
fMRI	Functional Magnetic Resonance Imaging
FTCS	Forward Time Centered Space
MDF	Método de Diferenças Finitas
PD	Problema Direto
PI	Problema Inverso
CI	Intervalo de Credibilidade

LISTA DE SÍMBOLOS

x, y, z	Coordenadas espaciais
X, Y	Coordenadas espaciais adimensionais
L_x, L_y, L_z	Dimensões da placa
k_p	Condutividade térmica da placa
k_f	Condutividade térmica do fluido
r	Raio
u	Velocidade média do fluido
f_f	Fator de forma do microcanal
R_i	Raio do microcanal
C_{pf}	Calor específico do fluido
ρ	Densidade
ρ_f	Densidade do fluido
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
q_w	Fluxo de calor
h_e	Coefficiente de transferência de calor externo
h_i	Coefficiente de transferência de calor interno
Q	Vazão
α	Difusividade térmica
α_t	Coefficiente de acomodação térmica
α_m	Coefficiente de acomodação de momento tangencial
L	Comprimento do microcanal
d	Altura do microcanal
Θ	Temperaturas adimensionais
B_i	Número de Biot
$U(Y)$	Perfil de velocidade adimensional
$Q(X)$	Fluxo de calor adimensional
λ	Dimensão na direção y
K_n	Número de Knudsen
β_t	Coefficiente de salto de temperatura
β_v	Coefficiente de deslizamento de velocidade
Pr	Número de Prandtl
p	Densidade de probabilidade proposta
θ	Vetor de parâmetros
\mathcal{M}	Modelo proposto
D	Vetor de dados experimentais

W	Matriz de covariância
q_j	Estágio do TMCMC
N_d	Número de medições experimentais
N_s	Número de amostras do TMCMC
w	Plausibilidade das amostras TMCMC

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	15
1	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
1.1	Escoamento e Transferência de Calor em Microcanais	18
1.2	Problemas Inversos e Inferência Bayesiana	20
1.3	Seleção de Classe de Modelos	21
2	PROBLEMA CONJUGADO DE UM DISSIPADOR DE CALOR COM MICROCANAL	23
2.1	Modelo Matemático	23
3	CONVECÇÃO INTERNA EM UM MICROCANAL EM REGIME DE <i>SLIP-FLOW</i>	27
3.1	Modelo Matemático	27
4	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO	30
4.1	Estimação de Parâmetros	30
4.2	Seleção de Classe de Modelos	31
4.3	Transitional Markov Chain Monte Carlo	33
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	38
5.1	Dissipador de Calor com Microcanal	38
5.1.1	<u>Problema Inverso: Seleção de Classe de Modelos</u>	44
5.1.2	<u>Caso 1</u>	46
5.1.3	<u>Caso 2</u>	51
5.1.4	<u>Caso 3</u>	55
5.1.5	<u>Caso 4</u>	59
5.2	Convecção Interna Em Um Microcanal Em Regime de <i>Slip-Flow</i> 63	
5.2.1	<u>Problema Inverso: Seleção de Classe de Modelos</u>	65
5.2.2	<u>Caso 1</u>	68
5.2.3	<u>Caso 2</u>	72
	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	77
	REFERÊNCIAS	79
	APÊNDICE A – Implementação no COMSOL Multiphysics	83
	APÊNDICE B – Discretização por Diferenças Finitas	91
	APÊNDICE C – Estimador da Evidência de Modelo	94

INTRODUÇÃO

Motivação

Os microcanais desempenham um papel crucial nos sistemas miniaturizados de transporte de fluidos. Tais aplicações são referidas como Sistemas Microeletromecânicos (MEMS). Eles encontram utilidade em diversas áreas, como refrigeração microeletrônica, compressores digitais microscópicos, micro-reatores, sistemas de controle de fluidos em alta frequência, tecnologia de células a combustível, câmaras de reação bioquímica, detectores infravermelhos, lasers de diodo e equipamentos médicos (Motamedian; Rahmati, 2020). Com tantas potenciais aplicações, a necessidade de compreender os fenômenos físicos, além de desenvolver novos modelos, correlações e metodologias de solução, tem-se observado um crescente interesse por parte da comunidade científica no campo dos fenômenos de transferência de calor e mecânica dos fluidos em microescala (Cotta; Knupp; Naveira-Cotta, 2016).

Uma aplicação de notável interesse para este tipo de sistema está na indústria dos microprocessadores, que evolui de maneira constante, produzindo um aumento significativo na densidade de transistores em um único chip, acompanhando até o momento a Lei de Moore (1965). Isso resulta diretamente em um aumento na capacidade de processamento de dados - que juntamente com a miniaturização dos dispositivos - resulta em uma maior geração de calor através do Efeito Joule (elevando a temperatura dos componentes), o que pode levar a um maior número de falhas e uma redução na vida útil global dos sistemas (Mercone et al., 2005). Por conseguinte, o desenvolvimento de equipamentos capazes de auxiliar a dissipação de calor em microprocessadores torna-se necessário para que a evolução tecnológica na área possa continuar. O resfriamento líquido se mostra um método eficaz para substituir a refrigeração convencional por ar, lidando com as crescentes densidades de calor dos microprocessadores atuais e futuros (Sharma et al., 2012). Dissipadores térmicos com microcanais são atualmente reconhecidos como uma estratégia efetiva para a implementação de sistemas de resfriamento líquido em dispositivos eletrônicos. Os relatos experimentais de Tuckerman e Pease (1981) mostram ótimos resultados para dissipação de calor obtida através de um dissipador com microcanais, alcançando uma densidade máxima de dissipação de potência de 790 W/cm^2 com uma resistência térmica de $0,1 \text{ }^\circ\text{C cm}^2/\text{W}$.

Neste contexto, a modelagem matemática/computacional de sistemas envolvendo microcanais torna-se também tópico de notável interesse, permitindo a análise de maior quantidade de resultados de maneira mais rápida e menos custosa. Assim, é natural o surgimento de diferentes modelos que buscam representar o sistema de interesse, visando otimizar a correspondência com os dados experimentais observados.

A comparação e seleção de modelos são fundamentais para o processo científico, pois permitem a avaliação de diferentes hipóteses sobre como os dados são causados (Pitt; Myung, 2002). Nesse contexto, a abordagem Bayesiana tem sido amplamente utilizada para lidar com a complexidade inerente à seleção de modelos em diversos campos da engenharia, já que essa estratégia também possibilita a integração de incertezas associadas aos parâmetros do problema em questão.

No contexto da estatística Bayesiana, o objetivo é incorporar dados disponíveis para reduzir a incerteza presente em um problema de inferência ou tomada de decisão (Colaço et al., 2012). Quando novas informações são obtidas, elas são integradas às informações prévias usando o Teorema de Bayes. Uma ferramenta amplamente aplicada nesse contexto são os Métodos de Monte Carlo, que representam a posteriori em termos de amostras aleatórias e seus pesos associados. Um método particularmente útil para a seleção de modelos é o Método de Monte Carlo via Cadeia de Markov Transicional (TMCMC), devido a sua característica de conseguir estimar a evidência do modelo e realizar comparações entre eles sem custos computacionais adicionais.

Objetivos

Este trabalho possui como objetivo o estudo de dois problemas envolvendo convecção-difusão em microcanais. O primeiro problema aborda o resfriamento de uma fonte de calor, que simula um processador, por meio de um dissipador térmico com um microcanal. Compreender o coeficiente de transferência de calor por convecção do fluxo de fluido no microcanal é de grande importância na modelagem de tal sistema. Segundo Tuckerman e Pease (1981), o coeficiente de transferência de calor convectivo h entre o substrato e o fluido refrigerante foi identificado como o principal obstáculo para alcançar baixa resistência térmica. Para o fluxo laminar em canais confinados, h varia inversamente com a largura do canal, tornando canais microscópicos desejáveis. Assim, o objetivo neste primeiro caso é aplicar o método TMCMC junto à seleção de classe modelos para acessar o modelo mais plausível em relação a este parâmetro de interesse. Serão analisadas diferentes situações onde o coeficiente estudado apresenta variações funcionais distintas.

O segundo problema considera um modelo mais detalhado de um microcanal, levando em consideração o escorregamento de velocidade (*slip flow*) e o salto de temperatura nas paredes - parâmetros importantes na análise em microescala. O objetivo neste caso é a identificação do modelo mais plausível para o fluxo de calor com variação espacial imposto em uma das faces do microcanal.

Organização do Trabalho

No capítulo 1 apresenta-se uma revisão bibliográfica sobre assuntos pertinentes e relacionados com o presente trabalho. Buscaram-se referências que tratam de diferentes modelos e técnicas de solução em problemas de convecção-difusão em microcanais. Foram estudados também trabalhos que utilizam da estatística Bayesiana para solução de problemas inversos em transferência de calor, assim como referências que abordam a seleção de modelos Bayesiana em um contexto mais geral.

No capítulo 2 é detalhado um modelo físico matemático para o problema direto de convecção-difusão de calor bidimensional transiente em um dissipador térmico com microcanais.

No capítulo 3 é detalhado um modelo físico matemático para o problema direto de convecção-difusão de calor bidimensional estacionário de um fluxo de massa forçado em um microcanal, levando em consideração o regime de escorregamento (*slip-flow*).

No capítulo 4 são apresentadas a formulação e a metodologia de solução do problema inverso utilizando o Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov Transicional (TMCMC). No contexto do método utilizado, a seleção de classe de modelos também é discutida.

No capítulo 5 são apresentados e discutidos os resultados dos problemas direto e inverso obtidos para o dissipador de calor com microcanais assim como no problema referente ao escoamento em um microcanal em regime de *slip-flow*.

O capítulo 5.2.3 apresenta as conclusões do trabalho, contrastando o que foi realizado com possíveis futuros avanços.

1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O presente capítulo tem por objetivo conduzir uma revisão de literatura que permeia a interseção entre transferência de calor, escoamento em microcanais, problemas inversos e seleção de classe de modelos, com intuito de fornecer uma compreensão abrangente dos avanços, desafios e abordagens referentes ao tema oferecendo uma base sólida para o desenvolvimento e contextualização do presente trabalho.

1.1 Escoamento e Transferência de Calor em Microcanais

Tuckerman e Pease (1981) realizaram um estudo pioneiro na concepção de um microdissipador de calor resfriado a água aplicado no resfriamento de circuitos integrados de silício, obtendo excelentes resultados na dissipação de calor em tais sistemas. Uma análise teórica-experimental foi feita e os autores demonstraram que as sugestões de que os limites físicos da tecnologia de transferência de calor (restringidas a uma densidade de potência de conjuntos de circuitos planares a cerca de 20 W/cm^2) pode ser ultrapassada de maneira significativa através do dimensionamento de trocadores de calor resfriados por líquido em dimensões microscópicas. Foi então alcançando um aumento máximo de temperatura do substrato de 71° acima da temperatura da água de entrada a uma densidade de dissipação de potência de 790 W/cm^2 . Peng e Peterson (1996) Investigaram a transferência de calor por convecção forçada de fase única e as características do fluxo de água no microcanal. Os resultados mostraram que a configuração geométrica afetou significativamente a transferência de calor por convecção de fase única e as características do fluxo. Vafai e Zhu (1999) propuseram um novo conceito de dissipador de calor de microcanal de duas camadas com arranjo de fluxo contracorrente para resfriamento dos componentes eletrônicos. A análise de desempenho térmico e distribuição de temperatura foi realizada, e um procedimento para otimização dos parâmetros de *design* geométrico é apresentado. Os resultados indicam que o projeto de dissipador de calor de microcanal de duas camadas é uma melhoria substancial em relação ao convencional de uma camada. Koo et al. (2005) analisaram o resfriamento de circuitos tridimensionais (3D) por meio de uma rede de microcanais integrada. Os resultados apresentados indicam que uma camada de resfriamento integrado por microcanais pode remover densidades de calor de até 135 W/cm^2 dentro de uma arquitetura 3D, com uma temperatura máxima de circuito de 85°C .

Sharma et al. (2012) trabalharam no desenvolvimento de uma abordagem na determinação das condições operacionais ideais em microprocessadores refrigerados a água por meio de um equilíbrio entre a recuperação de calor do refrigerante e a confiabilidade

térmica do chip. Guerrieri e Naveira-Cotta (2014) estudaram a aplicação de microdissipadores térmicos no resfriamento de células fotovoltaicas de alta concentração (HCPV). A maioria dos sistemas HCPV comerciais se baseia em sistemas passivos de resfriamento a ar, especialmente devido à sua simplicidade e robustez. No entanto, os autores propuseram uma abordagem alternativa para remover o calor de maneira mais eficiente da célula fotovoltaica, substituindo o sistema passivo de resfriamento a ar por um sistema ativo de resfriamento a água, permitindo também o reuso do calor removido em um circuito secundário para outros fins, como a dessalinização da água.

Knupp, Naveira-Cotta e Cotta (2014) realizaram um estudo numérico-experimental de dissipadores de calor feitos a partir de um substrato nanocompósito com múltiplos microcanais moldados longitudinalmente. Foi proposta uma metodologia para a solução de problemas de transferência de calor conjugada de convecção-condução, frequentemente relevantes na análise de microsistemas térmicos. Essa metodologia é baseada em uma formulação de domínio único e na resolução do problema resultante por meio de transformadas integrais, que se mostrou muito eficiente exibindo ótima concordância entre a solução computacional e os dados experimentais. Os autores continuaram os esforços no estudo de problemas relacionados a microdissipadores térmicos, estendendo a metodologia para lidar com canais de geometrias arbitrárias e configurações complexas com múltiplos canais (Knupp; Cotta; Naveira-Cotta, 2015).

Avanços recentes visam aprimorar a geometria dos canais com objetivo de minimizar a queda de pressão assim como aumentar a taxa de transferência de calor. Shi et al. (2019) utilizaram um algoritmo de otimização multiobjetivo para encontrar a melhor geometria de dissipador de calor com o design de canal de fluxo secundário. O microcanal otimizado reduziu a potência de bombeamento e a resistência térmica em 23% e 29%, respectivamente. Abo-Zahhad et al. (2022) investigaram o efeito da inserção de uma malha metálica estruturada em tamanho micro no fluxo laminar sobre o desempenho da transferência de calor em sistemas com microcanais. Essas inserções metálicas visam desenvolver um fluxo secundário que melhora a transferência de calor e reduz a má distribuição do fluxo, removendo possíveis "hot spots". Essas inserções podem ser fabricadas de forma monolítica dentro do canal de fluxo durante a fabricação com o uso da tecnologia de impressão 3D de metal. Os resultados mostraram que o uso de inserções microscópicas no microcanal melhoram a transferência de calor em comparação com o canal convencional sem inserções de micro metal. Por exemplo, o uso de inserções microscópicas na parte inferior da parede aquecida do microcanal alcançou um aumento médio de uniformidade de 86,6% em comparação com o caso liso convencional. Além disso, em $Re = 2000$, a não uniformidade da temperatura diminuiu de 48 °C para o caso liso para 4,7 °C para o caso com o uso de inserções de metal cobrindo dois terços da parede aquecida inferior. Xiang et al. (2022) analisaram o impacto de dissipadores com estrutura de favo de mel formados por hexágonos regulares. Concluíram que o dissipador de calor de microcanal

desenvolvido possui desempenho de resfriamento superior ao dissipador de calor sólido de metal convencional e encontraram os melhores parâmetros estruturais para estes, sendo a distância entre favos de mel adjacentes de 2 mm, a profundidade do favo de mel de 0,5 mm e o circunraio do hexágono regular de 8 mm.

É notável, portanto, o grande interesse da comunidade científica no que tange aos sistemas miniaturizados de transporte de fluidos, especialmente nas aplicações envolvendo Sistemas Microeletromecânicos. Assim, a continuidade desses esforços de pesquisa é crucial para impulsionar avanços que não apenas otimizem o desempenho destes dispositivos, mas também abram caminho para inovações impactantes em várias áreas tecnológicas.

1.2 Problemas Inversos e Inferência Bayesiana

Os desafios associados aos problemas inversos em transferência de calor concentram-se principalmente na estimativa de parâmetros desconhecidos presentes nas formulações matemáticas de fenômenos físicos relacionados às ciências térmicas. Esse processo envolve a utilização de medições, tais como fluxo de calor, temperaturas, intensidades de radiação, entre outros. A análise inversa pode ser aplicada de forma abrangente, resolvendo uma variedade de problemas, desde a determinação de termos constantes até a estimativa de funções que variam no espaço e no tempo (Orlande, 2012).

Dentre as obras literárias clássicas sobre problemas inversos em transferência de calor, destacam-se Ozisik e Orlande (2021), Orlande (2012), onde conceitos fundamentais sobre problemas inversos de condução de calor são explorados e diferentes técnicas de solução são apresentadas.

A abordagem Bayesiana fornece uma estrutura sólida para lidar com a incerteza, pois tenta integrar informações prévias em suas estimativas. Quando novas informações são obtidas, elas serão combinadas com toda informação precedente por meio do teorema de Bayes (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande 2012; Ozisik e Orlande 2021).

Diversas publicações dedicadas à formulação e resolução de problemas relacionados ao fluxo de calor e massa em microescala foram concentradas na compreensão das discrepâncias identificadas entre os resultados experimentais em microescala e as correlações e simulações em macroescala. Morini (2004) realizou uma revisão bibliográfica extensa na comparação dos resultados experimentais mencionados na literatura aberta. Em múltiplos casos, observa-se discordância entre os dados experimentais do fator de atrito e do número de Nusselt em microcanais em relação à teoria convencional, e esses dados também aparentam ser inconsistentes entre si. Variadas razões foram sugeridas para explicar tais discrepâncias, incluindo efeitos de rarefação e compressibilidade, dissipação viscosa, efeitos eletrosmóticos (EDL), variações de propriedades, condições superficiais do canal (rugosidade relativa) e incertezas experimentais, todos evocados para elucidar

o comportamento anômalo dos mecanismos de transporte em microcanais. Dentre as diferentes modificações de modelos propostas para descrever de maneira mais adequada o fluxo de fluido e a transferência de calor em microcanais, a consideração do escoamento com deslizamento (*slip flow*) em oposição à condição clássica de não deslizamento (*no-slip*) tem sido objeto de inúmeras investigações (Silva et al., 2020). A simulação precisa de tais problemas, no entanto, depende da determinação acurada dos coeficientes de acomodação de momento e térmico, essenciais para as condições de contorno de deslizamento e salto de temperatura proporcionadas pelo modelo de escoamento de *slip flow*, que leva em consideração os efeitos não contínuos nas interações entre o fluido e a superfície (Zhang; Meng; Wei, 2012). Embora haja alguns trabalhos experimentais na literatura que abordam medições do coeficiente de acomodação de momento tangencial (Agrawal; Prabhu, 2008), evidenciando sua dependência da limpeza e rugosidade da superfície, poucos resultados estão disponíveis para a medição do coeficiente de acomodação térmica (Rader et al., 2005; Bayer-Buhr et al. 2022; Yamaguchi et al. 2022).

Dessa maneira, a solução de problemas inversos na estimativa de tais coeficientes se mostra uma alternativa viável e importante no estudo desses sistemas. Além disso, empregando uma abordagem Bayesiana pode-se aproveitar as informações a priori geralmente disponíveis para o coeficiente de acomodação de momento tangencial e o número de Biot na parede externa. Por exemplo, Silva et al. (2020) trabalharam com a estimativa do coeficiente de salto de temperatura, o coeficiente de deslizamento de velocidade e o número de Biot, utilizando a técnica Bayesiana de *Maximum a posteriori* (MAP) com medições externas de temperatura onde uma investigação numérica abrangente de possíveis configurações experimentais foi realizada para verificar a influência do número de Biot, espessura da parede e número de Knudsen na precisão da estimativa dos parâmetros desconhecidos.

1.3 Seleção de Classe de Modelos

A seleção de modelos Bayesiana fornece uma abordagem fundamentada e probabilística para escolher entre modelos alternativos, incorporando incerteza de maneira explícita. Essa abordagem é particularmente útil quando há vários modelos candidatos e incerteza considerável sobre qual modelo é o mais apropriado para os dados observados.

No campo da dinâmica estrutural, Raftery (1993) propuseram a seleção de modelos Bayesianos para classes de modelos de equações estruturais, que é ampla, e sua generalidade torna desafiadora a seleção de modelos. No entanto, eles apresentam resultados adequados, demonstrando outra aplicação do método no mundo real. Outros trabalhos relacionados a este campo podem ser encontrados em (Muto; Beck, 2008; Beck, 2010). Stephan et al. (2009) empregaram a seleção de modelos Bayesiana em estudos de

grupo envolvendo a comparação de modelos aplicados à neuroimagem, especificamente em Modelos Causais Dinâmicos (DCMs) para Imagem por Ressonância Magnética Funcional (fMRI). O DCM permite a criação de modelos matemáticos que descrevem como as conexões entre as regiões cerebrais podem mudar ao longo do tempo, proporcionando *insights* sobre os processos causais subjacentes à atividade cerebral observada. He e Ng (2017) demonstraram a aplicação desse enfoque de seleção de modelos para a identificação e quantificação de múltiplas fissuras em estruturas semelhantes a vigas usando o TMCMC, mostrando resultados excelentes tanto para dados experimentais simulados quanto para dados experimentais reais.

Toni e Stumpf (2010) desenvolveram uma abordagem de seleção de modelo baseado em computação bayesiana aproximada e utilizando amostragem sequencial de Monte Carlo. Mostraram que essa abordagem pode ser aplicada em uma ampla gama de cenários biológicos, e ilustram seu uso em dados reais descrevendo a dinâmica da influenza e a via de sinalização JAK-STAT.

Berger et al. (2020) investigam a confiabilidade de oito modelos relativos à curva de sorção de um material de fibra de madeira. A curva de sorção é uma característica essencial para a modelagem de transferência de calor e massa em materiais porosos de construção. Vários modelos foram propostos na literatura para representar a quantidade de umidade no material de acordo com o nível de atividade da água (ou pressão capilar). Esses modelos são baseados em expressões analíticas e em poucos parâmetros que precisam ser estimados por análise inversa.

Cardoso et al. (2022) trabalharam com objetivo de aplicar a técnica de Aproximação Bayesiana Computacional para estimar parâmetros e selecionar modelos que descrevem a dinâmica de células importantes que representam o HIV. A técnica foi verificada e se mostrou ser robusta o suficiente para estimar parâmetros e selecionar o melhor modelo simultaneamente.

Portanto, nota-se a versatilidade da abordagem Bayesiana de seleção de classe de modelos para uma grande variedade de problemas complexos. Neste trabalho diferentes modelos serão considerados para parâmetros essenciais na modelagem de problemas de condução-convecção em microcanais. Esses parâmetros podem possuir variações espaciais com formas funcionais variadas, e o objetivo será então, identificar através de dados simulados de temperatura o modelo mais plausível para estes coeficientes.

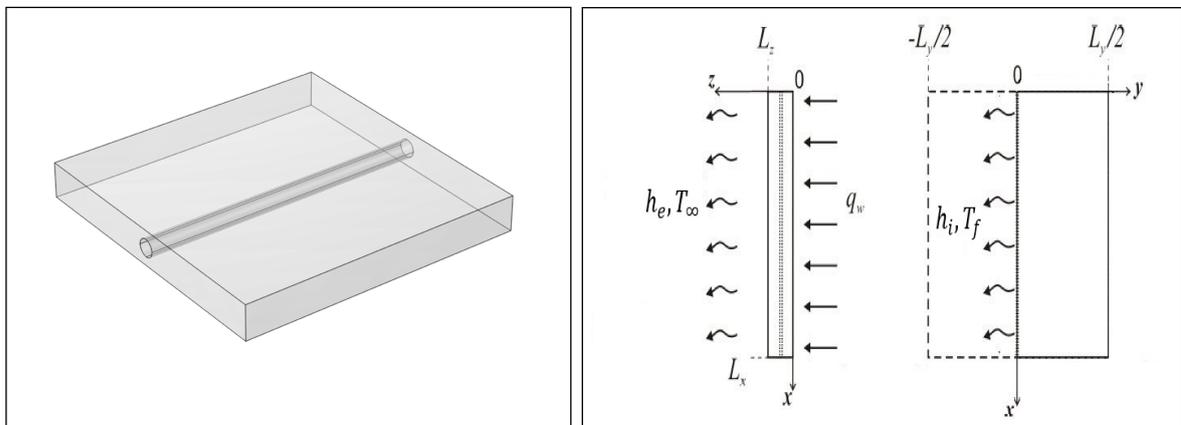
2 PROBLEMA CONJUGADO DE UM DISSIPADOR DE CALOR COM MICROCANAL

Neste capítulo será apresentada a modelagem matemática de um dissipador de calor com um microcanal, que será o primeiro sistema físico de estudo deste trabalho. A seguir serão detalhadas as equações utilizadas assim como as simplificações propostas para o problema.

2.1 Modelo Matemático

O fenômeno físico estudado consiste no aquecimento de uma placa polimérica com um único microcanal, através de uma resistência elétrica que simula um microprocessador. A modelagem desse fenômeno leva em conta o problema de convecção forçada no interior do microcanal e o problema de convecção externa nas paredes, em conjunto com o problema de condução de calor na matriz do dissipador. A Figura 1 representa de forma esquemática o modelo físico do problema conjugado de convecção-difusão na placa. É considerada uma placa de poliéster, com dimensões laterais L_x e L_y e espessura L_z . A placa está sujeita a um fluxo de calor uniforme e constante q_w , aplicado em sua face inferior ($z = 0$), enquanto sua face superior ($z = L_z$), troca calor por convecção natural com o ambiente. Os demais contornos da placa trocam calor por convecção com o ambiente. Deve-se enfatizar que, em $z = L_z$, a troca de calor ocorre apenas por convecção, sendo o termo radiativo desconsiderado.

Figura 1 - Representação do problema físico



(a) Representação geométrica da placa com microcanal

(b) Representação esquemática do problema de transferência de calor

Fonte: O autor, 2023.

De maneira a simplificar o problema, foi assumida simetria em relação ao plano xz . No modelo simplificado, considera-se a placa termicamente fina, de modo a se desprezar a direção z a partir de uma formulação de parâmetros concentrados (*lumped analysis*) (Cotta; Mikhailov, 1997). Assim, o problema de escoamento no microcanal é modelado através de uma condição de contorno de terceiro tipo, com coeficiente de transferência de calor $h_i(x)$, como indicado na Figura 1b. Logo, o modelo bidimensional simplificado que descreve a temperatura na placa pode ser escrito como

$$\rho c_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial t} = k_p \left(\frac{\partial^2 T_p(x,y,t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_p(x,y,t)}{\partial y^2} \right) + \frac{q_w}{L_z} - \frac{h_e}{L_z} (T_p(x,y,t) - T_\infty) \quad t > 0; 0 < x < L_x; 0 < y < \frac{L_y}{2} \quad (1)$$

onde T_p é a temperatura média da placa ao longo de sua espessura, k_p é a condutividade térmica da placa, h_e é o coeficiente de troca térmica por convecção entre a superfície da placa e o meio externo, $h_i(x)$ é o coeficiente de troca térmica por convecção entre a face do microcanal e o escoamento interno, T_f é a temperatura do fluido em escoamento no microcanal, T_∞ é a temperatura ambiente, T_0 é a temperatura inicial da placa, ρ , c_p são a densidade e o calor específico da matriz do dissipador, respectivamente, e q_w é o fluxo de calor imposto pela resistência elétrica na superfície inferior da placa.

As condições de contorno são definidas como

$$k_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = h_e (T_p(x,y,t) - T_\infty) \quad (2a)$$

$$k_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial x} \Big|_{x=L_x} = h_e (T_\infty - T_p(x,y,t)) \quad (2b)$$

$$k_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial y} \Big|_{y=0} = f_f h_i(x) (T_p(x,0,t) - T_f(x,t)) \quad (2c)$$

$$k_p \frac{\partial T_p(x,y,t)}{\partial y} \Big|_{y=\frac{L_y}{2}} = h_e (T_\infty - T_p(x,y,t)) \quad (2d)$$

$$(2e)$$

e a condição inicial é dada por

$$T_p(x,y,t=0) = T_0 \quad (3)$$

O coeficiente f_f representa um fator de forma, responsável por corrigir a aproximação da superfície de contato do escoamento com a placa, calculado através da razão da área superficial do semi-cilindro (metade do microcanal) e a área da seção transversal

da placa.

$$f_f = \frac{\pi R_i}{L_z}$$

onde R_i representa o raio do microcanal.

A equação diferencial que modela a distribuição de temperaturas no fluido, que escoia em regime laminar no interior do microcanal, é dada por

$$\rho C_{pf} \left(\frac{\partial T_f(x,r,t)}{\partial t} + u(r) \frac{\partial T_f(x,r,t)}{\partial x} \right) = k_f \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_f(x,r,t)}{\partial r} \right) \quad (4)$$

$$t > 0; 0 < x < L_x; 0 < r < R_i$$

onde $u(r)$ é o perfil parabólico da velocidade plenamente desenvolvida. Um modelo unidimensional simplificado para a evolução da temperatura no interior do microcanal é proposto, começando pela definição da temperatura média de mistura do fluido:

A condições de contorno são definidas como

$$T_f(x=0, r, t) = T_{in} \quad (5a)$$

$$\left. \frac{\partial T_f(x, r, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (5b)$$

$$T_f(x, r = R_i, t) = T_p(x, y = 0, t) \quad (5c)$$

e a condição inicial é dada por

$$T_f(x, r, t = 0) = T_{f,0}(x, r) \quad (6)$$

$$T_{f,b}(x, t) = \frac{2\pi \int_0^{R_i} ru(r) T_f(x, r, t) dr}{2\pi \int_0^{R_i} ru(r) dr} = \frac{2}{\bar{u} R_i^2} \int_0^{R_i} ru(r) T_f(x, r, t) dr$$

Sendo os transientes na micro-escala muito pequenos, o primeiro termo da equação (4), relacionado ao acúmulo de energia no fluido é negligenciado e, aplicando o operador $\frac{2}{\bar{u} R_i^2} \int_0^{R_i} ru(r) (\cdot) dr$ nas equações (4), (5) e (6), obtém-se uma formulação clássica por parâmetros concentrados (*lumped analysis*) (Cotta; Mikhailov, 1997) para o problema de transferência de calor por convecção forçada, dada por:

$$\frac{\partial T_{f,b}(x, t)}{\partial x} = \frac{2h_i(x)}{\rho_f C_{pf} \bar{u} R_i} (T_p(x, 0, t) - T_f(x, t)), \quad t > 0; 0 < x < L_x \quad (7)$$

$$T_{f,b}(x = 0, t) = T_{in} \quad (8)$$

onde $h_i(x)$ é o coeficiente de troca térmica por convecção, considerando o escoamento plenamente desenvolvido no canal, e \bar{u} representa a velocidade média do escoamento (Pletcher; Tannehill; Anderson, 2012), dada por:

$$\bar{u} = \frac{Q}{\pi R_i^2} \quad (9)$$

onde Q é a vazão volumétrica no microcanal.

Solucionando as equações apresentadas, obtém-se o campo de temperaturas $T_p(x, y, t)$. Pretende-se então resolver o problema inverso de estimação de parâmetros e seleção de classe de modelos em relação ao coeficiente $h_i(x)$. Serão utilizadas medições simuladas de temperatura tomadas na superfície superior da placa, obtidas através do acréscimo de um ruído gaussiano com média zero e desvio padrão $0,3 \text{ }^\circ\text{C}$ na solução do modelo. Essas medições simulam a aquisição de dados feitas a partir de uma câmera termográfica no caso de um experimento real.

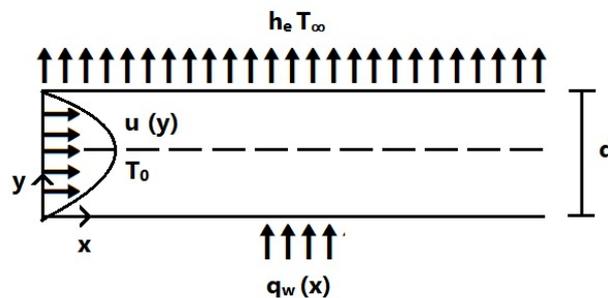
3 CONVECÇÃO INTERNA EM UM MICROCANAL EM REGIME DE *SLIP-FLOW*

Neste caso o regime de *slip-flow* é considerado, o que significa levar em conta a velocidade de escorregamento e o salto de temperatura nas paredes. A seguir, será descrita uma formulação adimensional do problema em questão baseada no modelo previamente apresentado em Naveira-Cotta, Cotta e Orlande (2010) com o acréscimo do fluxo de calor com variação espacial como uma das condições de contorno.

3.1 Modelo Matemático

O problema objeto de estudo consiste em um fenômeno de convecção forçada em microescala entre placas paralelas dentro do regime de *slip-flow* (Kandlikar et al., 2005). O modelo é baseado em um fluxo gasoso laminar estacionário sob desenvolvimento térmico e um perfil de velocidade totalmente desenvolvido na entrada. O fluido troca calor por convecção com as paredes, que têm comprimento L , e d é a distância entre as placas. O problema está em estado estacionário, com a temperatura variando em um espaço bidimensional. Na face inferior é aplicado um fluxo de calor $q_w(x)$ que pode variar com a direção x . Os efeitos de condução axial, convecção livre e dissipação viscosa são negligenciados, e as propriedades físicas são assumidas como constantes. A Figura 2 ilustra uma representação esquemática do problema físico em questão.

Figura 2 - Representação esquemática do problema físico



Fonte: O autor, 2023.

A formulação adimensional que modela o fenômeno de transferência de calor em questão é dado por (Naveira-Cotta; Cotta; Orlande, 2010):

$$\frac{\partial^2 \Theta(X,Y)}{\partial Y^2} = U(Y) \frac{\partial \Theta(X,Y)}{\partial X} \quad \text{para, } 0 < Y < 1, X > 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial \Theta(X,Y)}{\partial Y} = \frac{B_i}{1 + K_n \beta_t B_i} \Theta(X,Y) \quad \text{para, } Y = 1, X > 0 \quad (11)$$

$$\frac{\partial \Theta(X,Y)}{\partial Y} = Q(X) \quad \text{para, } Y = 0, X > 0 \quad (12)$$

$$\Theta(X,Y) = \Theta_0 \quad \text{para, } 0 \leq Y \leq 1 \text{ e } X = 0 \quad (13)$$

as quantidades adimensionais B_i e K_n na Eq.(11) são, respectivamente, os números de Biot e Knudsen, sendo seus comprimentos característicos iguais a d , a distância entre as paredes. As quantidades β_t (coeficiente de salto de temperatura), e β_v (coeficiente de deslizamento de velocidade), estão relacionadas à perda de aderência à parede. Os grupos adimensionais são:

$$X = \frac{\alpha x}{u_m d^2} \quad (14)$$

$$Y = \frac{y}{d} \quad (15)$$

$$Q(X) = \frac{d}{k \Delta T_0} q_w(x) \quad (16)$$

$$\Theta(X,Y) = \frac{T(x,y) - T_\infty}{T_0 - T_\infty} \quad (17)$$

$$B_i = \frac{h_e d}{k} \quad (18)$$

$$K_n = \frac{\lambda}{2d} \quad (19)$$

$$U(Y) = \frac{u(y)}{u_m} \quad (20)$$

onde,

$$\beta_t = \frac{(2 - \alpha_t)}{\alpha_t} \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)} \frac{1}{Pr} \quad (21)$$

é o coeficiente de salto de temperatura na parede, e α_t é o coeficiente de acomodação térmica, λ é o caminho médio livre molecular, $\gamma = c_p/c_v$, sendo c_p o calor específico a pressão constante, c_v o calor específico a volume constante e Pr é o número de Prandtl.

O perfil de velocidade adimensional é dado por (Cotta; Knupp; Naveira-Cotta, 2016):

$$U(Y) = \frac{6K_n\beta_v + 6Y(1 - Y)}{1 + 6K_n\beta_v} \quad (22)$$

onde

$$\beta_v = \frac{(2 - \alpha_m)}{\alpha_m} \quad (23)$$

α_m é o coeficiente de acomodação de momento tangencial. Nestes grupos adimensionais, α é a difusividade térmica, u_m é a velocidade média, T é a temperatura do fluido e q_w é o fluxo de calor imposto na fronteira.

Solucionando as equações apresentadas, obtém-se o campo de temperaturas $\Theta(X, Y)$. Pretende-se então resolver o problema inverso de estimação de parâmetros e seleção de classe de modelos em relação ao coeficiente $Q(X)$. Serão utilizadas medições simuladas de temperatura tomadas na superfície superior do microcanal (em $Y = 1$), obtidas através do acréscimo de um ruído gaussiano com média zero e desvio padrão 0,05 na solução do modelo. Essas medições simulam a aquisição de dados feitas a partir de uma câmera termográfica no caso de um experimento real.

4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO

Neste capítulo serão introduzidos os conceitos básicos relacionados à formulação, segundo a abordagem Bayesiana, dos problemas inversos de estimação de parâmetros e de seleção de classe de modelos. Para a obtenção das amostras da densidade de probabilidade *a posteriori* dos parâmetros de interesse e também da evidência de cada classe de modelo considerada, foi utilizado o método de amostragem Transitional Markov Chain Monte Carlo (TMCMC). Uma breve descrição do método será também apresentada neste capítulo.

4.1 Estimação de Parâmetros

No presente trabalho, os problemas inversos de estimação de parâmetros são formulados segundo o formalismo da inferência bayesiana. Sendo assim, os parâmetros incertos de um dado modelo são considerados variáveis aleatórias e o objetivo reside em determinar a função de densidade de probabilidade *a posteriori* desses parâmetros. De acordo com o teorema de Bayes, a densidade de probabilidade *a posteriori* conjunta dos parâmetros incertos do modelo é dada por (Kaipio; Somersalo, 2006).

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M}) = \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})}{p(\mathcal{D}|\mathcal{M})} \quad (24)$$

onde $p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})$ é a função de verossimilhança, $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ é a função densidade de probabilidade *a priori* dos parâmetros e $p(\mathcal{D}|\mathcal{M})$ é a verossimilhança marginal (também denominada evidência do modelo), e é definida como.

$$p(\mathcal{D}|\mathcal{M}) = \int_{\Theta} p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})d\boldsymbol{\theta} \quad (25)$$

onde Θ representa o espaço de valores admissíveis para $\boldsymbol{\theta}$. Considerando os erros de medição como aditivos, independentes dos parâmetros incertos e seguindo uma distribuição Gaussiana, com média zero e matriz de covariância \mathbf{W} , a função de verossimilhança é dada por

$$p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_d}}\sqrt{\det \mathbf{W}}} \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathcal{D} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})]^T\mathbf{W}^{-1}[\mathcal{D} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})]\right) \quad (26)$$

onde N_d é o número de dados observados considerado na análise inversa, que corresponde

ao número de componentes tanto do vetor de resposta observado \mathcal{D} quanto do vetor de resposta $\mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ previsto pelo modelo.

Embora a Eq. (26) represente o modelo probabilístico completo para obtenção de informações sobre os parâmetros incertos do modelo, na maioria dos casos, ela é intratável analiticamente. Portanto, para se obter informações sobre a função densidade de probabilidade a *posteriori* dos parâmetros incertos, pode-se recorrer a métodos de amostragem, como os métodos de Monte Carlo via Cadeia de Markov (MCMC). No presente trabalho, o algoritmo de amostragem de Monte Carlo via Cadeia de Markov Transicional (*Transitional Markov Chain Monte Carlo*) foi utilizado para amostragem da função de densidade de probabilidade a *posteriori*.

4.2 Seleção de Classe de Modelos

Na inferência Bayesiana, a seleção de classe de modelos é uma abordagem probabilística que possibilita uma seleção parcimoniosa de uma classe de modelos, dentre um conjunto de diferentes classes, para a descrição da resposta um dado sistema. A comparação entre as diferentes classes de modelos leva em consideração a capacidade de descrição dos dados observados e a complexidade de cada classe (Mackay, 2003, Beck; Yuen, 2004). Seja \mathbf{M} um conjunto de diferentes classes de modelos que competem entre si para a descrição dos dados experimentais observados \mathcal{D}

$$\mathbf{M} = \{\mathcal{M}_0, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_{N_m}\} \quad (27)$$

onde N_m é o número de modelos considerado. De acordo com o teorema de Bayes, a probabilidade a *posteriori* de uma dada classe de modelo \mathcal{M}_j é dada por

$$P(\mathcal{M}_j|\mathcal{D}, \mathbf{M}) = \frac{p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)P(\mathcal{M}_j|\mathbf{M})}{\sum_{j=1}^{N_m} p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)P(\mathcal{M}_j|\mathbf{M})} \quad j = 0, 1, \dots, N_m \quad (28)$$

onde $P(\mathcal{M}_j|\mathbf{M})$ é a probabilidade a *priori* da classe de modelo \mathcal{M}_j e $p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)$ é a verossimilhança marginal, também denominada de evidência do modelo \mathcal{M}_j . De acordo com a Eq. 28, a probabilidade a *posteriori* de uma dada classe de modelos depende da sua evidência, que, conforme será demonstrado a seguir, automaticamente incorpora um compromisso entre a sua qualidade de ajuste aos dados observados e sua complexidade (Gull 1988; Beck e Yuen 2004; Ching 2005). Levando-se em consideração a Eq. (24), o logaritmo natural da evidência do modelo \mathcal{M}_j pode ser escrito como

$$\ln[p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)] = \ln[p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)] \int_{\Theta} p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)d\boldsymbol{\theta}_j \quad (29)$$

Como a evidência não depende de $\boldsymbol{\theta}_j$, ela pode ser incorporada na integral, e fazendo as substituições de acordo com o Teorema de Bayes, tem-se (Muto e Beck 2008):

$$\begin{aligned} \ln[p(\mathcal{D}|\mathcal{M}_j)] &= \int_{\Theta} \ln \left[\frac{p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}_j, \mathcal{M}_j)p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{M}_j)}{p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)} \right] p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)d\boldsymbol{\theta}_j \\ &= \int_{\Theta} \ln [p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}_j, \mathcal{M}_j)] p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)d\boldsymbol{\theta}_j \\ &\quad - \int_{\Theta} \ln \left[\frac{p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)}{p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{M}_j)} \right] p(\boldsymbol{\theta}_j|\mathcal{D},\mathcal{M}_j)d\boldsymbol{\theta}_j \end{aligned} \quad (30)$$

Observa-se que o logaritmo da evidência pode ser escrito como a diferença entre dois termos. O primeiro termo representa a média do logaritmo natural da verossimilhança, ponderada pela distribuição a *posteriori* dos parâmetros, e representa uma métrica de qualidade do ajuste do modelo \mathcal{M}_j aos dados experimentais. O segundo termo é conhecido como informação de Kullback-Leibler e representa o logaritmo natural da média da entropia relativa entre as densidades a *posteriori* e a *priori* dos parâmetros do modelo \mathcal{M}_j (Shannon, 1948; Kullback; Leibler, 1951). Este termo é sempre positivo e também pode ser entendido como o ganho de informação após observar os dados experimentais, atuando como o fator de Ockham por penalizar os modelos que pecam pelo excesso de complexidade. Portanto, de acordo com a Eq. 30, o logaritmo natural da evidência de uma dada classe de modelo é composto por um termo relacionado à qualidade de ajuste aos dados observados e um termo que penaliza sua complexidade.

Se a seleção de modelos fosse baseada apenas no termo de ajuste de dados, os modelos mais complexos, em geral, seriam preferidos quando comparados a modelos mais simples. No entanto, isso frequentemente leva ao superajuste dos dados e as previsões posteriores podem se tornar pouco confiáveis, uma vez que dependem excessivamente dos detalhes específicos dos dados utilizados para a atualização do modelo. A seleção de modelos Bayesiana, portanto, possui uma penalização incorporada contra modelos mais complexos nesse sentido. Como pode-se inferir por este capítulo, a evidência de modelo é usualmente desconhecida a *priori* e requer o cálculo de uma integral complexa e de dimensão elevada.

Para contornar tal problema, neste trabalho utiliza-se o método *Transitional Markov Chain Monte Carlo*, que fornece uma estimativa para a evidência de modelo, como um subproduto do algoritmo, sem custos computacionais adicionais. A dedução desta estimativa encontra-se no Apêndice C.

4.3 Transitional Markov Chain Monte Carlo

O TMCMC não realiza uma amostragem direta da densidade de probabilidade a *posteriori*, que em geral, é uma PDF de difícil explorabilidade. Ao invés disso, se amostram PDFs intermediárias, tal que, à medida com que se avançam os estados do algoritmo, as PDFs amostradas convergem para a PDF alvo. Devido a esta transição gradual e mais suave entre os estágios, o TMCMC é capaz de transicionar densidades de probabilidade a *priori* com geometrias simples (como densidades uniformes) para *posterioris* com geometrias complexas, como densidades multimodais ou pontiagudas. Além de gerar amostras da densidade de probabilidade a *posteriori* dos parâmetros de um dado modelo, o TMCMC fornece ainda uma estimativa da evidência da classe de modelos em questão.

O TMCMC inicia gerando N_s amostras independentes da densidade de probabilidade a *priori* $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ de uma classe de modelos \mathcal{M} . Nos estágios intermediários, as PDFs amostradas são gradualmente modificadas, de modo que, no último estágio do método, a densidade amostrada é a densidade alvo, ou seja, a *posteriori* $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M})$. Em um estágio j do método, a densidade de probabilidade amostrada é dada por

$$p_j(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M}) \propto p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j} \quad (31)$$

onde $q_j \in [0,1]$ é tal que $q_0 = 0 < q_1 < \dots < q_{m-1} < q_m = 1$, sendo m a quantidade total de estágios necessários para convergência do método. Conseqüentemente, é fácil verificar a partir da Eq. (31) que para $j = 0$, $p_0(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M})$ é a densidade a *priori* $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ e para $j = m$, $p_m(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M})$ se torna a distribuição a *posteriori* $p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}, \mathcal{M})$. Do estágio inicial do algoritmo um conjunto de N_s amostras é obtido a partir da PDF a *priori*, $\{\boldsymbol{\theta}_{0,1}, \boldsymbol{\theta}_{0,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{0,N_s}\}$. Em cada j -ésimo estágio do algoritmo, tem-se as amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{j,1}, \boldsymbol{\theta}_{j,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j,N_s}\}$ respectivas à j -ésima PDF intermediária e amostras da PDF intermediária seguinte, $\{\boldsymbol{\theta}_{j+1,1}, \boldsymbol{\theta}_{j+1,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{j+1,N_s}\}$, são obtidas por re-amostragem (Ching e Chen 2007; Ching e Wang 2016). Segundo Ching e Chen (2007) e Ching e Wang (2016) o processo de re-amostragem é feito considerando pesos de plausibilidades normalizados para cada k -ésima amostra

$$\bar{w}_{j,k} = \frac{w_{j,k}}{\sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k}} \quad (32)$$

onde $w_{j,k}$ é o k -ésimo peso de plausibilidade associado à k -ésima amostra no j -ésimo estágio do TMCMC, dado por

$$w_{j,k} = p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}_{j,k})^{(q_{j+1}-q_j)} \quad (33)$$

Sendo então \mathbf{w}_j o vetor contendo os pesos de plausibilidade em um estágio j , uma transição suave para o próximo estágio é alcançada pela escolha adequada do expoente q_{j+1} . Foi proposto por Ching e Chen (2007) a determinação de q_{j+1} , de modo que para o vetor \mathbf{w}_j , o coeficiente de variação (*coefficient of variation* - COV) dos valores dos pesos de plausibilidades seja igual a um limiar pré-determinado (adotado como 100% pelos autores). Dessa maneira, pode-se determinar q_{j+1} da seguinte forma

$$q_{j+1} = \arg \min(|COV_{\mathbf{w}_j} - v_t|) \quad (34)$$

onde v_t é o valor prescrito e $COV_{\mathbf{w}_j}$ é o coeficiente de variação dos pesos de plausibilidade, definido por

$$COV_{\mathbf{w}_j} = \frac{\sigma_{\mathbf{w}_j}}{\mu_{\mathbf{w}_j}} \quad (35)$$

onde $\mu_{\mathbf{w}_j}$ e $\sigma_{\mathbf{w}_j}$ são respectivamente, a média e o desvio padrão de \mathbf{w}_j .

Para cada estado re-amostrado é realizado um passo de Metropolis-Hastings. Para isso, um candidato é gerado com auxílio de uma distribuição Gaussiana centrada em uma amostra de índice l $[1, 2, \dots, N_s]$ do estágio anterior, selecionada aleatoriamente de acordo com a distribuição de probabilidades representada pelo de vetor de plausibilidade normalizados \mathbf{w}_j e matriz de covariância dada por

$$\boldsymbol{\Sigma}_j = \beta^2 \sum_{k=1}^{N_s} \left[\frac{w_{j,k}}{S_j N_s} (\boldsymbol{\theta}_{j,k} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{j+1})(\boldsymbol{\theta}_{j,k} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{j+1})^T \right] \quad (36)$$

com

$$\bar{\boldsymbol{\theta}}_{j+1} = \frac{\sum_{l=1}^{N_s} w_{j,l} \cdot \boldsymbol{\theta}_{j,l}}{\sum_{l=1}^{N_s} w_{j,l}} \quad (37)$$

em que $\bar{\boldsymbol{\theta}}_{j+1}$ é a média das amostras ponderadas pela plausabilidade e β é o fator de escala da matriz de covariância, cujo objetivo é regular a taxa de aceitação. A aceitação dos candidatos da cadeia gerada pelo movimento de Metropolis-Hastings, é realizada utilizando a razão de Hastings.

$$r_{MH} = \min \left[1, \frac{p_j(\boldsymbol{\theta}^* | \mathcal{D}, \mathcal{M})}{p_j(\boldsymbol{\theta}_{j,l}^c | \mathcal{D}, \mathcal{M})} \right] \quad (38)$$

em que $\boldsymbol{\theta}^*$ é o candidato e $\boldsymbol{\theta}_{j,l}^c$ é a amostra geradora.

Ao final do último estágio do TMCMC, amostrada a PDF alvo, a evidência do modelo é obtida considerando as médias dos pesos de plausibilidade registrados em cada estágio

$$S_j = \frac{1}{N_s} \sum_{k=1}^{N_s} w_{j,k} \quad (39)$$

e executando o produtório

$$p(\mathcal{D} | \mathcal{M}) = \prod_{j=1}^m S_j \quad (40)$$

O produtório de S_j como estimador da evidência de uma classe de modelos pode ser demonstrado conforme feito por Ching e Chen (2007), Ching e Wang (2016). Um passo a passo desta demonstração encontra-se no Apêndice C.

Portanto, vale destacar alguns pontos em relação ao método apresentado. Além de oferecer uma estimativa para a evidência de modelo como subproduto do algoritmo, uma vantagem do TMCMC está no fato de que o uso da Eq. 36 dispensa a necessidade de uma calibração manual da distribuição auxiliar, uma vez que se considera a covariância amostral dos estados em cada estágio do algoritmo (Ching e Wang 2016). Assim, apenas o fator de escala β deve ser escolhido de forma a manter uma taxa de aceitação razoável nos passos de MH. O fator $\beta = 0,2$, sugerido por Ching e Chen (2007), funciona bem em muitos casos, mas está longe de ótimo para muitos outros. Para contornar tal problema Betz, Papaioannou e Straub (2016) propuseram uma modificação no método TMCMC clássico implementando um ajuste adaptativo para β por meio de um sistema de *feedback controller* proposto em Catanach (2017) durante a amostragem dos estágios intermediários. O Algoritmo 1 apresenta um pseudocódigo para o TMCMC clássico e o Algoritmo 2 mostra a adaptação separadamente.

Algoritmo 1 Algoritmo TMCMC clássico

```

1: Faça  $j = 0$ ,  $q_0 = 0$  e  $CE = 1$ ; * $CE$  representa a variável para armazenamento da
   evidência de modelo
2: Obtenha  $N_s$  amostras  $\theta_0$  da priori, obtendo o conjunto  $\{\theta_{0,1}, \theta_{0,2}, \dots, \theta_{0,N_s}\}$ 
3: while  $q_j \neq 1$  do
4:    $j = j + 1$ 
5:   Calcule  $q_j$  de modo a minimizar a Eq. (34)
6:   if  $q_j > 1$  then
7:      $q_j = 1$ 
8:   end if
9:   Calcule a plausibilidade  $w_j$  conforme a Eq. (33)
10:  Obtenha a média aritmética  $S_j$  de  $w_j$ , com  $w_j = [w_{j,1}, w_{j,2}, \dots, w_{j,N_s}]^T$ 
11:  Calcule a média  $\bar{\theta}_{j+1}$  das amostras  $\theta_j$  ponderada pela plausibilidade (37)
12:   $CE = S_j \cdot CE$  (Atualiza a evidência de modelo)
13:  Calcule a matriz de covariância  $\Sigma_j$  por meio da Eq. (36)
14:   $\theta_j^c = \theta_j$ 
15:  for  $l^* = 1$  até  $N_s$  do
16:    Selecione  $l$  de  $\{1, \dots, N_s\}$ , com probabilidade  $w_j(N_s S_j)^{-1}$ 
17:    Proponha  $\theta^* \sim \mathcal{N}(\theta_{j,l}^c, \Sigma_j)$ 
18:    Obtenha  $r \sim \mathcal{U}(0, 1)$ 
19:    Calcule  $\alpha_j$  (Razão de Hastings)
20:    if  $r \leq \alpha_j$  then
21:       $\theta_{j,l}^c = \theta^*$ 
22:    end if
23:     $\theta_{j,l^*}^c = \theta_{j,l}^c$ 
24:  end for
25: end while

```

Algoritmo 2 Adaptação TMCMC

```

1: Faça  $\beta = 2.38/\sqrt{N_p}$  onde  $N_p$  é o número de parâmetros estimados
2: Faça  $t_{acr} = 0.21/N_p + 0.23$  onde  $t_{acr}$  é a taxa de aceitação alvo
3: Faça  $G = 2.1$  onde  $G$  é o amortecimento do feedback controller
4: Faça  $N_a = 100$  e  $n_a = 0$ 
5: ...
6: while  $q_j \neq 1$  do
7:   ...
8:   Calcule a matriz de covariância  $\Sigma_j$  por meio da Eq. (36)
9:   ...
10:  for  $l^* = 1$  até  $N_s$  do
11:    ...
12:    Proponha  $\theta_* \sim \mathcal{N}(\theta_{j,l}^c, \Sigma_j)$ 
13:    ...
14:  end for
15:  ...
16:  if  $n_a \geq N_a$  then
17:    Calcule a taxa de aceitação (ACR)
18:     $\beta_{new} = \beta_{old} \exp[G(ACR - t_{acr})]$ 
19:     $n_a = 0$ 
20:  end if
21: end while

```

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

5.1 Dissipador de Calor com Microcanal

Nesta seção serão apresentados os resultados da solução dos problemas direto e inverso para um problema conjugado de um dissipador de calor com microcanal, descrito no Capítulo 2. O problema direto foi solucionado por meio do método de diferenças finitas a partir de uma formulação explícita com o esquema FTCS (*Forward Time Centered Space*). Uma breve explicação do método e a dedução das equações principais discretizadas estão presentes no Apêndice B.

Primeiramente esse resultado será verificado por meio da comparação com a solução do problema obtida pela rotina NDSolve do *software* Mathematica 11.3. Posteriormente os resultados também serão comparados com os resultados obtidos a partir de um modelo de elementos finitos tridimensional do dissipador de calor, implementado no *software* comercial COMSOL Multiphysics 6.0 (a implementação na interface gráfica do *software* encontra-se no Apêndice A). A malha utilizada no MDF possui uma discretização com 51 pontos em x , 51 pontos em y e 10000 pontos no tempo. Vale ressaltar que uma análise de independência de malha para este problema foi conduzida anteriormente em Asth (2021), e esta malha foi escolhida pois apresentou a melhor convergência sem se tornar instável.

A Tabela 1 apresenta as propriedades termo-físicas do fluido (água) e da placa (polímero). As dimensões da placa são $L_x = L_y = 40$ mm, $L_z = 1$ mm, o raio do microcanal $R_i = 225\mu\text{m}$ e o tempo de simulação é $t = 300\text{s}$ (tempo necessário para que o sistema atinja o regime permanente). Para verificação dos resultados, foram considerados $h_i(x) = 750$ [W/m² K] (constante) e $h_e = 15$ [W/m² K]. Os demais parâmetros, considerados conhecidos, estão listados na Tabela 2.

Tabela 1 - Propriedades termo-físicas da água e do polímero.

Substância	ρc_p (J/m ³ K)	k (W/mK)
Água	$4.187 \cdot 10^6$	0.6
Polímero	$1.565 \cdot 10^6$	0.158

Fonte: O autor, 2023.

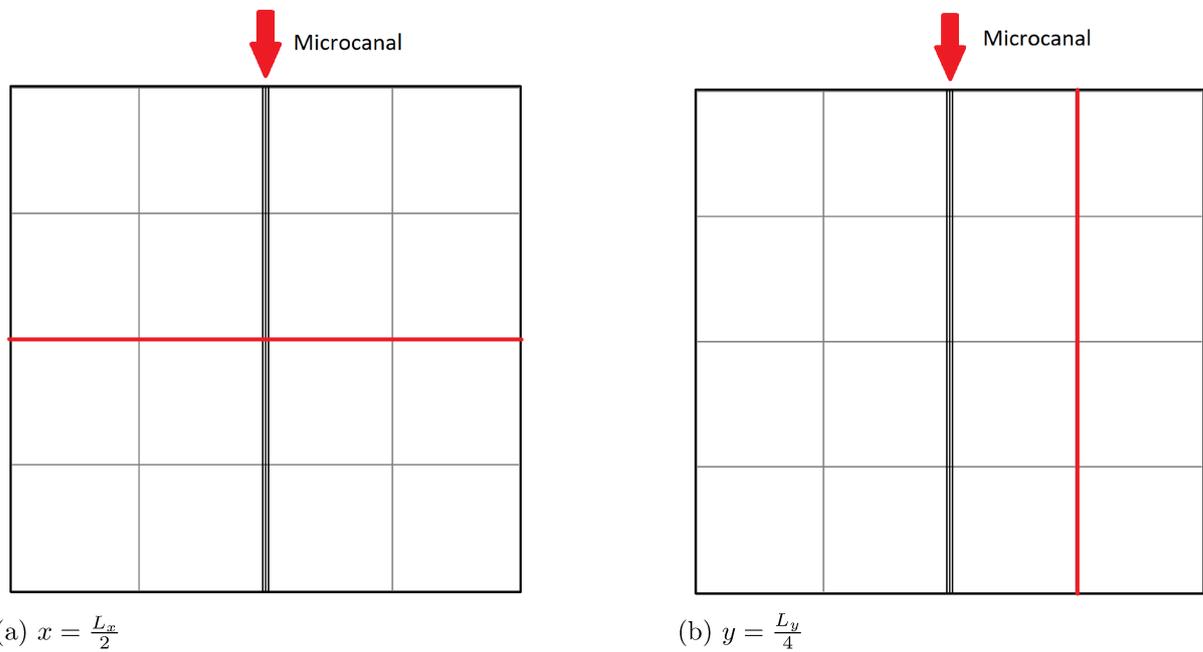
A primeira comparação é feita no regime permanente ($t = 300\text{s}$) e nas posições são $x = \frac{L_x}{2}$ transversalmente ao microcanal e $y = \frac{L_y}{4}$ paralelamente ao microcanal, conforme apresentado na Figura 3. A Figura 4 apresenta a comparação gráfica entre as soluções obtidas pelo método de diferenças finitas e a rotina NDSolve.

Tabela 2 - Parâmetros conhecidos

Parâmetro	Valor
T_i	20°C
T_∞	20°C
T_0	50°C
q_w	500 W/m ² K
Q	0.5 mL/min

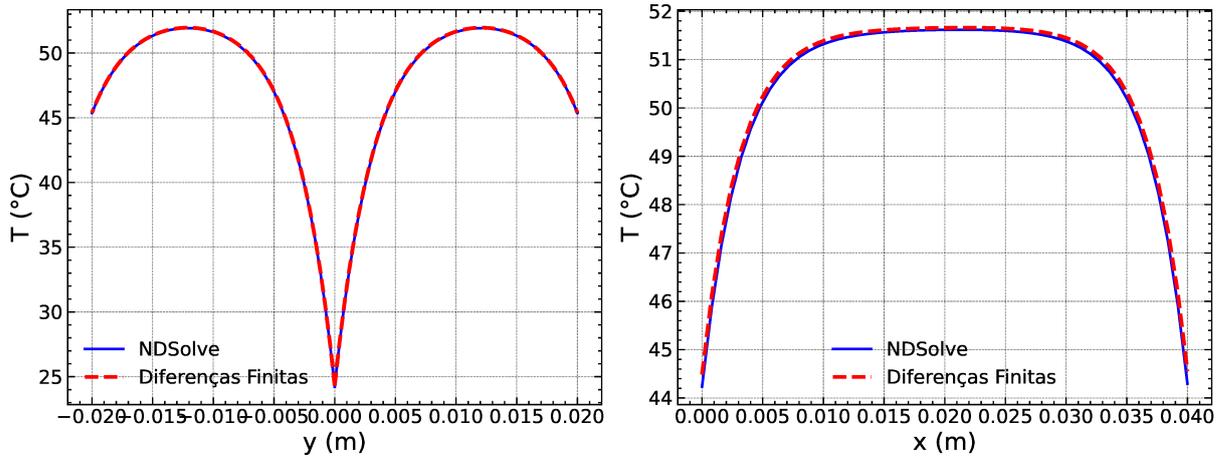
Fonte: O autor, 2023.

Figura 3 - Posições onde são realizadas as comparações na superfície do dissipador térmico



Fonte: O autor, 2023.

Figura 4 - Comparação das soluções - Regime estacionário



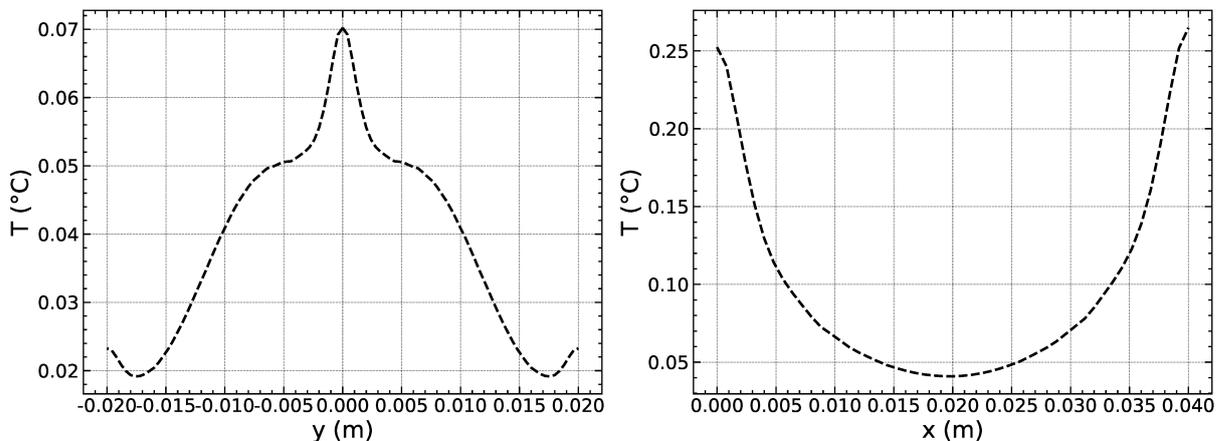
(a) $t = 300\text{s}; x = \frac{L_x}{2}$

(b) $t = 300\text{s}; y = \frac{L_y}{4}$

Fonte: O autor, 2023.

Analisando a Figura 4, observa-se que, no regime estacionário, ambos os métodos obtiveram comportamentos muito próximos, em que os resultados possuem uma proximidade pertinente. Com objetivo de verificar regiões que possuem maiores erros associados, construiu-se o gráfico da diferença das soluções. A Figura 5 apresenta os resíduos em graus Celsius entre as soluções mostradas na Figura 4. Analisando a curva gerada, nota-se que a região onde há maiores oscilações encontra-se próxima ao microcanal, uma das condições de contorno do problema. Ainda assim o erro entre as soluções é relativamente baixo, apresentando diferenças apenas na segunda casa decimal para grande parte do domínio.

Figura 5 - Resíduo entre as soluções - Regime estacionário



(a) $t = 300\text{s}; x = \frac{L_x}{2}$

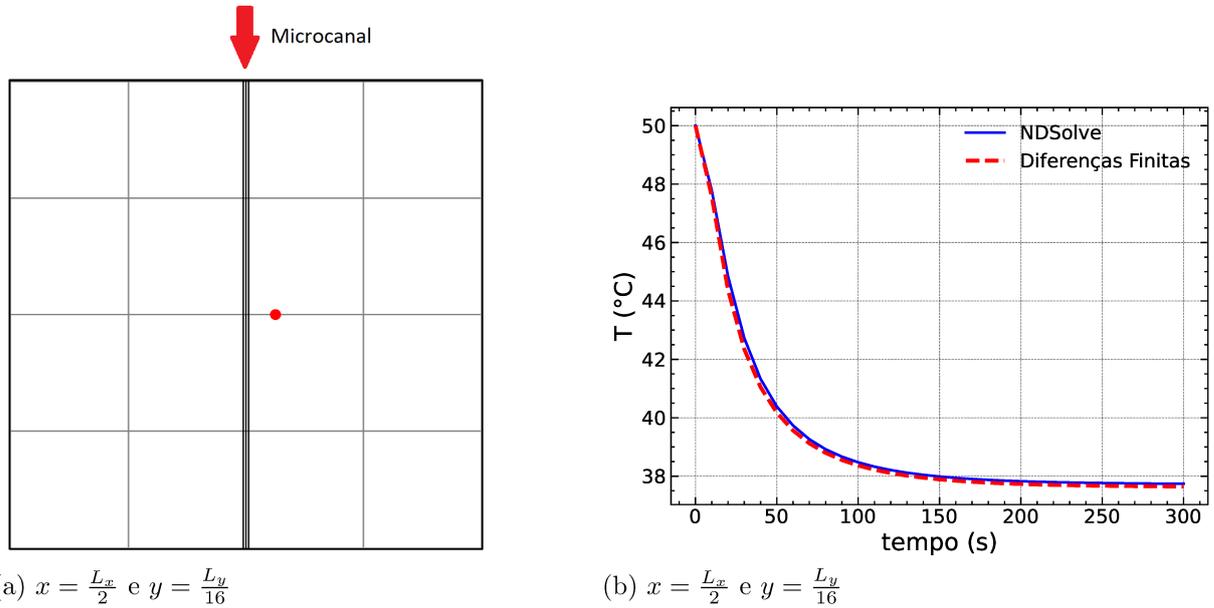
(b) $t = 300\text{s}; y = \frac{L_y}{4}$

Fonte: O autor, 2023.

A resposta também é comparada para um ponto da superfície durante todo o regime transiente. A Figura 6a ilustra o ponto onde é feita a comparação ($x = \frac{L_x}{2}$ e

$y = \frac{L_y}{16}$) e a Figura 6b apresenta a comparação gráfica entre os campos de temperaturas obtidos por cada um dos métodos.

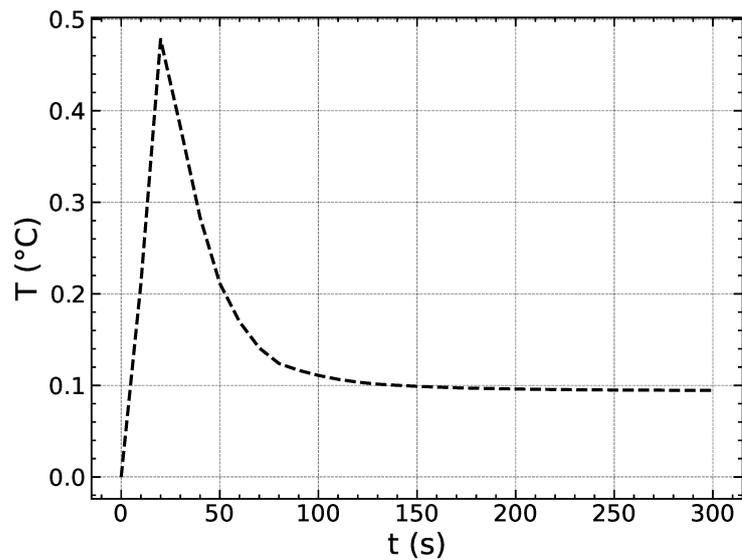
Figura 6 - Comparação das soluções - Regime transiente



Fonte: O autor, 2023.

A Figura 7 apresenta os resíduos em graus Celsius entre as soluções mostradas na Figura 6. É possível notar uma diferença maior no início da simulação, porém essa diferença rapidamente diminui e se estabiliza para o restante do tempo.

Figura 7 - Resíduo entre as soluções - Regime transiente

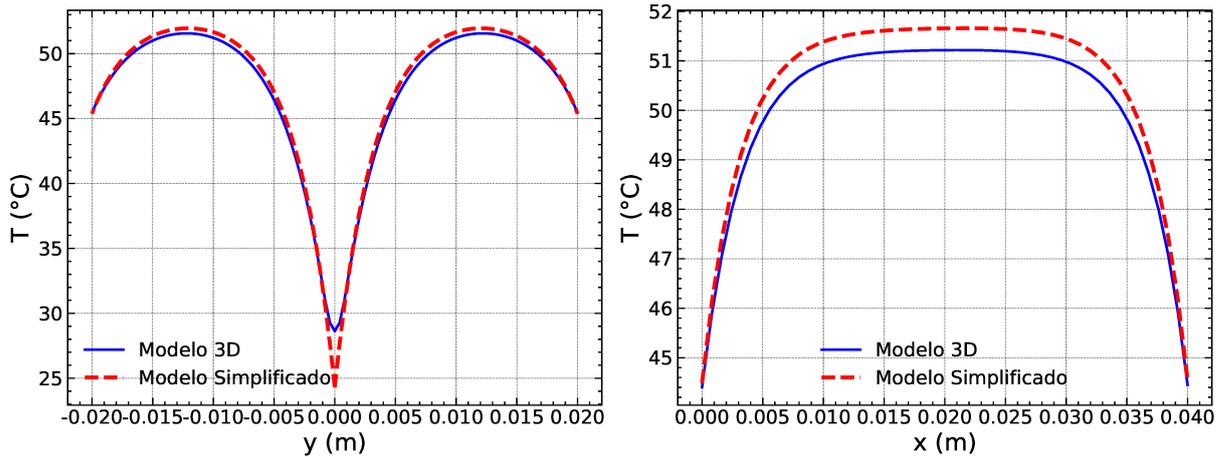


Fonte: O autor, 2023.

Para a solução no domínio do tempo, portanto, observa-se de maneira similar uma boa convergência entre os métodos comparados. Dessa forma, validando a solução proposta do problema direto.

A seguir foram realizadas comparações entre o modelo simplificado descrito no capítulo 2 e um modelo tridimensional do dissipador térmico com microcanal, desconsiderando as hipóteses simplificadoras aplicadas. Este modelo foi resolvido através do método de elementos finitos no *software* COMSOL Multiphysics 6.0. O procedimento para implementação do problema na interface gráfica encontra-se detalhado no Apêndice A. Uma malha de elementos finitos tetraédricos extrafina foi escolhida, com geração automática selecionando a opção '*Physics Controlled Mesh*'. A figura 8 apresenta a comparação gráfica das soluções dos modelos mencionados. Essas comparações foram feitas da mesma forma, nas posições ilustradas na Figura 3 ($x = \frac{L_x}{2}$ transversalmente ao microcanal e $y = \frac{L_y}{4}$ paralelamente ao microcanal) e regime permanente ($t = 300s$).

Figura 8 - Comparação das soluções dos modelos - Regime estacionário



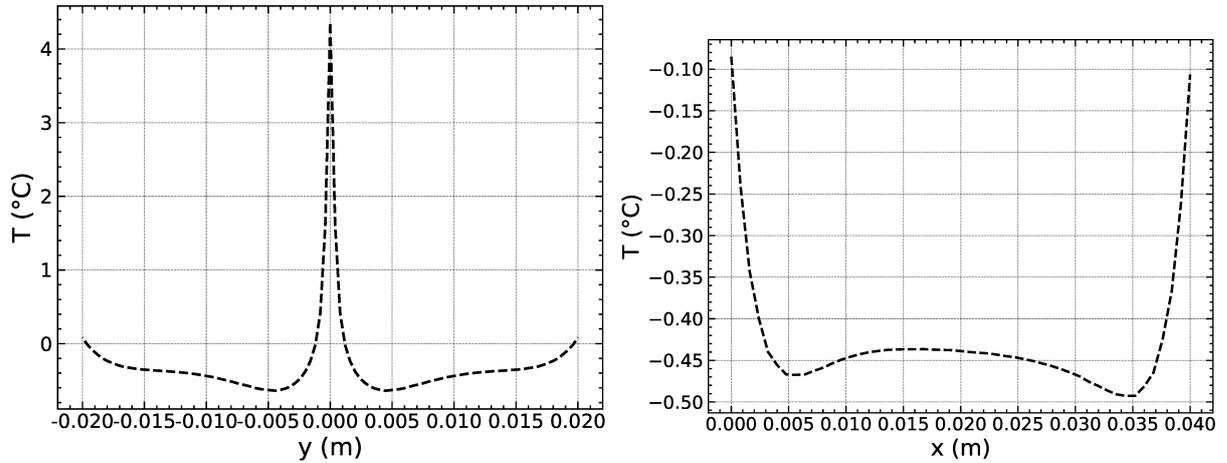
(a) $t = 300s$; $x = \frac{L_x}{2}$

(b) $t = 300s$; $y = \frac{L_y}{4}$

Fonte: O autor, 2023.

Observando o gráfico, nota-se de imediato uma discrepância maior na região onde encontra-se o microcanal ($y = 0$). Isso pode ser explicado, pois nesse ponto ocorre a simplificação mais forte em relação à geometria do problema (substituição do escoamento no microcanal por uma condição de contorno de convecção). Porém, ao longo de todo o resto do domínio, as soluções apresentam respostas similares, o que é satisfatório para o modelo simplificado proposto. A Figura 9 apresenta os resíduos em graus Celsius entre as curvas mostradas na Figura 8.

Figura 9 - Resíduos entre as soluções dos modelos - Regime estacionário



(a) $t = 300\text{s}; x = \frac{L_x}{2}$

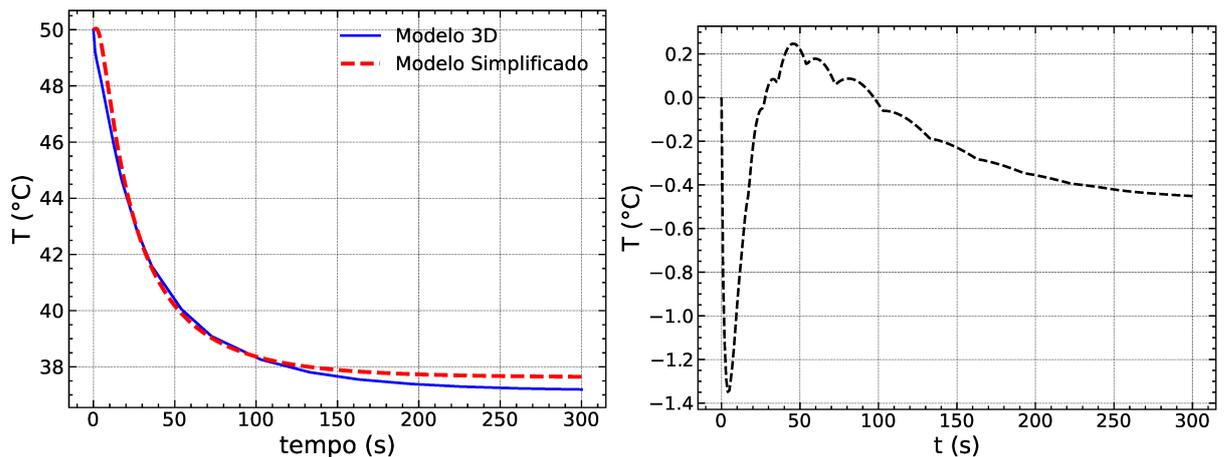
(b) $t = 300\text{s}; y = \frac{L_y}{4}$

Fonte: O autor, 2023.

Analisando a imagem, nota-se que a região onde há maiores oscilações encontra-se novamente próxima ao microcanal, dessa vez de maneira mais acentuada, devido à diferença presente na modelagem dos problemas comparados.

A comparação entre as respostas dos modelos para o regime transiente, assim como os resíduos entre elas encontra-se na Figura 10. Novamente, essa comparação foi feita na posição $x = \frac{L_x}{2}$ e $y = \frac{L_y}{16}$ (ilustrada na Figura 6a).

Figura 10 - Comparação das soluções dos modelos - Regime transiente



(a) $x = \frac{L_x}{2}$ e $y = \frac{L_y}{16}$

(b) Resíduos entre as soluções

Fonte: O autor, 2023.

Na evolução temporal da temperatura também é possível observar uma boa concordância da resposta pelos diferentes métodos. Assim, mesmo na comparação com um problema 3D sem as simplificações impostas, pode-se concluir que o modelo proposto foi bem sucedido na reprodução da resposta esperada para o caso estudado.

5.1.1 Problema Inverso: Seleção de Classe de Modelos

Esta seção apresenta resultados numéricos relacionados ao problema inverso de estimação de parâmetros e seleção classe de modelos para um dissipador térmico com um microcanal. Devido à natureza do problema em questão, uma variação espacial do coeficiente de transferência de calor $h_i(x)$, entre a face do microcanal e o fluxo interno, é esperada. Sendo assim, as classes de modelos aqui consideradas diferem entre si quanto à descrição do coeficiente de transferência de calor $h_i(x)$, conforme apresentado na Tabela 3. Em todos os casos, o coeficiente de transferência de calor relacionado à convecção natural nas faces externas da placa com o ambiente, h_e , foi considerado com valor constante e estimado juntamente com os outros parâmetros relacionados aos modelos considerados para $h_i(x)$. Vale ressaltar que o valor de h_e utilizado na geração dos dados experimentais simulados foi $h_e = 15$ [W/m²K] para todos os casos considerados

Tabela 3 - Modelos de referência para gerar os dados observados nos Casos 1, 2, 3 e 4.

Caso	Modelo de Referência	$h_i(x)$
1	2D	$-10x + 950$
2	2D	$950 \cdot e^{-5x}$
3	2D	$1500 \cdot e^{-50x}$
4	3D	$0,5x^2 - 35x + 1500$

Fonte: O autor, 2023.

Nas análises numéricas apresentadas a seguir, foram considerados dados experimentais sintéticos de temperatura, obtidos a partir da resposta de um modelo de referência mais ruído gaussiano com média zero e desvio padrão de 0,3 °C. Quatro casos distintos serão abordados. Nos Casos 1, 2 e 3, o modelo de referência usado para gerar os dados observados é o modelo simplificado 2D, e diferem entre si quanto à descrição do coeficiente de transferência de calor $h_i(x)$ de acordo com a Tabela 3. Um caso adicional, denominado Caso 4, também será analisado. Este teste difere nos dados experimentais sintéticos, obtidos desta vez a partir de um modelo tridimensional completo resolvido usando o método dos elementos finitos no software comercial COMSOL Multiphysics 6.0. Isso nos permite analisar se o modelo mais plausível se alinhará com as expectativas mesmo quando há uma diferença entre o modelo usado na geração dos dados experimentais e o modelo (simplificado) utilizado na resolução do problema inverso.

Para cada um desses casos, foram testadas três classes diferentes de modelos no processo de inversão (Tabela 4), com o objetivo de determinar o modelo mais plausível para o sistema de acordo com sua evidência.

Em todos os casos considerados, as medidas de temperatura foram obtidas nas

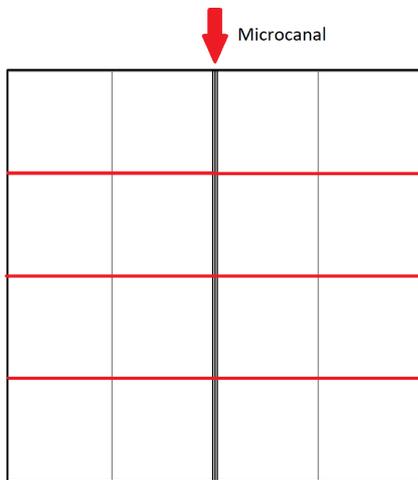
Tabela 4 - Modelos utilizados nas inversões dos problemas relacionados ao dissipador de calor

Modelo	$h_i(x)$	Vetor de Parâmetros Incertos
\mathcal{M}_0	$h_i(x) = c_0$	$\theta = [c_0, h_e]^T$
\mathcal{M}_1	$h_i(x) = b_1x + c_1$	$\theta = [b_1, c_1, h_e]^T$
\mathcal{M}_2	$h_i(x) = a_2x^2 + b_2x + c_2$	$\theta = [a_2, b_2, c_2, h_e]^T$

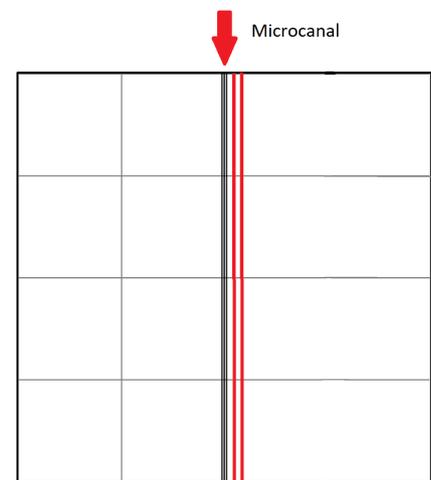
Fonte: O autor, 2023.

posições: $x = 0,01$ m, $x = 0,02$ m, e $x = 0,03$ m ao longo de y (transversalmente ao microcanal), bem como em $y = 0,0005$ m e $y = 0,001$ m ao longo de x (paralelamente ao microcanal). Cada conjunto desses dados observados foi obtido para 10 instantes de tempo, desde 0 até o sistema atingir o estado estacionário ($t = 300$ s), com incrementos igualmente espaçados de 30 segundos. A Figura 11 ilustra as posições onde foram tomados os dados experimentais simulados na superfície da placa. Cada linha vermelha apresentada na Figura 11 apresenta 50 pontos igualmente espaçados ao longo da superfície. Portanto, o vetor de dados experimentais possui 2500 dados simulados que serão utilizados no processo de inversão.

Figura 11 - Posições onde são realizadas as medições experimentais simuladas



(a) Linhas transversais ao microcanal



(b) Linhas paralelas ao microcanal

Fonte: O autor, 2023.

Em todos os casos considerados, os parâmetros do TMCMC foram definidos como $N_s = 3000$ amostras por estágio e um valor desejado de COV dos pesos de plausibilidade $v_t = 100\%$. Os resultados apresentados foram obtidos por meio de códigos computacionais desenvolvidos em Python 3.11.

5.1.2 Caso 1

Neste primeiro caso teste, dados experimentais simulados foram gerados com o modelo de referência do Caso 1, que possui um comportamento funcional linear para o coeficiente de transferência de calor $h_i(x)$. Os três modelos descritos na Tabela 4 foram utilizados para resolver o problema inverso para este conjunto de dados experimentais, e os resultados serão discutidos nesta seção. Vale ressaltar que, no processo de inversão, os parâmetros estimados são aqueles do vetor incerto relacionado ao modelo específico (θ de \mathcal{M}_j). A Tabela 5 mostra os valores encontrados para os parâmetros de acordo com os três modelos para o Caso 1.

Tabela 5 - Estimação do vetor de parâmetros incertos para os diferentes modelos considerados:

Caso 1					
Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$ (%)	Priori
\mathcal{M}_0	c_0	741.62	[738.17, 745.10]	0.13	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	14.99	[14.98, 15.05]	0.02	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_1	b_1	-10.02	[-10.18; -9.87]	0.80	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_1	951.74	[947.45, 956.03]	0.23	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	14.99	[14.98, 15.005]	0.01	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_2	a_2	-0.002	[-0.028, 0.014]	42.5	$\mathcal{U}[-0.2; 1.0]$
	b_2	-9.92	[-10.67, -9.17]	3.86	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_2	950.44	[942.64, 958.24]	0.42	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	14.99	[14.98, 15.00]	0.01	$\mathcal{U}[10,25]$

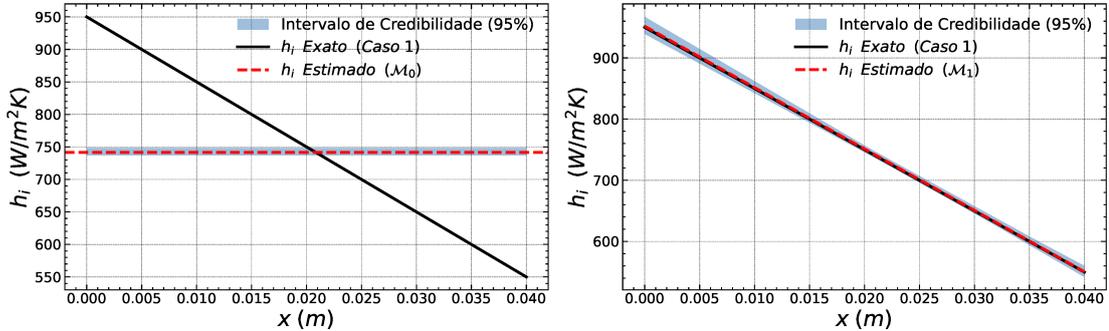
Fonte: O autor, 2023.

A partir da Tabela 5, algumas informações relevantes podem ser extraídas. Todos os três modelos considerados obtiveram estimativas com um baixo coeficiente de variação ($[\sigma/\mu]$, indicando um baixo desvio padrão em relação a média). O modelo \mathcal{M}_1 destaca-se, pois obteve resultados em que as médias dos parâmetros estimados são muito próximas dos coeficientes que compõe o $h_i(x)$ de referência, juntamente com baixos valores de covariância, uma vez que possui o mesmo comportamento funcional que o modelo considerado no Caso 1. Para o modelo \mathcal{M}_2 , pode-se observar que o coeficiente que acompanha o termo quadrático se aproxima de zero, obtendo efetivamente um comportamento muito próximo ao linear. Isso era esperado, pois \mathcal{M}_2 é uma hiper-parametrização do Caso 1, que foi usada para gerar os dados experimentais sintéticos.

A Figura 12 ilustra a comparação entre o comportamento funcional do modelo de referência (Caso 1) e a função estimada pelos modelos \mathcal{M}_0 , \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 por meio do problema inverso. O ajuste dos dados entre os modelos apresentados \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 é aparentemente indistinguível em relação ao coeficiente $h_i(x)$, com intervalos de confiança

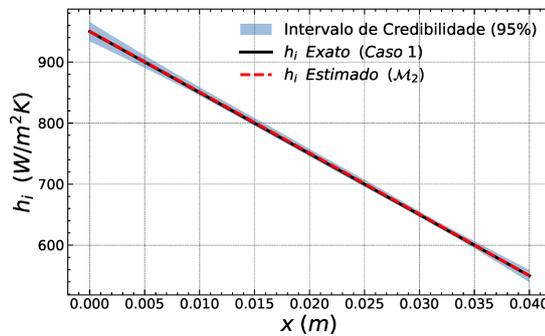
estreitos.

Figura 12 - h_i Estimado e Intervalos de Credibilidade (95%): Caso 1



(a) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_0

(b) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_1

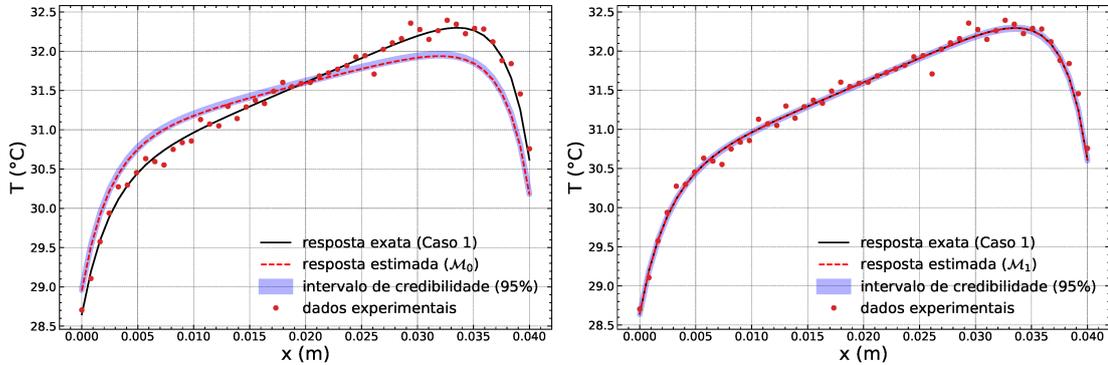


(c) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

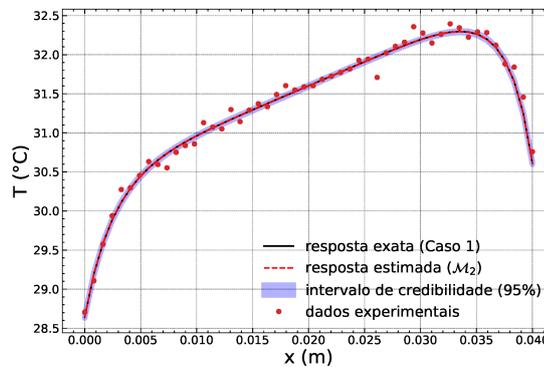
A Figura 13 apresenta o intervalo de credibilidade das respostas obtidas a partir dos modelos estimados da Figura 12. As respostas mostradas na Figura 13 representam o campo de temperaturas em $y = 0,001\text{m}$ ao longo de x (paralelo ao microcanal) na placa, no regime permanente ($t = 300\text{s}$). Nota-se que o único modelo que não consegue capturar com precisão a resposta exata é \mathcal{M}_0 e isso era esperado, pois o modelo não consegue representar a variação espacial de $h_i(x)$ presente no caso utilizado para geração dos dados simulados. Por outro lado, o ajuste de dados de \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 é muito próximo, sendo indistinguível no gráfico apresentado.

Figura 13 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em $y = 0,001\text{m}$ e regime estacionário : Caso 1



(a) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_0

(b) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1

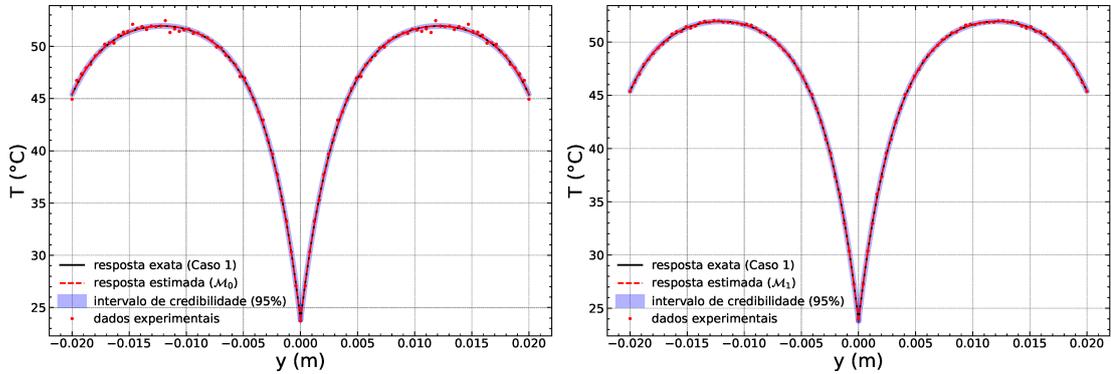


(c) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

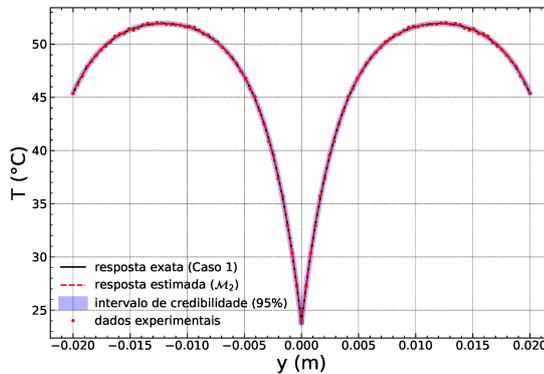
Vale ressaltar que esta posição e tempo específicos foram escolhidos para serem apresentados devido à sua maior sensibilidade ao parâmetro $h_i(x)$, o que facilita a visualização das respostas. Por exemplo, a Figura 14 ilustra os intervalos de credibilidade na posição $x = \frac{L_y}{2}$ (metade da placa) ao longo de y (transversalmente ao microcanal) e regime permanente. Percebe-se que mesmo para o modelo \mathcal{M}_0 com erro relativamente alto, não se nota diferenças gráficas visíveis para esta posição.

Figura 14 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em $x = \frac{L_y}{2}$ m e regime estacionário: Caso 1



(a) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_0

(b) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1

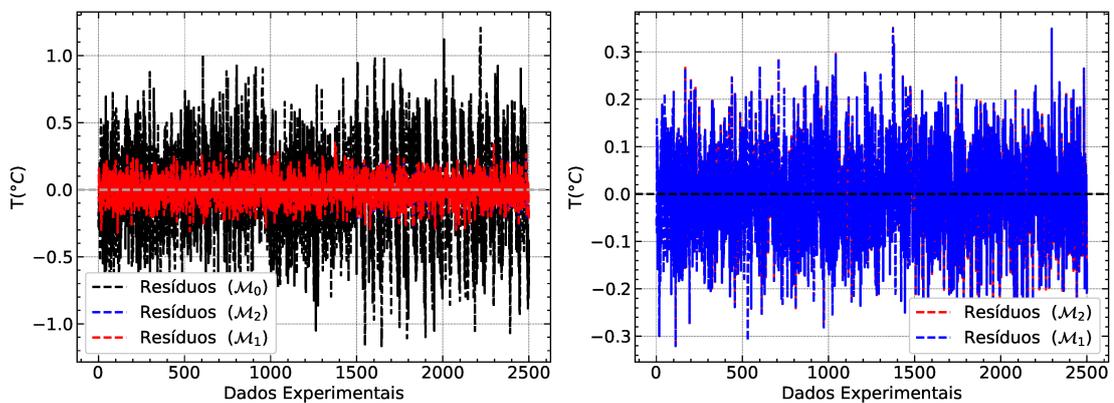


(c) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

Torna-se claro então, a necessidade de uma análise mais detalhada do ajuste da resposta para o conjunto completo dos dados experimentais. A Figura 15 apresenta os resíduos de cada solução em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 15 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1



(a) Resíduos dos modelos

(b) Resíduos apenas de \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

Como visto, simplesmente estimar os parâmetros para diferentes modelos não é suficiente para avaliar qual deles melhor ajusta os dados e por esse motivo a seleção de classe modelos também desempenha um importante papel nesse trabalho. Os resultados da seleção de modelos são apresentados na Tabela 6. O logaritmo da evidência e o logaritmo da função de verossimilhança média sobre a posteriori (ajuste de dados), que são estimados a partir de simulação estocástica, são mostrados ao lado do ganho de informação, calculado através da Eq. (30). A evidência claramente favorece a classe de modelo \mathcal{M}_1 , como esperado, pois ele contém variação funcional linear com dois parâmetros, similar ao modelo de referência usado para gerar os dados. A melhoria no ajuste do modelo \mathcal{M}_1 supera significativamente a penalização pela maior complexidade em comparação com o modelo \mathcal{M}_0 . Por outro lado, o ajuste dos dados do modelo \mathcal{M}_2 é apenas ligeiramente superior ao de \mathcal{M}_1 , mas ele exibe um aumento significativo no ganho de informação devido ao maior número de parâmetros a serem estimados, o que, no entanto, não é compensado pela informação adicional necessária para estimá-los. Um ponto importante a ser considerado é que a penalização contra a complexidade na seleção de classe de modelos não se baseia apenas no número de parâmetros, mas sim em quanto informação extra é extraída dos dados disponíveis ao incluí-los (Beck, 2010). Vale ressaltar que os valores da evidência e do ajuste de dados para o modelo \mathcal{M}_0 são discrepantes em comparação com os demais, devido à diferença nos modelos e à dificuldade em representar o comportamento funcional do parâmetro para o conjunto de dados experimentais analisado.

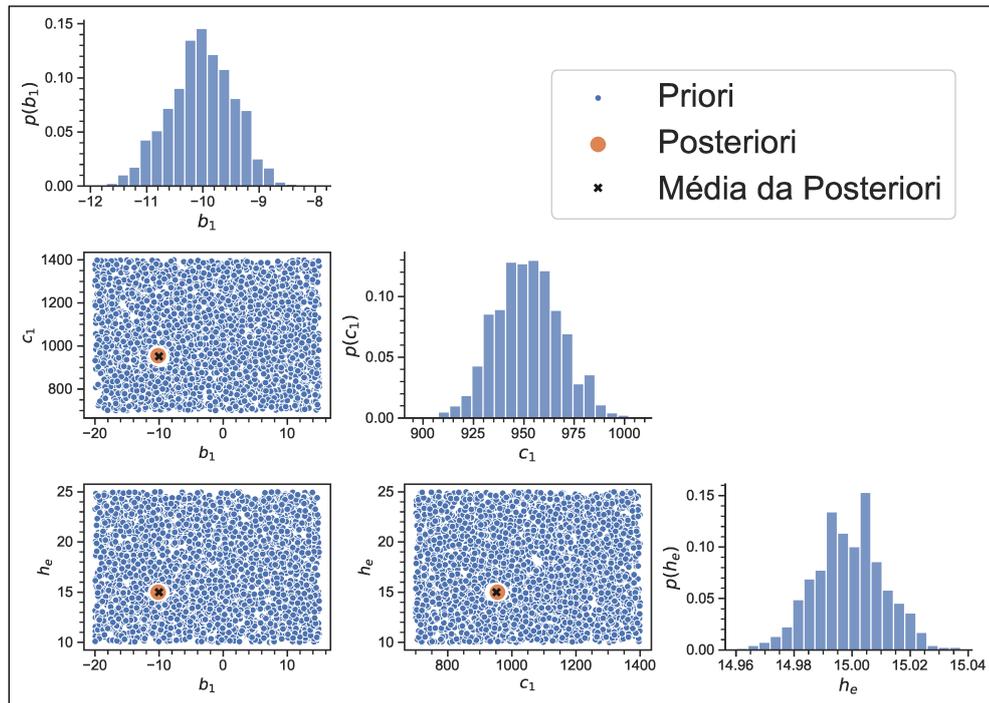
Tabela 6 - Seleção de modelos: Caso 1

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	ln(evidência)	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_0	-1863.88	11.18	-1875.06	0
\mathcal{M}_1	-1261.04	17.92	-1278.96	97.5
\mathcal{M}_2	-1261.49	21.13	-1282.62	2.5

Fonte: O autor, 2023.

Portanto, a classe de modelo \mathcal{M}_1 apresenta a maior probabilidade para os dados experimentais observados. A Figura 16 apresenta as densidades a posteriori dos parâmetros de \mathcal{M}_1 e a correlação entre os mesmos.

Figura 16 - Estimação dos parâmetros do Caso 1 para a classe de modelo \mathcal{M}_1



Fonte: O autor, 2023.

5.1.3 Caso 2

Neste caso, os dados experimentais simulados foram gerados usando o modelo de referência do Caso 2, que possui um comportamento funcional exponencial para o coeficiente de transferência de calor convectivo $h_i(x)$. No entanto, os parâmetros foram ajustados de modo que - dentro do domínio prescrito - a função exibisse um comportamento aproximadamente linear. Portanto, o objetivo deste teste é verificar se, mesmo com a diferença nos modelos usados para gerar os dados experimentais em comparação com aqueles usados na estimativa, o algoritmo irá preferir aquele que melhor representa os dados experimentais observados. Os três modelos descritos na Tabela 4 foram empregados na resolução do problema inverso para este conjunto de dados experimentais, e os resultados serão discutidos nesta seção. A Tabela 7 mostra os valores encontrados para os parâmetros dos três modelos no Caso 2.

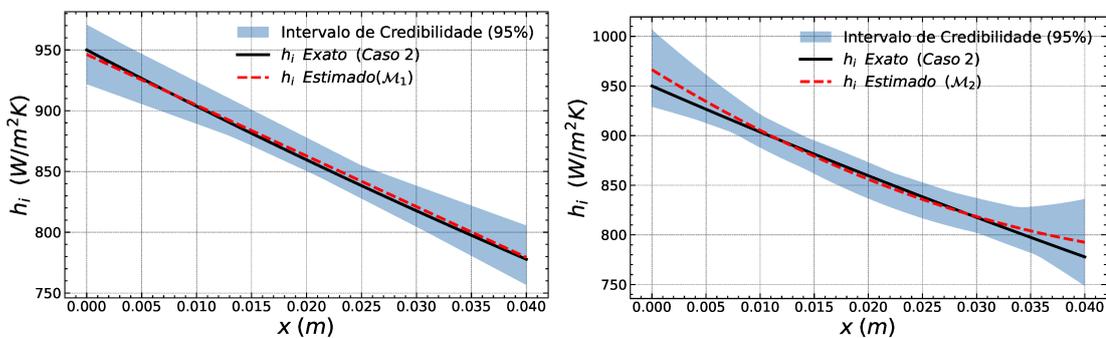
Tabela 7 - Estimação do vetor de parâmetros incertos para os diferentes modelos considerados:

Caso 2					
Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$ (%)	Priori
\mathcal{M}_0	c_0	862.65	[851.62, 873.67]	0.49	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	15.03	[14.98, 15.05]	0.04	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_1	b_1	-4.17	[-4.84, -3.50]	8.18	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_1	946.25	[929.23, 963.27]	0.92	$\mathcal{U}[800,1700]$
	h_e	15.00	[14.98, 15.03]	0.04	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_2	a_2	0.006	[-0.01, 0.125]	58.25	$\mathcal{U}[-0.5; 1.0]$
	b_2	-6.69	[-9.55, -3.82]	21.83	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_2	966.35	[939.90, 992.80]	1.39	$\mathcal{U}[800,1700]$
	h_e	15.00	[14.98, 15.02]	0.03	$\mathcal{U}[10,25]$

Fonte: O autor, 2023.

A figura ilustra a comparação entre o comportamento funcional do modelo de referência e o comportamento funcional estimado pelos modelos \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 por meio do problema inverso. A partir deste seção, não serão mais apresentados gráficos relativos a \mathcal{M}_0 pois fica claro, através dos resultados numéricos que este modelo é incapaz de obter um bom ajuste aos dados experimentais simulados.

Os ajustes de dados entre os modelos \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 com relação a $h_i(x)$ são bastante próximos e, desta vez, possuem um intervalo de credibilidade maior em comparação com o Caso 1, devido à discrepância entre o modelo de referência e os modelos utilizados no processo de inversão.

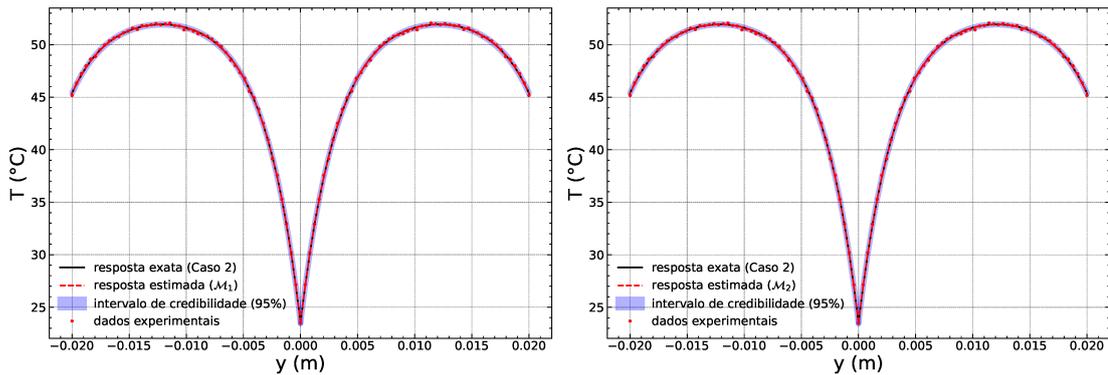
Figura 17 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%): Caso 2(a) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_1 (b) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

A Figura 18 apresenta o intervalo de credibilidade das respostas obtidas a partir

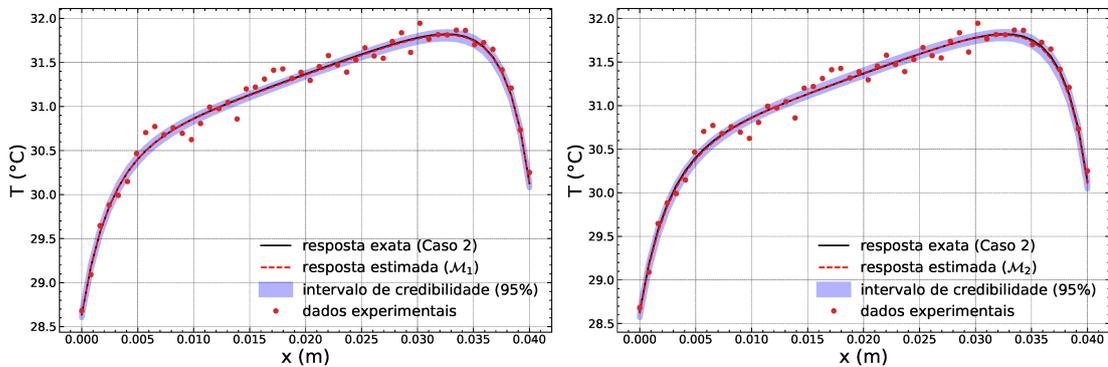
dos modelos estimados da Figura 17. As respostas mostradas nas Figuras 18a e 18b representam o campo de temperaturas na posição $x = \frac{L_y}{2}$ (metade da placa) ao longo de y (transversalmente ao microcanal) e regime permanente ($t = 300s$). Assim como as Figuras 18c e 18d representam o campo de temperaturas em $y = 0,001m$ ao longo de x (paralelo ao microcanal) na placa, no regime permanente ($t = 300s$).

Figura 18 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) - Regime estacionário:
Caso 2



(a) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;
 $x = \frac{L_y}{2} m$

(b) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;
 $x = \frac{L_y}{2} m$



(c) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;
 $y = 0,001m$

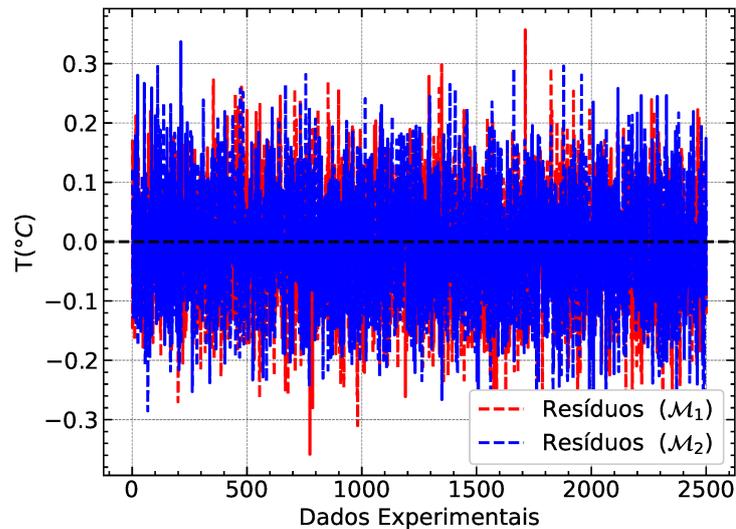
(d) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;
 $y = 0,001m$

Fonte: O autor, 2023.

Verifica-se novamente que os gráficos são muito parecidos para ambas as soluções. Isso pode ser explicado, pelo fato de os dois modelos apresentarem ajustes de dados bastante próximos. Ademais, pequenas variações no valor de $h_i(x)$ não apresentam variações significativas na resposta do modelo.

A Figura 19 apresenta os resíduos das soluções apresentadas em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 19 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2



Fonte: O autor, 2023.

Os resultados da seleção de classe de modelos são apresentados na Tabela 8. \mathcal{M}_1 é preferido, apesar de novamente mostrar um ajuste de dados muito próximo ao modelo \mathcal{M}_2 . Isso ocorre, pois, apesar do comportamento exponencial de $h_i(x)$ neste caso, os parâmetros foram ajustados de modo que no domínio prescrito, o coeficiente apresentasse um comportamento próximo ao linear. \mathcal{M}_2 mais uma vez tende a zerar o valor do parâmetro que acompanha o termo quadrático, assim obtendo um comportamento mais próximo ao linear. Apesar do ajuste de dados ser mais uma vez muito similar entre \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 , a penalização pela complexidade (maior ganho de informação) associada ao parâmetro adicional em \mathcal{M}_2 faz com que \mathcal{M}_1 novamente seja escolhido como modelo mais provável, mesmo que com uma probabilidade menor em relação ao Caso 1.

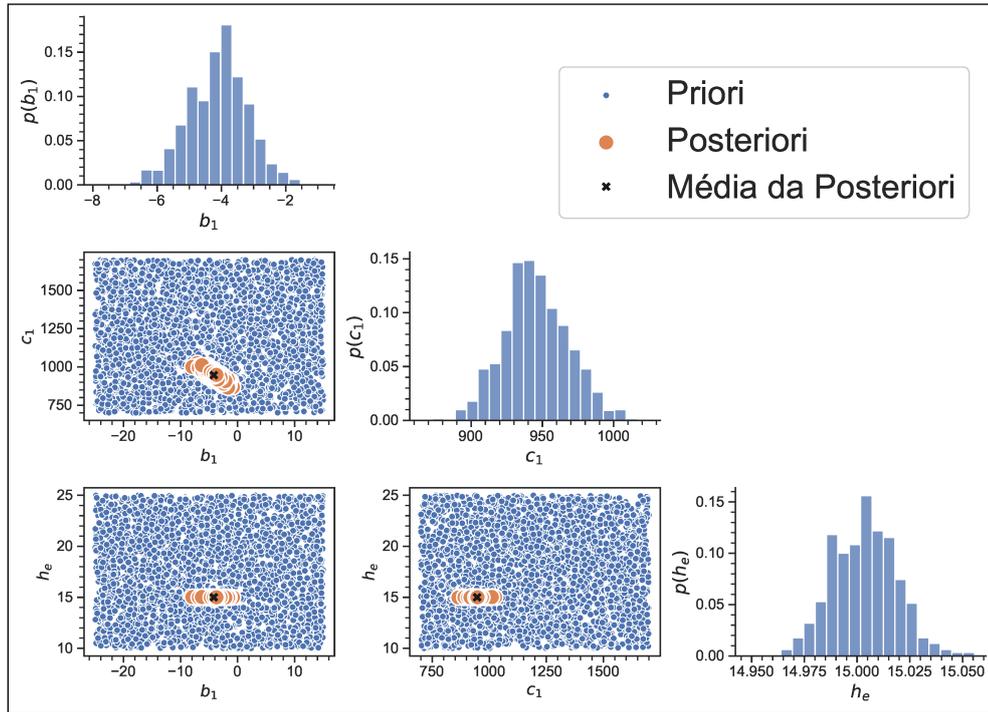
Tabela 8 - Seleção de modelos: Caso 2

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	$\ln(\text{evidência})$	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_0	-1321.41	11.10	-1332.51	0
\mathcal{M}_1	-1258.95	17.63	-1276.58	84.94
\mathcal{M}_2	-1259.00	19.31	-1278.31	15.06

Fonte: O autor, 2023.

A Figura 20 apresenta as densidades a posteriori dos parâmetros de \mathcal{M}_1 e a correlação entre os mesmos para o Caso 2.

Figura 20 - Estimação dos parâmetros do Caso 2 para a classe de modelo \mathcal{M}_1



Fonte: O autor, 2023.

5.1.4 Caso 3

Neste caso, os dados experimentais simulados foram gerados utilizando o modelo de referência do Caso 3, que possui um comportamento funcional exponencial para o coeficiente de transferência de calor convectivo $h_i(x)$. Desta vez, os parâmetros foram ajustados para que a função realmente exiba decaimento exponencial no domínio prescrito. Vale ressaltar que, para este caso, as prioris dos parâmetros precisaram ser ajustadas, pois o espaço de busca é diferente para cada modelo. Mais uma vez, os três modelos descritos na Tabela 4 foram utilizados na resolução do problema inverso para este conjunto de dados experimentais, e os resultados serão discutidos nesta seção. A Tabela 9 exibe os valores encontrados para os parâmetros para o Caso 3.

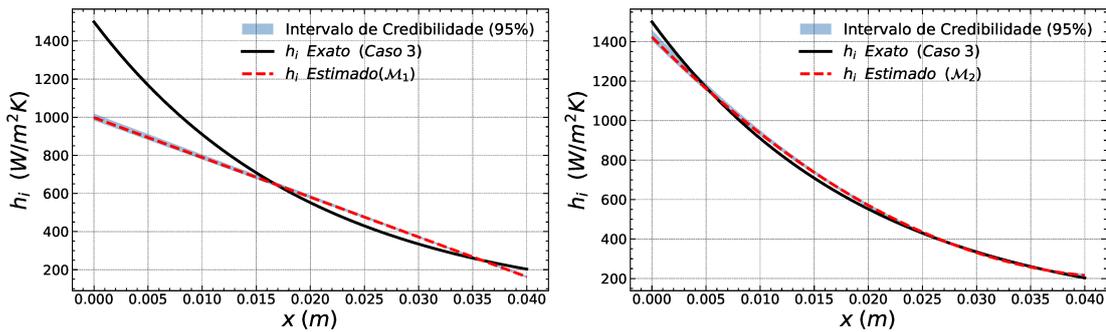
A Figura 21 exibe a variação estimada na função de $h_i(x)$ para \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 . Agora é possível observar que \mathcal{M}_1 tem dificuldades em representar essa variação espacial, enquanto \mathcal{M}_2 proporciona um bom ajuste para a maior parte do domínio.

Tabela 9 - Estimação dos parâmetros do vetor incerto para os diferentes modelos considerados
- Caso 3.

Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$ (%)	Priori
\mathcal{M}_0	c_0	773.62	[758.17, 795.10]	0.13	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	14.99	[14.97, 15.05]	0.02	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_1	b_1	-20.87	[-21.10, -20.65]	0.55	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_1	997.96	[990.11, 1005.80]	0.40	$\mathcal{U}[800,1700]$
	h_e	14.99	[14.98, 15.02]	0.04	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_2	a_2	0.62	[0.59, 0.65]	2.77	$\mathcal{U}[0.2; 1.0]$
	b_2	-55.02	[-56.70, -53.33]	2.37	$\mathcal{U}[-60,15]$
	c_2	1423.05	[1399.20, 1446.91]	1.56	$\mathcal{U}[800,1700]$
	h_e	14.97	[14.96, 15.01]	0.05	$\mathcal{U}[10,25]$

Fonte: O autor, 2023.

Figura 21 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%): Caso 3



(a) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_1

(b) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_2

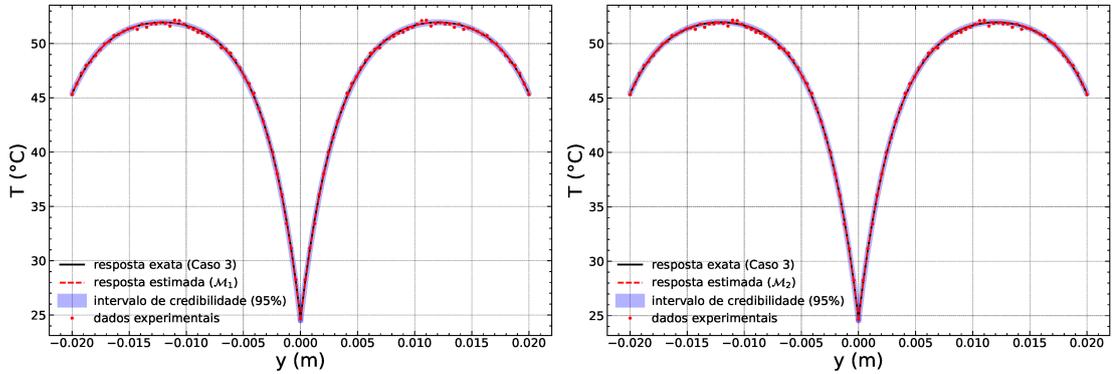
Fonte: O autor, 2023.

Nota-se que, nesse cenário, embora as estimativas apresentem a maior complexidade, o intervalo de credibilidade é estreito. Esse padrão ocorre porque, entre os casos examinados, o Caso 3 exibe a maior variação do coeficiente $h_i(x)$ ao longo do domínio. Isso se deve à necessidade de uma variação mais acentuada desse valor para representar um decaimento exponencial. Conseqüentemente, pequenas alterações nos coeficientes das funções estimadas têm um impacto significativo no ajuste dos dados experimentais. Por essa razão, o intervalo de melhor ajuste é, de fato, bastante restrito.

A Figura 22 apresenta o intervalo de credibilidade das respostas obtidas a partir dos modelos estimados da Figura 22. As respostas mostradas nas Figuras 22a e 22b representam o campo de temperaturas na posição $x = \frac{L_y}{2}$ (metade da placa) ao longo de y (transversalmente ao microcanal) e regime permanente ($t = 300s$). Assim como as Figuras 22c e 22d representam o campo de temperaturas em $y = 0,001m$ ao longo de x

(paralelo ao microcanal) na placa, no regime permanente ($t = 300s$).

Figura 22 - Respostas Estimadas e Intervalos de Credibilidade (95%) Regime Estacionário:
Caso 2

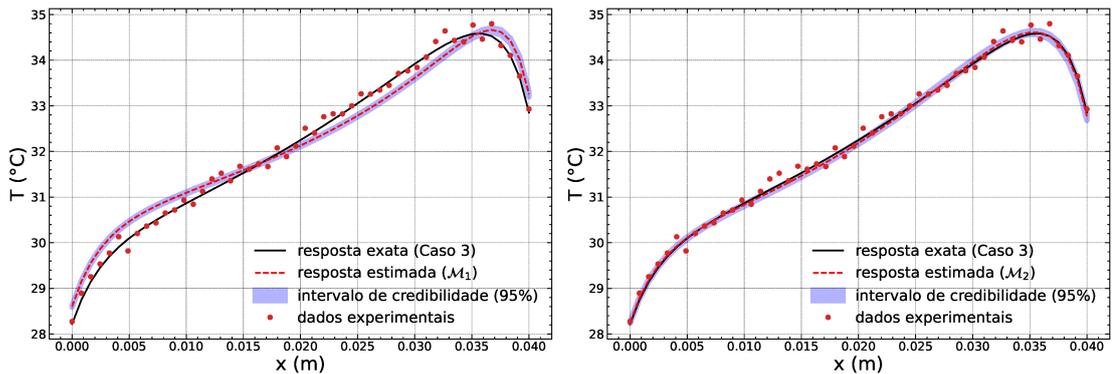


(a) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;

$$x = \frac{L_y}{2} \text{ m}$$

(b) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;

$$x = \frac{L_y}{2} \text{ m}$$



(c) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;

$$y = 0,001 \text{ m}$$

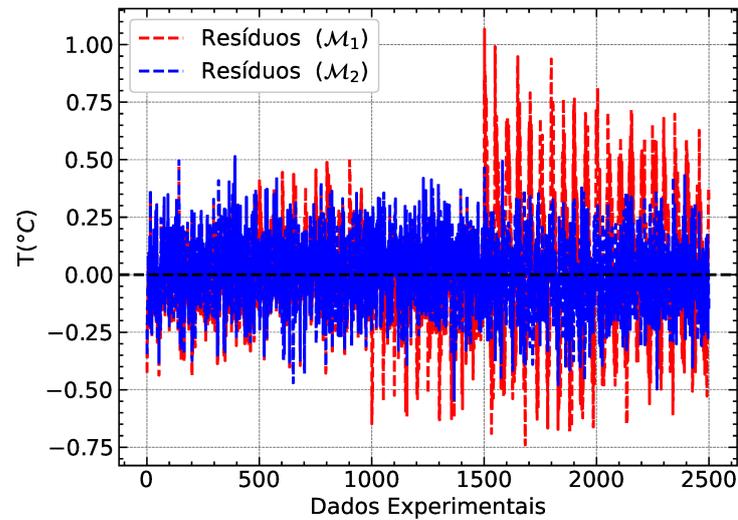
(d) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;

$$y = 0,001 \text{ m}$$

Fonte: O autor, 2023.

Neste caso, observa-se uma maior dificuldade de ajuste de dados por parte do modelo \mathcal{M}_1 , principalmente na direção x (paralelamente ao microcanal), devido a maior sensibilidade da resposta em relação a $h_i(x)$ para essas posições. A Figura 23 apresenta os resíduos das soluções apresentadas em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 23 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 3



Fonte: O autor, 2023.

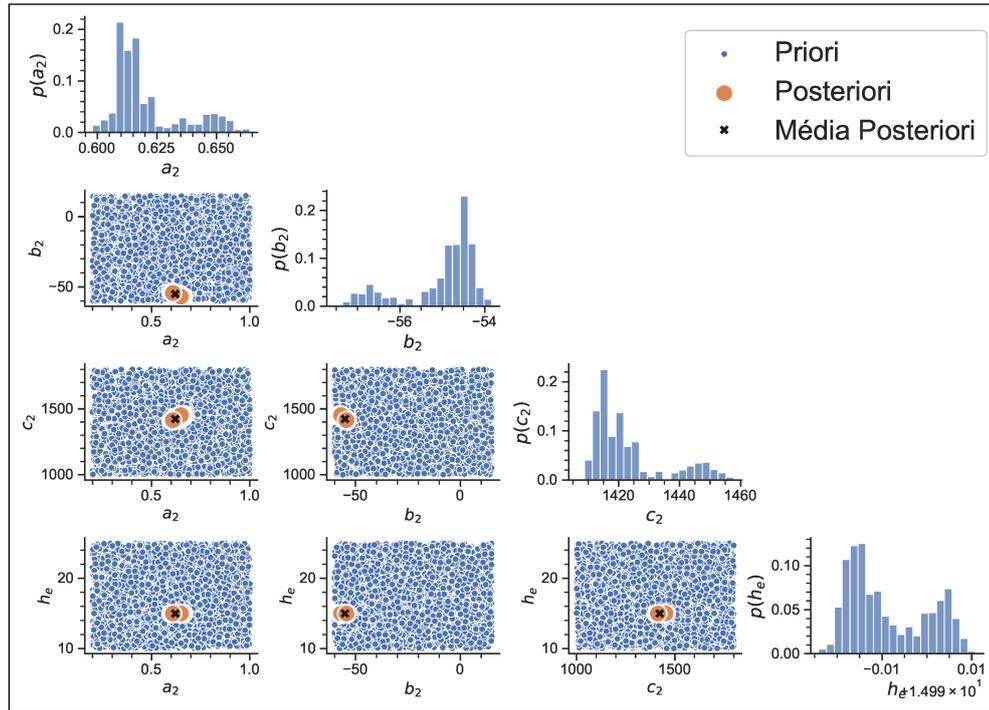
Fica claro que desta vez os resíduos relativos ao ajuste de \mathcal{M}_1 apresentam escala mais significativa, reforçando o melhor ajuste obtido por \mathcal{M}_2 para este caso. A Tabela 10 apresenta a evidência do modelo para o Caso 3. Pode-se observar que, agora, apesar de \mathcal{M}_2 mostrar um maior ganho de informação (penalização devido à maior complexidade), seu ajuste aos dados é significativamente melhor do que o dos outros dois modelos. Portanto, é escolhido como o modelo mais provável de acordo com os dados experimentais.

Tabela 10 - Seleção de modelos: Caso 3

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	$\ln(\text{evidência})$	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_0	-1321.41	11.10	-1332.51	0
\mathcal{M}_1	-1911.08	19.85	-1930.93	0
\mathcal{M}_2	-1327.50	23.98	-1351.48	100

Fonte: O autor, 2023.

A Figura 24 apresenta as densidades a posteriori dos parâmetros estimados, desta vez de \mathcal{M}_2 , assim como a correlação entre os mesmos para o Caso 3.

Figura 24 - Estimação dos parâmetros do Caso 3 para a classe de modelo \mathcal{M}_2 

Fonte: O autor, 2023.

5.1.5 Caso 4

Nesta seção, serão apresentados os resultados para o Caso 4, onde as medições de temperatura são obtidas a partir de um experimento simulado usando um modelo tridimensional completo, desenvolvido no software COMSOL Multiphysics 6.0. O objetivo é simular dados experimentais mais realistas para o problema em análise, como tentativa de diminuir o "crime inverso". O experimento simulado consiste em resolver o problema tridimensional com física de condução de calor em sólidos e um estudo de regime transiente. Para representar o fluxo no microcanal, condições de contorno de convecção foram impostas nas faces internas do cilindro (microcanal) com $h_i(x)$ definido de acordo com o caso de teste de referência. Uma malha de elementos finitos tetraédricos extrafina foi escolhida, com geração automática selecionando a opção '*Physics Controlled Mesh*'.

Para a solução do problema inverso, foram utilizados dados experimentais simulados extraídos da face superior da placa ($z = L_z$, Figura 1, nas mesmas posições descritas para os casos anteriores, Figura 11). Esse procedimento replica a aquisição de medições de temperatura por meio de termografia infravermelha, como no caso de um experimento real, em que esta seria a face exposta e, portanto, facilmente acessível para a obtenção de medições experimentais.

Vale ressaltar que, para o caso estudado nesta seção, há uma discrepância entre o

modelo utilizado para a geração dos dados experimentais sintéticos e os modelos utilizados na inversão. Portanto, o objetivo é encontrar o valor que melhor aproxima a solução do modelo simplificado aos dados experimentais sintéticos. As prioris são diferentes também nesse caso, pois a incerteza na região onde os parâmetros estão localizados é maior devido à diferença nos modelos.

A Tabela 11 mostra os valores encontrados para os parâmetros de acordo com os três modelos para o Caso 4.

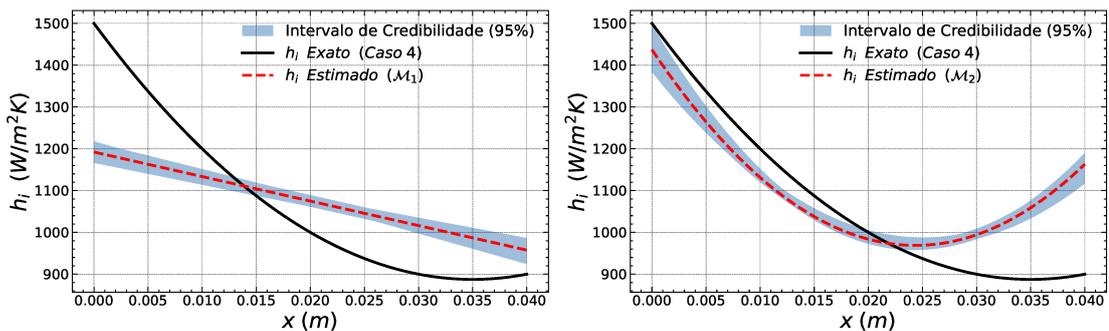
Tabela 11 - Estimação dos parâmetros do vetor incerto para os diferentes modelos considerados: Caso 4.

Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$ (%)	Priori
\mathcal{M}_0	c_0	1076.60	[1076.59, 1076.62]	0.47	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	15.47	[15.46, 15.50]	0.05	$\mathcal{U}[10,25]$
\mathcal{M}_1	b_1	-5.87	[-6.64, -5.08]	6.77	$\mathcal{U}[-25,15]$
	c_1	1192.24	[1172.21, 1212.26]	0.85	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	15.48	[15.46, 15.49]	0.01	$\mathcal{U}[10,25]$
	a_2	0.79	[0.73, 0.85]	4.04	$\mathcal{U}[-0.2; 1.0]$
\mathcal{M}_2	b_2	-38.47	[-41.24, -35.71]	3.67	$\mathcal{U}[-60,15]$
	c_2	1436.97	[1407.75, 1466.18]	1.03	$\mathcal{U}[600,1500]$
	h_e	15.48	[15.47, 15.50]	0.03	$\mathcal{U}[10,25]$

Fonte: O autor, 2023.

Apesar da discrepância entre o modelo utilizado na geração dos dados sintéticos e dos modelos empregados no processo de inversão, os coeficientes de variação da posteriori são relativamente baixos e conseqüentemente apresentam um baixo desvio padrão associado às amostras. A Figura 25 exibe a variação estimada na função de $h_i(x)$ para \mathcal{M}_1 e \mathcal{M}_2 .

Figura 25 - h_i Estimado e Intervalo de Credibilidade (95%) - Caso 4



(a) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_1

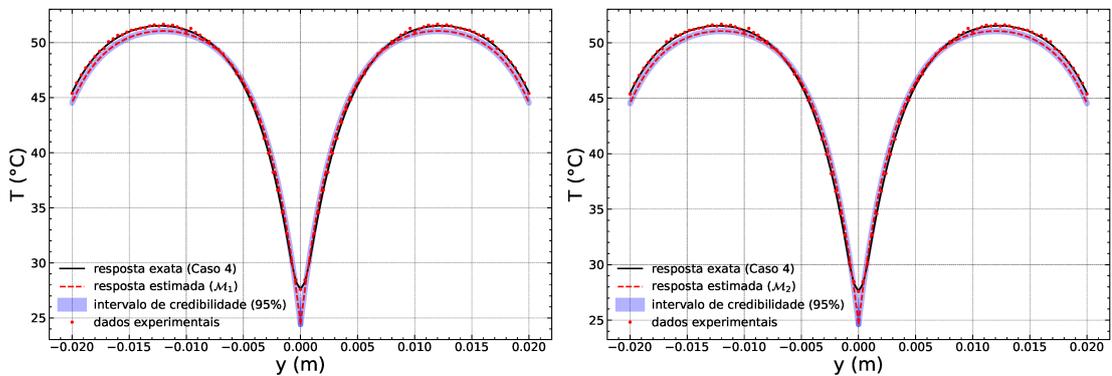
(b) h_i Estimado - Modelo \mathcal{M}_2

Fonte: O autor, 2023.

Nota-se que nenhum dos modelos consegue representar em todo o domínio o comportamento exato do coeficiente $h_i(x)$. A Figura 26 apresenta o intervalo de credibilidade das respostas obtidas a partir dos modelos estimados da Figura 25. As respostas mostradas nas Figuras 26a e 26b representam o campo de temperaturas na posição $x = \frac{L_y}{2}$ (metade da placa) ao longo de y (transversalmente ao microcanal) e regime permanente ($t = 300s$). Assim como as Figuras 26c e 26d representam o campo de temperaturas em $y = 0,001m$ ao longo de x (paralelo ao microcanal) na placa, no regime permanente ($t = 300s$).

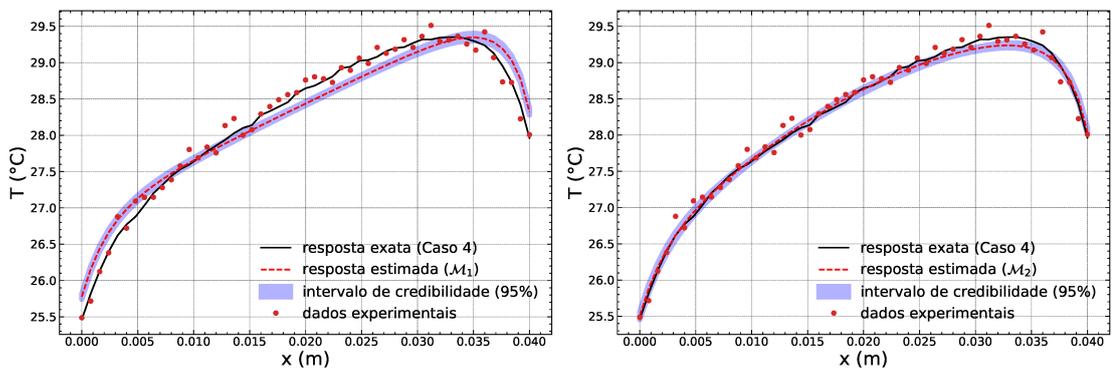
Figura 26 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) - Regime estacionário:

Caso 4



(a) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;
 $x = \frac{L_y}{2} m$

(b) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;
 $x = \frac{L_y}{2} m$



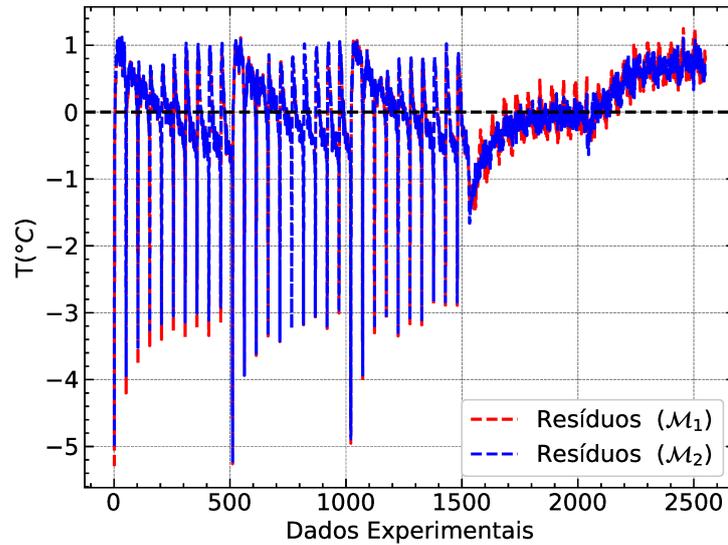
(c) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_1 ;
 $y = 0,001m$

(d) Resposta Estimada - Modelo \mathcal{M}_2 ;
 $y = 0,001m$

Fonte: O autor, 2023.

É possível notar que \mathcal{M}_2 apresenta um melhor ajuste aos dados experimentais, principalmente ao longo do microcanal (Figura 26d), onde $h_i(x)$ possui maior sensibilidade. A Figura 27 apresenta os resíduos das soluções apresentadas em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 27 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 4



Fonte: O autor, 2023.

A Tabela 12 apresenta os valores relativos à seleção de classe de modelos encontrados no Caso 4.

Tabela 12 - Seleção de modelos: Caso 4

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	$\ln(\text{evidência})$	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_0	-5.694.31	9.65	-5703.96	0
\mathcal{M}_1	-5579.97	17.29	-5597.27	0
\mathcal{M}_2	-5418.46	20.58	-5439.04	100

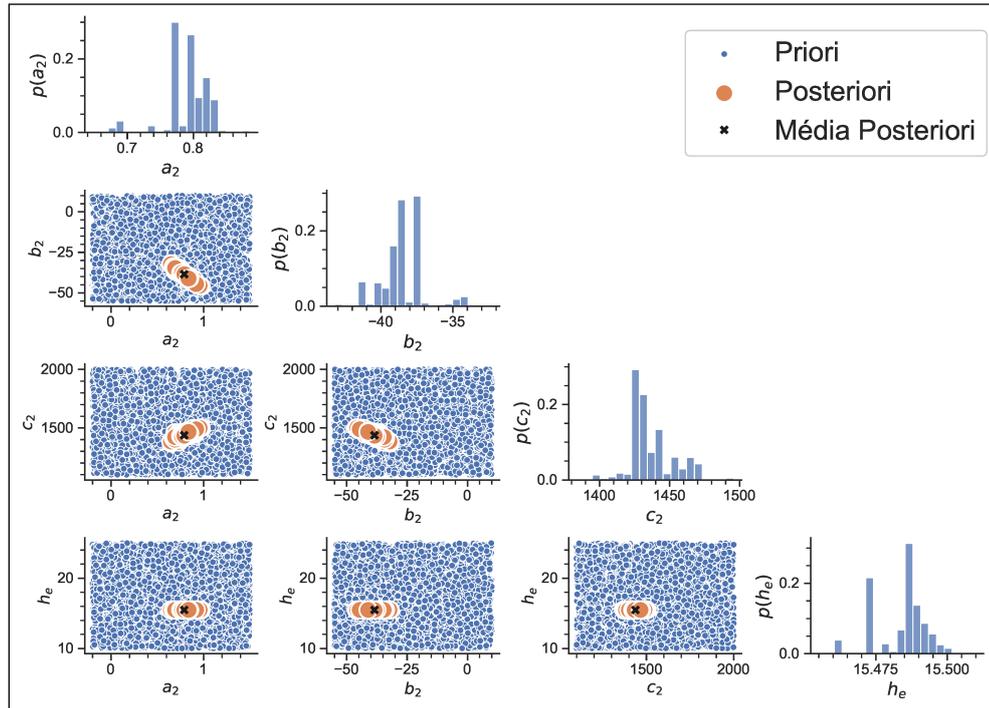
Fonte: O autor, 2023.

De maneira análoga ao Caso 3, o modelo com o melhor ajuste aos dados apresenta a maior probabilidade, pois exibe um comportamento funcional significativamente mais preciso (na maior parte do domínio) quando comparado aos dados experimentais, ao contrário dos outros modelos considerados. Apesar de mostrar um maior ganho de informação, o modelo \mathcal{M}_2 é escolhido, o que mais uma vez exemplifica a precisão do método em selecionar o modelo mais plausível para o sistema.

Dessa forma, mesmo que nenhum dos modelos utilizados no processo de estimativa para este caso represente de maneira totalmente acurada o comportamento do coeficiente $h_i(x)$ ao longo de todo o domínio, o algoritmo do TMCMC no contexto da seleção de classe de modelos, cumpre sua função em prever o modelo com maior probabilidade de maneira correta, mostrando mais uma vez a eficácia da metodologia, mesmo para casos onde há discrepância na modelagem matemática.

A Figura 28 apresenta as densidades a posteriori dos parâmetros estimados de \mathcal{M}_2 , assim como a correlação entre os mesmos para o Caso 4.

Figura 28 - Estimação dos parâmetros do Caso 4 para a classe de modelo \mathcal{M}_2



Fonte: O autor, 2023.

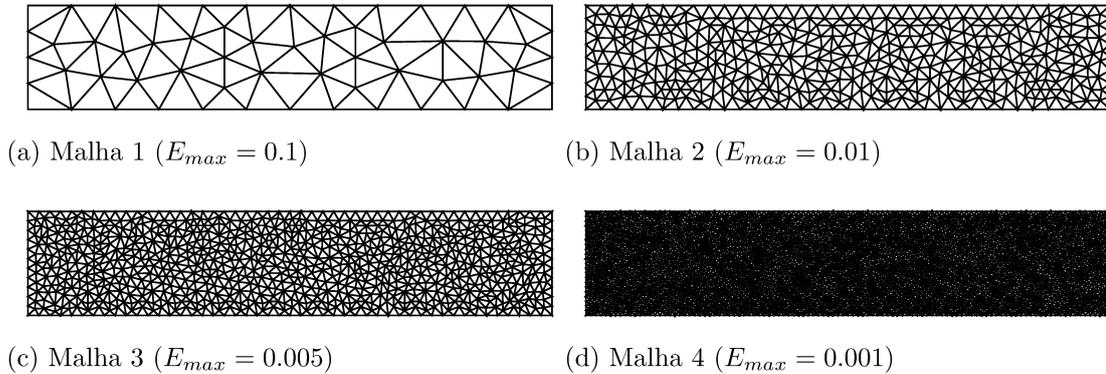
5.2 Convecção Interna Em Um Microcanal Em Regime de *Slip-Flow*

Esta seção apresenta os resultados obtidos no problema de convecção interna em um microcanal no regime de *slip-flow* descrito no capítulo 3. Serão apresentados resultados referente a uma análise de convergência de malha no domínio do problema direto, solucionado através do método de elementos finitos da rotina NDSolve do *software* Mathematica 11.3. Também serão apresentados os resultados da seleção de classe de modelos conduzida para os diferentes casos considerados.

A análise de convergência de malha desempenha um papel crucial na resolução de problemas utilizando o método de elementos finitos. Essa análise é fundamental para avaliar a precisão e confiabilidade dos resultados numéricos obtidos por meio da discretização da geometria do domínio. A convergência de malha refere-se à verificação de como os resultados se aproximam de uma solução precisa à medida que a malha é refinada. Uma malha mais fina permite uma representação mais detalhada da geometria e, conseqüentemente, uma aproximação mais precisa do comportamento físico do sistema em análise. Com o objetivo de avaliar o impacto do refinamento da malha na precisão da solução, foram criadas quatro malhas distintas (Figura 29), cujos elementos possuem formato triangular. Neste processo, o tamanho máximo de elemento foi variado (E_{max} na Figura 29 representa o tamanho máximo do elemento). As soluções obtidas com cada

uma destas malhas será comparada com a solução gerada pelo método padrão (*default*) da rotina NDSolve.

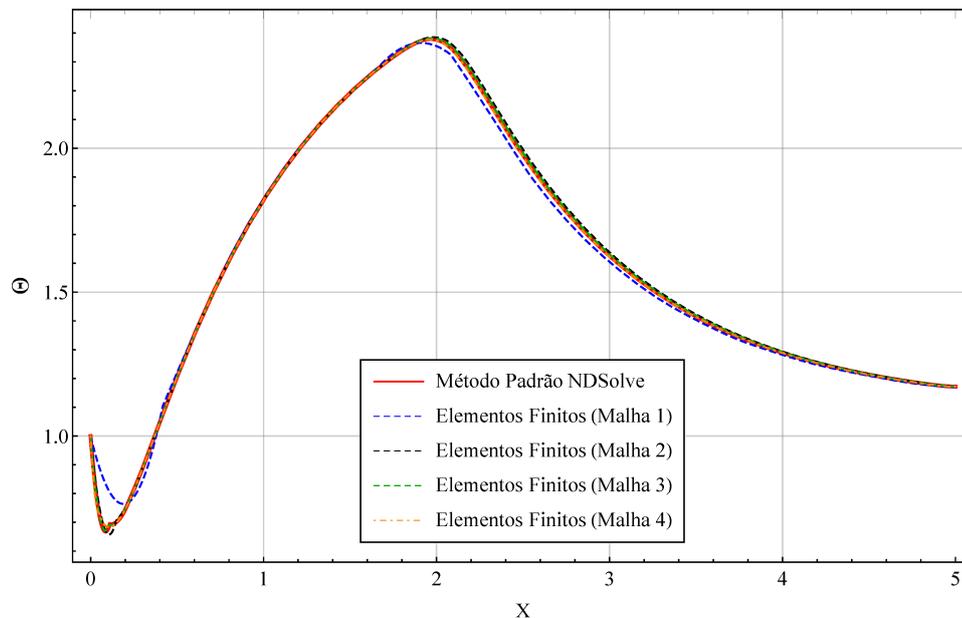
Figura 29 - Malhas de elementos finitos analisadas



Fonte: O autor, 2023.

Assim, foram obtidas soluções utilizando a rotina NDSolve para cada uma das malhas e a comparação gráfica é apresentada na figura a seguir. Vale notar que a solução presente na Figura 30 se dá na posição $Y = 1$ e ao longo de X , que é a parede superior do microcanal onde serão tomadas as medições experimentais utilizadas na solução do problema inverso.

Figura 30 - Comparação das soluções obtidas para cada uma das malhas de elementos finitos



É possível notar que a Malha 1 apresenta um erro considerável em relação à solução padrão da NDSolve (principalmente no início do domínio, na região do contorno), porém conforme o tamanho do elemento diminui, ou seja, a malha fica mais refinada, as soluções

convergem para valores muito próximos. A Tabela 13 apresenta valores numéricos para o erro médio absoluto e erro máximo absoluto para cada uma das malhas. Outro ponto de destaque é o fluxo de calor utilizado para a análise de convergência. Foi utilizado o fluxo no formato de degrau (Modelo M1A que será descrito na seção de análise da solução do problema inverso desta seção).

Tabela 13 - Erros absolutos na análise de malha

Malha	Erro Médio	Erro Máximo
Malha 1	0.01629	0.16411
Malha 2	0.00620	0.02746
Malha 3	0.00262	0.01008
Malha 4	0.00164	0.00853

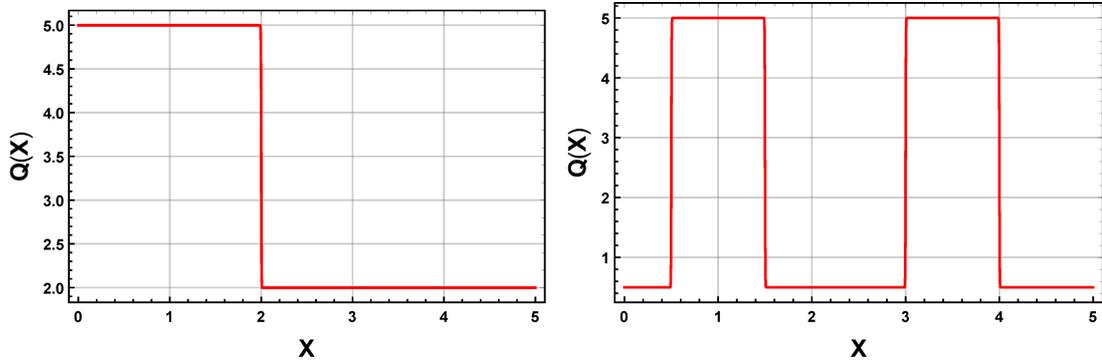
Fonte: O autor, 2023.

A partir da Malha 2 a solução apresenta erros máximos da ordem de 1% (segunda casa decimal). Optou-se então por escolher a Malha 2 como padrão na solução do problema inverso, pois apresenta uma boa convergência e é menos intensa computacionalmente quando comparada com as Malhas 3 e 4.

5.2.1 Problema Inverso: Seleção de Classe de Modelos

Esta seção apresenta resultados numéricos relacionados ao problema inverso de seleção de classe de modelos de um sistema parametrizado em termos do fluxo de calor imposto em um de seus contornos. Seguindo a mesma lógica do problema apresentado na seção 5.1.1, nesta seção serão propostos dois casos de referência, e para cada um desses casos quatro modelos distintos serão testados de maneira que após a solução do problema inverso espera-se selecionar o modelo mais plausível de acordo com a teoria apresentada. A Figura 31 apresenta os fluxos considerados nos dois casos de referência. Vale lembrar que caso de referência significa que a partir deste modelo serão gerados os dados experimentais simulados, utilizados na solução do problema inverso.

Figura 31 - Fluxos de calor considerados para a geração dos dados experimentais sintéticos no problema



(a) Caso de Referência 1

(b) Caso de Referência 2

Fonte: O autor, 2023.

As duas funções representadas na figura podem ser gerada a partir da seguinte equação:

$$Q(X) = \Phi_1 + \sum_{i=2}^N \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]} \quad (41)$$

onde $\Phi = [\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N]$ representa o vetor com as intensidades do fluxo e $\mathbf{X} = [X_1, X_2, \dots, X_N]$ o vetor com as posições relativas a cada intensidade. Por exemplo, para o caso de referência 1, tem-se um vetor $\Phi = \{5; 2\}$ e um vetor de posições $\mathbf{X} = \{0; 2\}$. Já para o caso de referência 2 tem-se $\Phi = \{0,5; 5; 0,5; 5; 0,5\}$ e $\mathbf{X} = \{0; 0,5; 1,5; 3; 4\}$. A seguir serão apresentadas duas tabelas, cada uma delas com os modelos utilizados na solução do problema inverso para seus respectivos casos de referência. A Tabela 14 mostra os modelos utilizados para estimativa do fluxo de calor levando em consideração o caso de referência 1 (Figura 31a). A Tabela 15 está relacionada com os modelos utilizados no caso de referência 2 (Figura 31b).

Tabela 14 - Modelos considerados para o fluxo de calor $Q(X)$: Caso de referência 1.

Modelo	$Q(X)$	Vetor de Parâmetros
\mathcal{M}_{1A}	$\Phi_1 + \sum_{i=2}^2 \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]}$	$\theta = [\Phi_1, \Phi_2, X_1, X_2]^T$
\mathcal{M}_{2A}	$\Phi_1 + \sum_{i=2}^3 \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]}$	$\theta = [\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, X_1, X_2, X_3]^T$
\mathcal{M}_{3A}	$\Phi_1 \cdot \sin[\Phi_2 \cdot x] + \Phi_3 \cdot \cos[\Phi_4 \cdot x] + \Phi_5$	$\theta = [\Phi_1, \dots, \Phi_5]^T$
\mathcal{M}_{4A}	21 Parâmetros Igualmente Espaçados	$\theta = [\Phi_1, \dots, \Phi_{21}]^T$

Fonte: O autor, 2023.

Da tabela apresentada é possível notar que os modelos \mathcal{M}_{1A} e \mathcal{M}_{2A} são funções degrau e possuem como diferença a quantidade de transições (uma e duas transições respectivamente). O modelo \mathcal{M}_{3A} é uma combinação das funções Seno e Cosseno, parametrizadas pelas amplitudes e frequências e \mathcal{M}_{4A} é uma interpolação linear de 21 parâmetros igualmente espaçados ao longo do domínio. Assim como no problema da seção 5.1.1, os dados experimentais serão simulados com o modelo de referência e estimado com os modelos das Tabelas 14 e 15. Após essas estimativas, a evidência será analisada e o modelo mais plausível identificado.

Tabela 15 - Modelos considerados para o fluxo de calor $Q(X)$: Caso de referência 2.

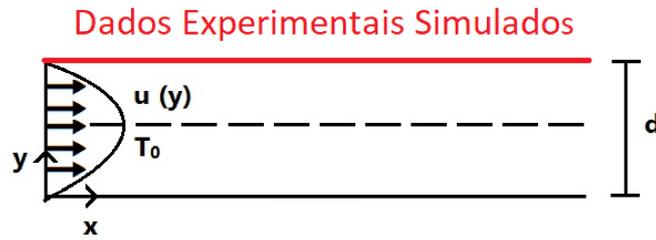
Modelo	$Q(X)$	Vetor de Parâmetros
\mathcal{M}_{1B}	$\Phi_1 + \sum_{i=2}^3 \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]}$	$\theta = [\Phi_1, \Phi_2, \Phi_3, X_1, X_2, X_3]^T$
\mathcal{M}_{2B}	$\Phi_1 + \sum_{i=2}^5 \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]}$	$\theta = [\Phi_1, \dots, \Phi_5, X_1, \dots, X_5]^T$
\mathcal{M}_{3B}	$\Phi_1 + \sum_{i=2}^7 \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{1 + \exp[-\gamma(X - X_i)/L]}$	$\theta = [\Phi_1, \dots, \Phi_7, X_1, \dots, X_7]^T$
\mathcal{M}_{4B}	21 Parâmetros Igualmente Espaçados	$\theta = [\Phi_1, \dots, \Phi_{21}]^T$

Fonte: O autor, 2023.

Para o caso de referência 2, os modelos utilizados são parecidos, porém apresentam um maior grau de liberdade para cada transição (pois, para cada degrau é necessário estimar a intensidade e posições da "subida" e "descida"). Optou-se também por utilizar modelos com 1, 2 e 3 pontos de transição na estimativa (\mathcal{M}_{1B} , \mathcal{M}_{2B} e \mathcal{M}_{3B} respectivamente), assim como o modelo utilizando a interpolação linear de 21 parâmetros distribuídos no domínio.

Os parâmetros do TMCMC seguem o padrão utilizado até o momento: $N_S = 3000$, $COV = 100\%$. Para ambos os casos, as medidas experimentais simuladas foram obtidas na face superior do microcanal $Y = 1$ com 500 medições igualmente espaçadas. Um ruído Gaussiano com média zero e desvio padrão 0,05 foi adicionado as medições. A Figura 32 ilustra a posição onde são tomadas as medições experimentais dos dados simulados utilizados na solução do problema inverso apresentado nesta seção.

Figura 32 - Posição onde são tomadas as medições experimentais simuladas



Fonte: O autor, 2023.

Para a solução do problema direto, foram adotados os valores utilizados em Cotta, Knupp e Naveira-Cotta (2016) apresentados na Tabela 16.

Tabela 16 - Valores atribuídos aos parâmetros.

Parâmetro	Valor
B_i	2,0
L	5,0
Θ_0	1,0
K_n	0,025
β_v	1,5
β_t	2,0

Fonte: O autor, 2023.

5.2.2 Caso 1

Como dito no capítulo, nesta seção serão apresentados os resultados do problema inverso a partir dos dados gerados com o modelo do caso de referência 1. Para a estimativa foram escolhidos quatro modelos distintos e deseja-se verificar o modelo mais plausível apontado pelo algoritmo. O primeiro modelo (\mathcal{M}_{1A}) representa uma função que pode assumir um degrau apenas e possui 4 parâmetros a serem estimados (2 para intensidade do fluxo e 2 das posições de transição). O segundo (\mathcal{M}_{2A}) pode assumir até dois degraus e possui 10 parâmetros no vetor incerto (5 para intensidade e 5 para posição). O modelo \mathcal{M}_{3A} é uma combinação de seno e cosseno parametrizados pelas amplitudes e frequências e possui 5 parâmetros incertos. Por fim, \mathcal{M}_{4A} considera 21 parâmetros ao longo da parede em X e a estimativa da função se dá pela interpolação linear dos valores encontrados. Os valores exatos para os parâmetros (valores utilizados no fluxo de referência) são: $\Phi = \{5; 2\}$ e $\mathbf{X} = \{0; 2\}$ e fluxo gerado é o da Figura 31a. Vale ressaltar também, que

as priors para todos os parâmetros foram consideradas iguais, com uma distribuição uniforme $\mathcal{U}[0,10]$ para as intensidades de fluxo e $\mathcal{U}[0,L]$ para as posições. A Tabela 17 apresenta a média dos parâmetros encontrados após a solução do problema inverso para cada um dos modelos analisados.

Tabela 17 - Média dos parâmetros estimados para cada modelo utilizado no processo de inversão: Caso 1

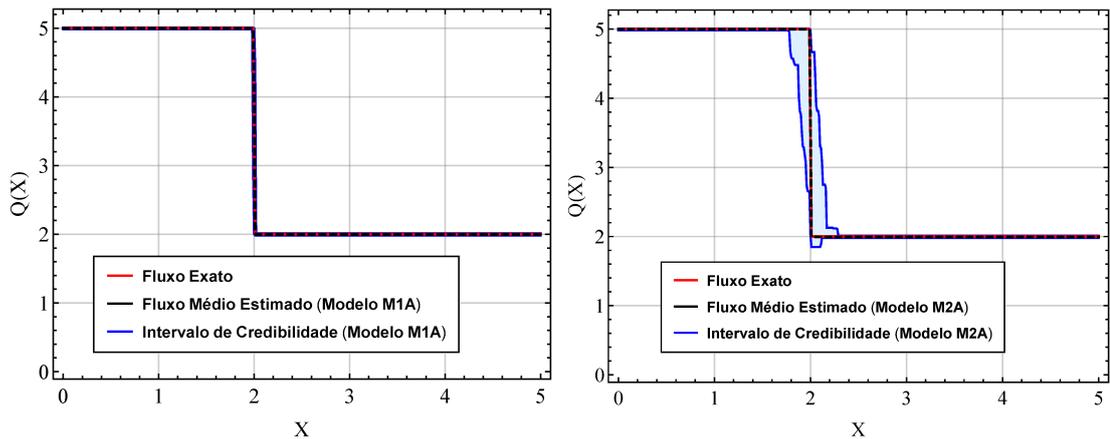
i	\mathcal{M}_{1A}		\mathcal{M}_{2A}		\mathcal{M}_{3A}	\mathcal{M}_{4A}
	Φ_i	X_i	Φ_i	X_i	Φ_i	X_i
1	4.99800	0.0017	4.99602	0.0021	1.27921	5.07205
2	1.99722	2.00092	1.98952	1.99941	3.12784	4.87949
3	—	—	1.99453	2.00132	2.3663	5.40061
4	—	—	—	—	0.999184	3.92488
5	—	—	—	—	1.6589	6.3793
6	—	—	—	—	—	4.30422
7	—	—	—	—	—	5.06004
8	—	—	—	—	—	4.79808
9	—	—	—	—	—	4.76374
10	—	—	—	—	—	0.142659
11	—	—	—	—	—	3.29726
12	—	—	—	—	—	1.45246
13	—	—	—	—	—	1.55915
14	—	—	—	—	—	3.18013
15	—	—	—	—	—	0.550991
16	—	—	—	—	—	2.86851
17	—	—	—	—	—	2.30372
18	—	—	—	—	—	1.08434
19	—	—	—	—	—	2.35876
20	—	—	—	—	—	1.88397
21	—	—	—	—	—	4.80309

Fonte: O autor, 2023.

É possível observar a partir da tabela apresentada, que os valores encontrados para os parâmetros do modelo \mathcal{M}_{1A} são muito próximos dos valores exatos utilizados na geração dos dados experimentais. De fato, isso era esperado pois este modelo é o mesmo do caso de referência. Por outro lado, \mathcal{M}_{2A} pode assumir até dois degraus, mas o algoritmo corretamente identifica que o fluxo exato possui apenas um ponto de transição, estimando os parâmetros de maneira que a função possua valores muito próximos nas posições estimadas, forçando a função a assumir também apenas um degrau. Os parâmetros dos

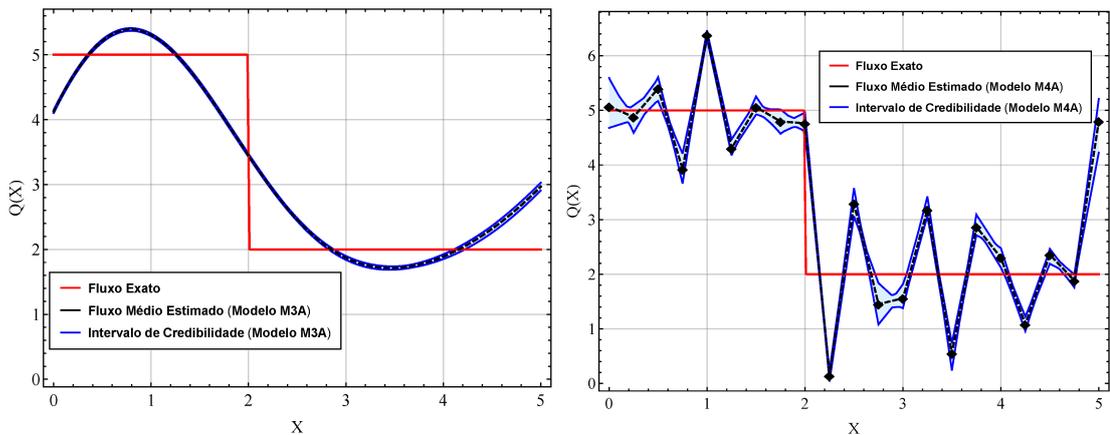
outros modelos testados não possuem correlação com o caso de referência mas realizaram boas estimativas para o fluxo como será apresentado nas próximas figuras. A Figura 33 mostra as funções estimadas para cada um dos modelos, assim como seus intervalos de credibilidade de 95%.

Figura 33 - Fluxos estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1



(a) Modelo \mathcal{M}_{1A}

(b) Modelo \mathcal{M}_{2A}



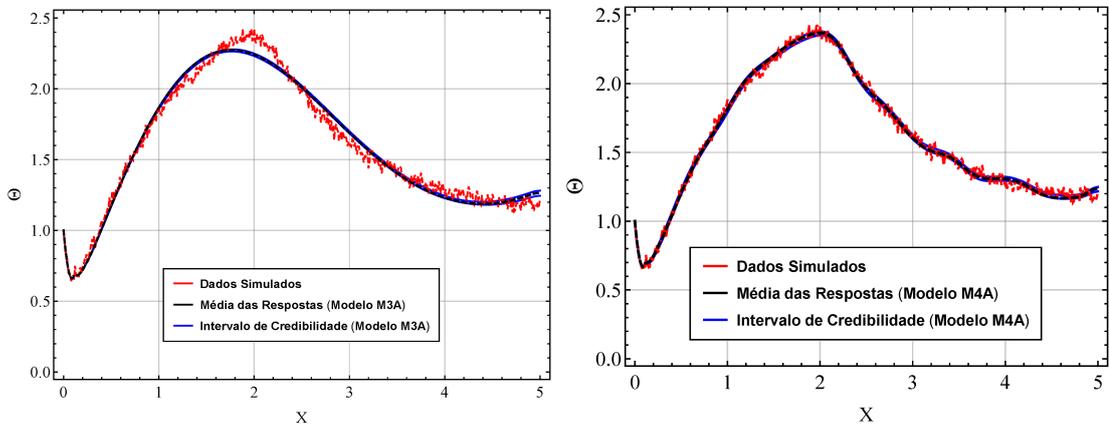
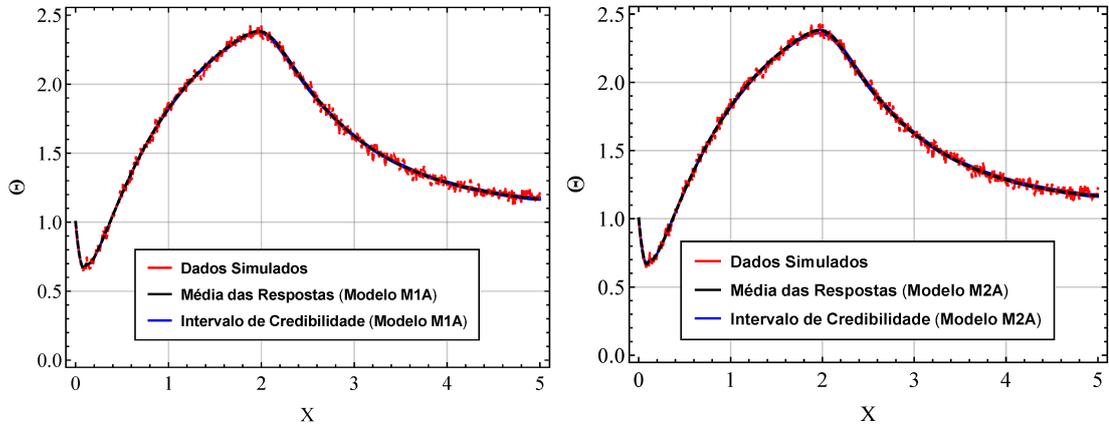
(c) Modelo \mathcal{M}_{3A}

(d) Modelo \mathcal{M}_{4A}

Fonte: O autor, 2023.

Analisando a figura, fica evidente o que foi discutido a partir dos dados da tabela. O modelo \mathcal{M}_{1A} estima muito bem o fluxo exato, com intervalo de credibilidade estreito, o que implica em uma incerteza baixa em relação à resposta. O segundo modelo também consegue estimar de maneira muito precisa o fluxo exato, porém com maior incerteza associada, principalmente na região de transição. \mathcal{M}_{3A} consegue atingir também uma boa representação do fluxo no domínio prescrito, dadas suas limitações. E por fim, o modelo de 21 parâmetros consegue identificar as regiões de interesse, porém com alta variação nos valores estimados, o que indica a necessidade de regularização. A Figura 34 mostra a resposta do campo de temperaturas a partir dos modelos estimados comparados com o dados experimentais simulados.

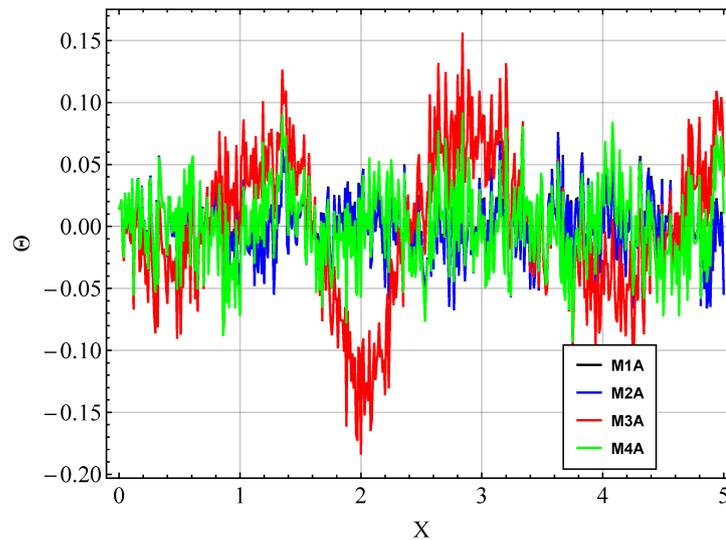
Figura 34 - Campos de temperaturas estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1



Fonte: O autor, 2023.

Todos os modelos conseguem estimar de maneira satisfatória o campo de temperaturas experimental. O único que tem mais dificuldade na tarefa é o modelo com as funções seno e cosseno por ser o mais diferente entre eles quando comparado com o caso de referência. A Figura 35 apresenta os resíduos das soluções apresentadas em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 35 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1



Fonte: O autor, 2023.

A Tabela 18 apresenta os resultado da seleção de classe de modelos para o caso apresentado nesta seção.

Tabela 18 - Seleção de modelos: Caso 1

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	$\ln(\text{evidência})$	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_{1A}	-248.97	211,13	-460.10	93.58
\mathcal{M}_{2A}	-248.89	213,89	-462.78	6.42
\mathcal{M}_{3A}	-869.63	406,05	-1275.26	0
\mathcal{M}_{4A}	-318.74	262,33	-581.07	0

Fonte: O autor, 2023.

Os resultados obtidos pela seleção de modelo são satisfatórios, pois se alinham com a expectativa para o problema. O modelo \mathcal{M}_{1A} corretamente se apresenta como modelo mais plausível, pois de fato é semelhante ao modelo utilizado para gerar os dados experimentais simulados. Observa-se também que o modelo \mathcal{M}_{2A} apresenta um ajuste de dados muito próximo a \mathcal{M}_{1A} , porém é penalizado pela sua maior complexidade. Os outros modelos são mais complexos (maior número de parâmetros) além de apresentarem um pior ajuste de dados, sendo assim descartados pelo método.

5.2.3 Caso 2

Nesta seção serão apresentados os resultados da seleção de classe de modelos a partir dos dados gerados com o caso de referência 2. Vale ressaltar as duas diferenças

principais em relação ao caso da seção anterior: (1) Os dados experimentais são agora gerados a partir do modelo com fluxo de calor representado na Figura 31b. (2) Os modelos utilizados na estimativa são os apresentados na Tabela 15. Os valores exatos para os parâmetros (valores utilizados no fluxo de referência) são: $\Phi = \{0,5; 5; 0,5; 5; 0,5\}$ e $X = \{0; 0,5; 1,5; 3; 4\}$. A Tabela 19 apresenta a média dos parâmetros encontrados após a solução do problema inverso para cada um dos modelos analisados.

Tabela 19 - Média dos parâmetros estimados para cada modelo utilizado no processo de inversão: Caso 2

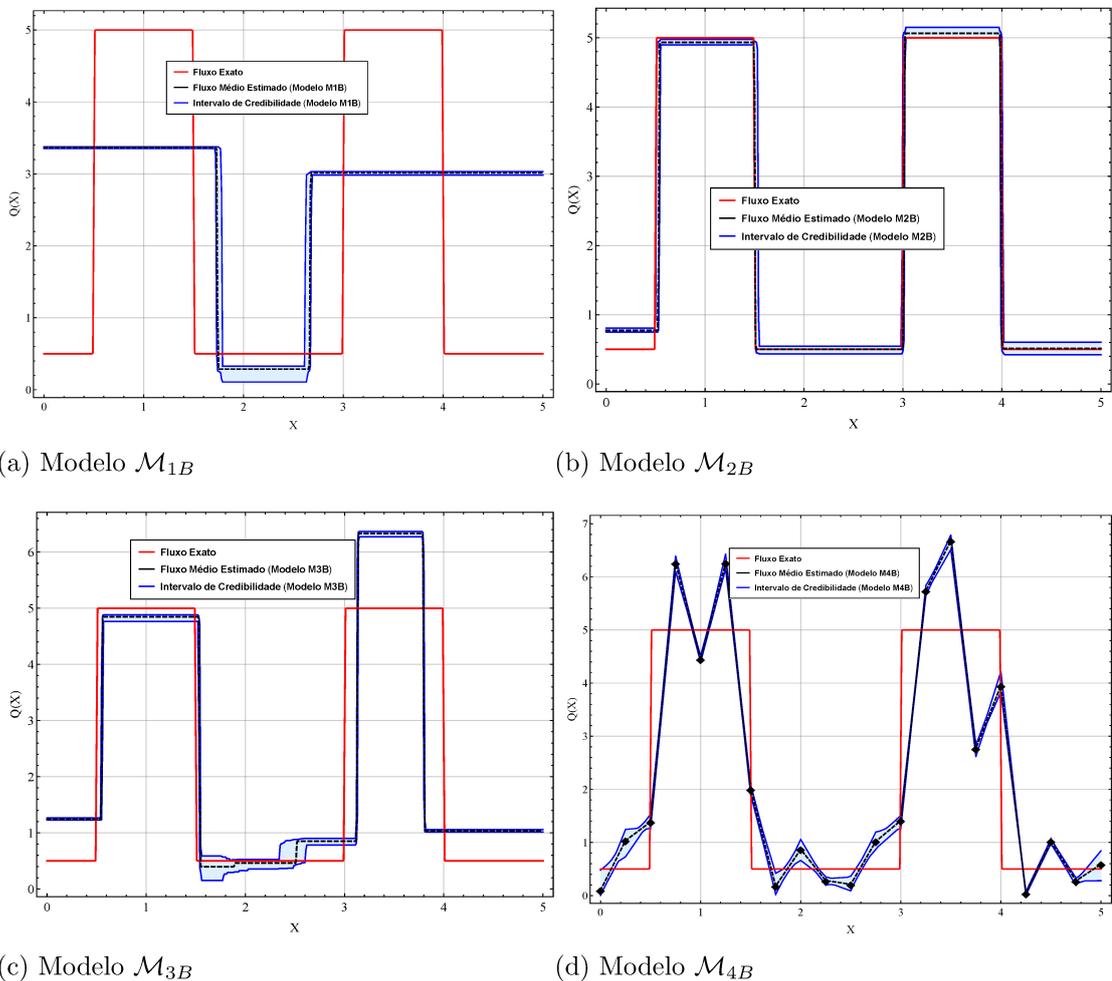
i	\mathcal{M}_{1B}		\mathcal{M}_{2B}		\mathcal{M}_{3B}		\mathcal{M}_{4B}
	Φ_i	X_i	Φ_i	X_i	Φ_i	X_i	Φ_i
1	3.36764	3.22206	0.77444	0.00175	7.14765	7.25370	0.09984
2	6.09471	2.66558	4.93424	0.53213	6.07004	5.68785	1.03585
3	3.01404	1.73817	0.50112	1.50276	5.44551	5.00668	1.38707
4	—	—	5.06453	3.01107	5.04655	4.65836	6.25982
5	—	—	0.51329	3.99159	4.78235	4.46566	4.44994
6	—	—	—	—	7.25370	4.21132	6.26635
7	—	—	—	—	7.25370	4.18899	2.00199
8	—	—	—	—	—	—	0.18020
9	—	—	—	—	—	—	0.86997
10	—	—	—	—	—	—	0.28296
11	—	—	—	—	—	—	0.21210
12	—	—	—	—	—	—	1.01986
13	—	—	—	—	—	—	1.41176
14	—	—	—	—	—	—	5.73565
15	—	—	—	—	—	—	6.68183
16	—	—	—	—	—	—	2.76862
17	—	—	—	—	—	—	3.95149
18	—	—	—	—	—	—	0.03866
19	—	—	—	—	—	—	1.02167
20	—	—	—	—	—	—	0.27812
21	—	—	—	—	—	—	0.59008

Fonte: O autor, 2023.

Pode-se inferir a partir da tabela apresentada, que os valores encontrados para os parâmetros do modelo \mathcal{M}_{1B} não conseguem estimar o fluxo exato de maneira satisfatória. Isso já era esperado devido à grande discrepância nos modelos, pois \mathcal{M}_{1B} pode assumir no máximo um degrau. Os resultados da estimativa indicam que o ponto de transição é posicionado em um local onde há uma tentativa de amenizar a diferença entre a resposta

estimada do sistema e a resposta observada. O modelo \mathcal{M}_{2B} apresenta a melhor estimativa e isso é explicado pelo fato desse possuir a mesma forma do modelo utilizado na geração dos dados. \mathcal{M}_{3B} apresentou também uma boa estimativa, identificando as posições e intensidades das transições, porém com maior erro e incerteza, devido à quantidade maior de parâmetros a serem estimados. A interpolação linear dos 21 parâmetros representada como modelo \mathcal{M}_{4B} também conseguiu identificar os dois pontos de interesse, com boas estimativas também nas intensidades do fluxo, apesar de ainda apresentar uma variação significativa nas estimativas dos parâmetros. A Figura 36 mostra as funções estimadas para cada um dos modelos, assim como seus intervalos de credibilidade de 95%.

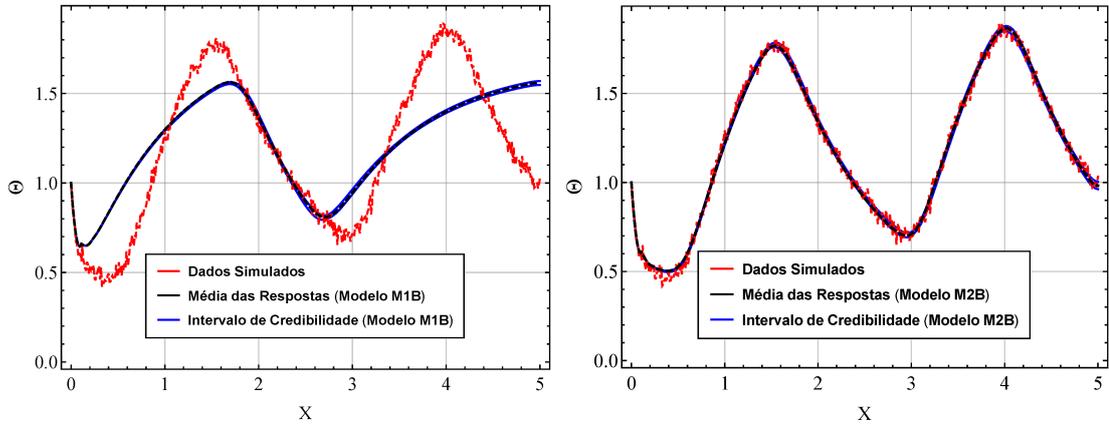
Figura 36 - Fluxos estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2



Fonte: O autor, 2023.

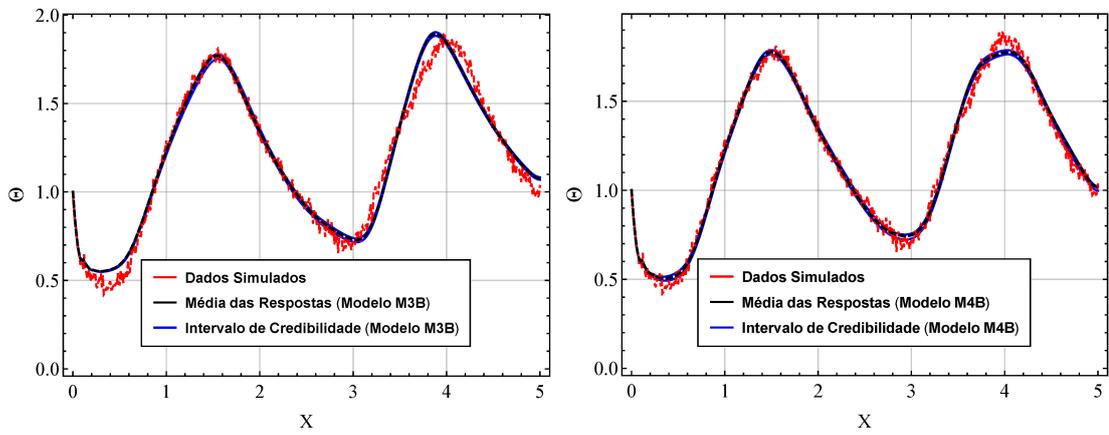
A análise da figura complementa o que foi discutido sobre a tabela de estimativa dos parâmetros e pode-se observar de maneira gráfica o que foi inferido. A Figura 37 mostra a resposta do campo de temperaturas a partir dos modelos estimados comparados com os dados experimentais simulados.

Figura 37 - Campos de temperaturas estimados e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2



(a) Modelo \mathcal{M}_{1B}

(b) Modelo \mathcal{M}_{2B}



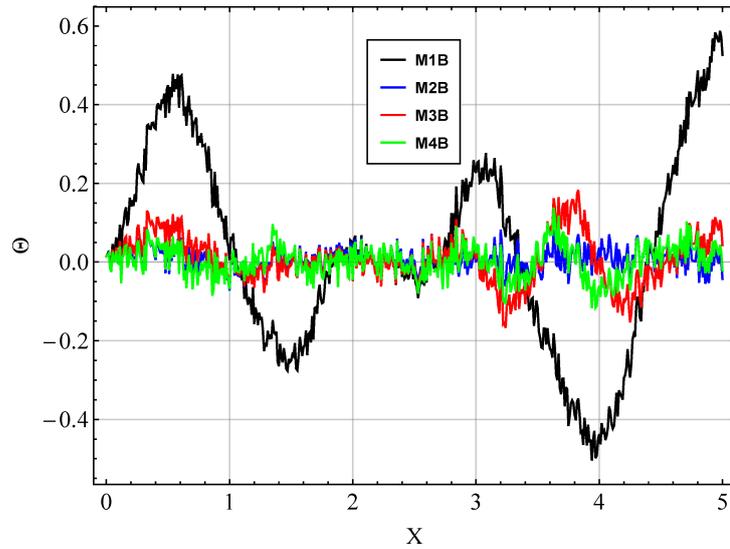
(c) Modelo \mathcal{M}_{3B}

(d) Modelo \mathcal{M}_{4B}

Fonte: O autor, 2023.

Todos os modelos, com exceção de M1B, conseguem estimar de maneira satisfatória o campo de temperaturas experimental. O único que tem mais dificuldade na tarefa é o modelo que pode representar apenas um degrau por ser o mais diferente entre eles quando comparado com o caso de referência. A Figura 38 apresenta os resíduos das soluções apresentadas em relação aos dados experimentais simulados.

Figura 38 - Resíduos das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2



Fonte: O autor, 2023.

A Tabela 20 apresenta os resultado da seleção de classe de modelos para o caso apresentado nesta seção

Tabela 20 - Seleção de modelos Bayesiana: Caso de Referência 2

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	$\ln(\text{evidência})$	Probabilidade (%)
\mathcal{M}_{1B}	-32200,48	87,52	-32288,73	0
\mathcal{M}_{2B}	-283,13	136,17	-419,30	100
\mathcal{M}_{3B}	-1052,45	295,87	-1348.32	0
\mathcal{M}_{4B}	-510.59	217,68	-728.27	0

Fonte: O autor, 2023.

Os resultados obtidos pela seleção de modelo neste caso são também satisfatórios, pois se alinham com a expectativa para o problema. O modelo \mathcal{M}_{2B} corretamente se apresenta como modelo mais plausível, com probabilidade de 100%, porque apesar de outros modelos também apresentarem um bom ajuste de dados, \mathcal{M}_{2B} é bastante superior e possui menos parâmetros que os outros que apresentaram bons resultados.

CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

A pesquisa conduzida neste trabalho concentrou-se na seleção de modelos Bayesianos, por meio da formulação de problemas inversos de transferência de calor em microcanais. O objetivo principal foi a caracterização e identificação de coeficientes importantes para formulação matemática dos sistemas, assim como a análise de qual modelo testado é o mais plausível de acordo com os dados experimentais observados.

A abordagem do trabalho foi dividida em dois problemas distintos. No primeiro, buscou-se a estimativa dos coeficientes de convecção em um dissipador térmico com microcanal, tendo foco maior no coeficiente relativo ao escoamento interno, pois apresenta grande relevância no estudo de sistemas do tipo. Este problema visa representar uma aplicação prática dos sistemas estudados. No segundo problema, a análise de um modelo específico de microcanal foi conduzida, levando em conta características particulares como o escorregamento de velocidade e salto de temperatura nas paredes.

A solução do problema direto para o primeiro problema foi alcançada através do método de diferenças finitas em sua formulação explícita (FTCS). O método apresentou ótima convergência quando comparado com outras rotinas robustas de solução de equações diferenciais parciais. A fim de garantir maior confiabilidade às soluções obtidas, foi adotado outro *software* de simulação, o *COMSOL Multiphysics 6.0*, para verificar os resultados provenientes do método empregado. Os resultados mostraram-se bastante satisfatórios, pois apresentaram uma boa convergência mesmo para o caso onde há uma discrepância entre os modelos. A simulação no *COMSOL* também possibilitou um teste interessante no problema inverso relativo ao este problema, distanciando o "crime inverso" em um dos casos estudados.

No segundo problema a solução utilizada foi obtida com auxílio da rotina *NDSolve* do *software Wolfram Mathematica 11.3* adotando o método de elementos finitos intrínseco da rotina de solução. Para avaliar a convergência do método, foram empregados diversos tipos de malhas, resultando em soluções notavelmente próximas. Em todos os casos de refinamento de malha, o erro médio foi da ordem da segunda casa decimal, evidenciando sua consistência.

A técnica empregada para obter a solução do problema inverso foi elaborada dentro de uma perspectiva Bayesianas, a partir Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov Transicional (TMCMC). Esse algoritmo proporciona a estimativa da evidência de modelo sem custos computacionais adicionais, possibilitando a fácil comparação entre eles.

Em todos os casos estudados, o modelo mais plausível foi identificado corretamente, mesmo quando havia diferenças entre os modelos utilizados para gerar os dados experimentais sintéticos e os utilizados no processo de inversão. Esses resultados corroboraram a eficiência da metodologia abordada no contexto de seleção de modelos Bayesianas,

mostrando sua eficácia para os diversos casos de estudo.

Na perspectiva de futuras investigações, a ampliação para problemas tridimensionais na transferência de calor emerge como uma etapa crucial no desenvolvimento. Até o momento, a abordagem adotada concentrou-se principalmente em modelos bidimensionais para capturar aspectos essenciais dos fenômenos térmicos nos sistemas estudados. No entanto, a transição para problemas tridimensionais representa um avanço significativo, proporcionando uma representação mais fidedigna da complexidade inerente à transferência de calor. A inclusão dessa dimensão adicional não apenas aprimorará a precisão das análises, mas também abrirá caminho para a exploração de fenômenos térmicos em estruturas mais realistas.

Propõe-se também, para a continuidade deste trabalho que as técnicas desenvolvidas e validadas sejam aplicadas em problemas reais com a realização de ensaios experimentais, sendo este mais um passo importante para validação das metodologias estudadas.

REFERÊNCIAS

- ABO-ZAHHAD, E. M. et al. A micro-metal inserts based microchannel heat sink for thermal management of densely packed semiconductor systems. *Sustainability*, MDPI, v. 14, n. 21, p. 14182, 2022.
- AGRAWAL, A.; PRABHU, S. Survey on measurement of tangential momentum accommodation coefficient. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, AIP Publishing, v. 26, n. 4, p. 634–645, 2008.
- ASTH, L. da S. Solução de problemas diretos e inversos para simulação de um dissipador térmico com microcanal. *Universidade do Estado do Rio de Janeiro*, Trabalho de Conclusão de Curso, 2021.
- BAYER-BUHR, D. et al. Determination of thermal accommodation coefficients on casio3 and sio2 using molecular dynamics and experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 183, p. 122219, 2022.
- BECK, J. L. Bayesian system identification based on probability logic. *Structural Control and Health Monitoring*, Wiley Online Library, v. 17, n. 7, p. 825–847, 2010.
- BECK, J. L.; YUEN, K.-V. Model selection using response measurements: Bayesian probabilistic approach. *Journal of Engineering Mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 130, n. 2, p. 192–203, 2004.
- BERGER, J. et al. Parameter estimation and model selection for water sorption in a wood fibre material. *Wood Science and Technology*, Springer, v. 54, p. 1423–1446, 2020.
- BETZ, W.; PAPAIOANNOU, I.; STRAUB, D. Transitional markov chain monte carlo: observations and improvements. *Journal of Engineering Mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 142, n. 5, p. 04016016, 2016.
- CARDOSO, R. D. S. et al. Application of approximate bayesian computational for estimate parameter and selection model in dynamic of hiv. *Conjecturas*, v. 22, n. 2, p. 1848–1866, 2022.
- CATANACH, T. A. *Computational methods for Bayesian inference in complex systems*. Tese (Doutorado) — California Institute of Technology, 2017.
- CHING, J.; CHEN, Y.-C. Transitional markov chain monte carlo method for bayesian model updating, model class selection, and model averaging. *Journal of engineering mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 133, n. 7, p. 816–832, 2007.
- CHING, J.; MUTO, M.; BECK, J. L. Bayesian linear structural model updating using gibbs sampler with modal data. In: MILLPRESS. *Proceedings of the 9th International Conference on Structural Safety and Reliability*. [S.l.], 2005. p. 2609–2616.
- CHING, J.; WANG, J.-S. Application of the transitional markov chain monte carlo algorithm to probabilistic site characterization. *Engineering Geology*, Elsevier, v. 203, p. 151–167, 2016.

- COLAÇO, M. J. et al. Application of two bayesian filters to estimate unknown heat fluxes in a natural convection problem. 2012.
- COTTA, R. M.; KNUPP, D. C.; NAVEIRA-COTTA, C. P. *Analytical heat and fluid flow in microchannels and microsystems*. [S.l.]: Springer, 2016. v. 164.
- COTTA, R. M.; MIKHAILOV, M. D. *Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. [S.l.]: Wiley Chichester, 1997.
- GUERRIERI, D. C.; NAVEIRA-COTTA, C. P. Experimental and theoretical analysis of a microchannel heat exchanger for high concentration photovoltaic cells. In: BEGEL HOUSE INC. *Proceedings of CONV-14: International Symposium on Convective Heat and Mass Transfer*. [S.l.], 2014.
- GULL, S. F. Bayesian inductive inference and maximum entropy. In: *Maximum-entropy and bayesian methods in science and engineering: foundations*. [S.l.]: Springer, 1988. p. 53–74.
- HE, S.; NG, C.-T. Guided wave-based identification of multiple cracks in beams using a bayesian approach. *Mechanical Systems and Signal Processing*, Elsevier, v. 84, p. 324–345, 2017.
- KAPIO, J.; SOMERSALO, E. *Statistical and computational inverse problems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 160.
- KANDLIKAR, S. et al. *Heat transfer and fluid flow in minichannels and microchannels*. [S.l.]: elsevier, 2005.
- KNUPP, D. C.; COTTA, R. M.; NAVEIRA-COTTA, C. P. Fluid flow and conjugated heat transfer in arbitrarily shaped channels via single domain formulation and integral transforms. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 82, p. 479–489, 2015.
- KNUPP, D. C.; NAVEIRA-COTTA, C. P.; COTTA, R. M. Theoretical–experimental analysis of conjugated heat transfer in nanocomposite heat spreaders with multiple microchannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 74, p. 306–318, 2014.
- KOO, J.-M. et al. Integrated microchannel cooling for three-dimensional electronic circuit architectures. *J. Heat Transfer*, v. 127, n. 1, p. 49–58, 2005.
- KULLBACK, S.; LEIBLER, R. A. On information and sufficiency. *The annals of mathematical statistics*, JSTOR, v. 22, n. 1, p. 79–86, 1951.
- MACKAY, D. J. *Information theory, inference and learning algorithms*. [S.l.]: Cambridge university press, 2003.
- MERCONE, S. et al. Nonlinear effects and joule heating in i-v curves in manganites. *Journal of applied physics*, American Institute of Physics, v. 98, n. 2, p. 023911, 2005.
- MORINI, G. L. Single-phase convective heat transfer in microchannels: a review of experimental results. *International journal of thermal sciences*, Elsevier, v. 43, n. 7, p. 631–651, 2004.

- MOTAMEDIAN, M.; RAHMATI, A. R. Analytical solution of a fully developed isothermal non-ideal gaseous slip flow in microchannels. *Challenges in Nano and Micro Scale Science and Technology*, University of Sistan and Baluchestan, Iranian Society Of Mechanical Engineers, v. 8, n. 2, p. 126–136, 2020.
- MUTO, M.; BECK, J. L. Bayesian updating and model class selection for hysteretic structural models using stochastic simulation. *Journal of Vibration and Control*, Sage Publications Sage UK: London, England, v. 14, n. 1-2, p. 7–34, 2008.
- NAVEIRA-COTTA, C. P.; COTTA, R. M.; ORLANDE, H. R. Inverse analysis of forced convection in micro-channels with slip flow via integral transforms and bayesian inference. *International journal of thermal sciences*, Elsevier, v. 49, n. 6, p. 879–888, 2010.
- ORLANDE, H. R. Inverse problems in heat transfer: new trends on solution methodologies and applications. *Journal of Heat Transfer*, v. 134, n. 3, p. 031011, 2012.
- OZISIK, M. Finite difference methods in heat transfer. *Boca Raton*, 1994.
- OZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. *Inverse heat transfer: fundamentals and applications*. [S.l.]: CRC press, 2021.
- PENG, X.; PETERSON, G. Convective heat transfer and flow friction for water flow in microchannel structures. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 39, n. 12, p. 2599–2608, 1996.
- PITT, M. A.; MYUNG, I. J. When a good fit can be bad. *Trends in cognitive sciences*, Elsevier, v. 6, n. 10, p. 421–425, 2002.
- PLETCHER, R. H.; TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. [S.l.]: CRC press, 2012.
- RADER, D. J. et al. *Measurements of thermal accommodation coefficients*. [S.l.], 2005.
- RAFTERY, A. E. Bayesian model selection in structural equation models. *Sage Focus Editions*, Sage Publications, v. 154, p. 163–163, 1993.
- SHANNON, C. E. A mathematical theory of communication. *The Bell system technical journal*, Nokia Bell Labs, v. 27, n. 3, p. 379–423, 1948.
- SHARMA, C. S. et al. Optimal thermal operation of liquid-cooled electronic chips. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 55, n. 7-8, p. 1957–1969, 2012.
- SHI, X. et al. Geometry parameters optimization for a microchannel heat sink with secondary flow channel. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 104, p. 89–100, 2019.
- SILVA, G. R. et al. Estimation of slip flow parameters in microscale conjugated heat transfer problems. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, Springer, v. 42, n. 5, p. 263, 2020.

STEPHAN, K. E. et al. Bayesian model selection for group studies. *Neuroimage*, Elsevier, v. 46, n. 4, p. 1004–1017, 2009.

TONI, T.; STUMPF, M. P. Simulation-based model selection for dynamical systems in systems and population biology. *Bioinformatics*, Oxford University Press, v. 26, n. 1, p. 104–110, 2010.

TUCKERMAN, D. B.; PEASE, R. F. W. High-performance heat sinking for vlsi. *IEEE Electron device letters*, IEEE, v. 2, n. 5, p. 126–129, 1981.

VAFAI, K.; ZHU, L. Analysis of two-layered micro-channel heat sink concept in electronic cooling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 42, n. 12, p. 2287–2297, 1999.

XIANG, J. et al. Heat transfer performance and structural optimization of a novel micro-channel heat sink. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, SpringerOpen, v. 35, n. 1, p. 1–12, 2022.

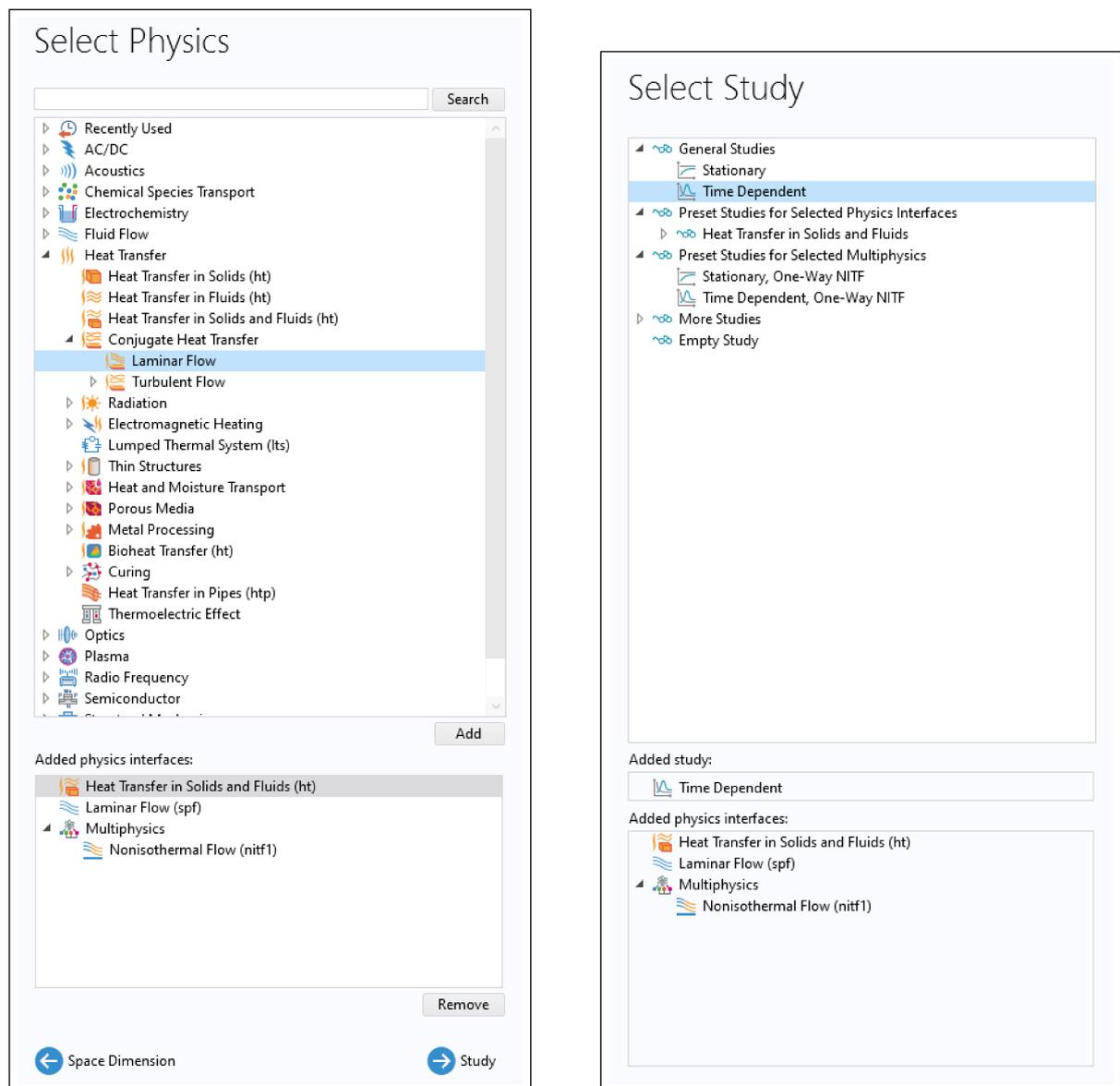
YAMAGUCHI, H. et al. Experimental measurements of thermal and tangential momentum accommodation coefficients on solid surfaces: Water vapor in comparison with noble gases. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 183, p. 122195, 2022.

ZHANG, W.-M.; MENG, G.; WEI, X. A review on slip models for gas microflows. *Microfluidics and nanofluidics*, Springer, v. 13, p. 845–882, 2012.

APÊNDICE A – Implementação no COMSOL Multiphysics

Nesta abordagem, foi adotada uma modelagem tridimensional, que incorpora as interfaces físicas relacionadas ao processo de transferência de calor em sólidos e fluidos em regime laminar (com fluidos não-isotérmicos), conforme mostrado na Figura 40(a), com estudo dependente do tempo, como demonstrado na Figura 40(b).

Figura 39 - Configurações Iniciais do Estudo



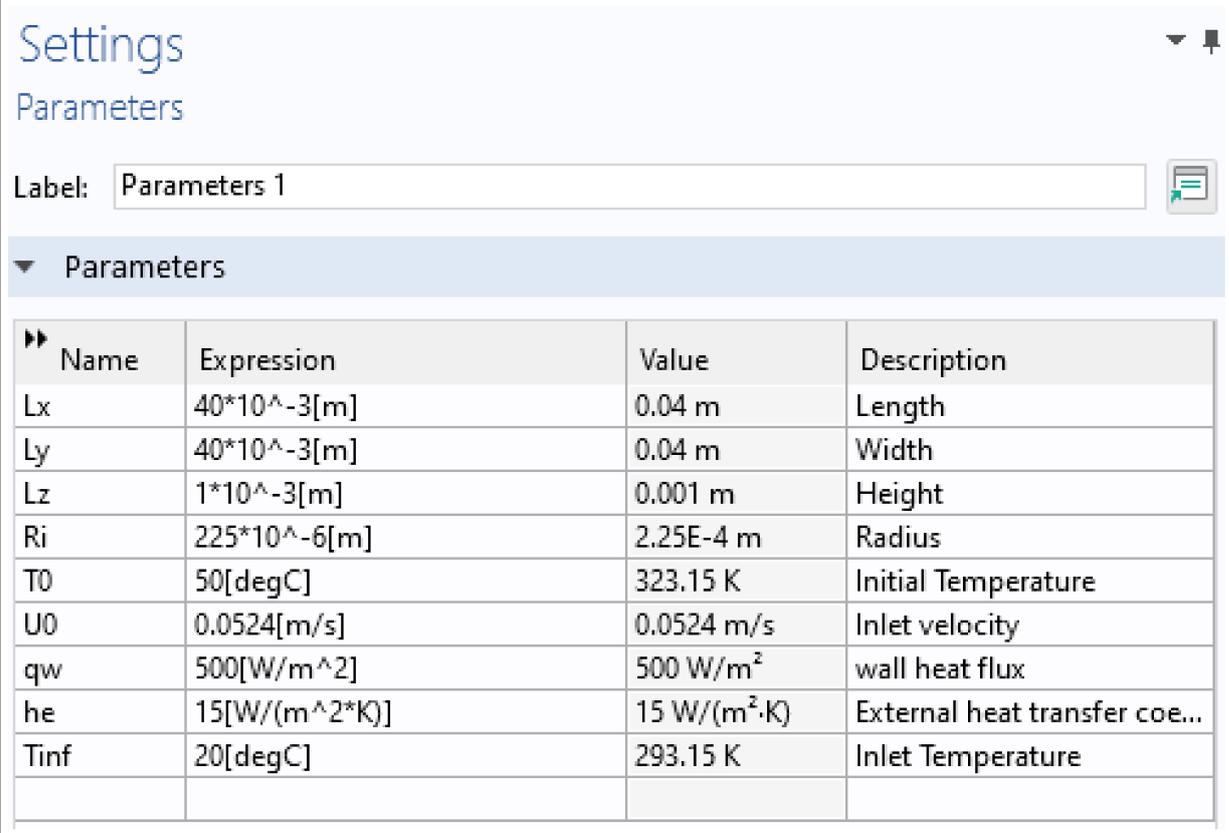
((a)) Seleção da Física

((b)) Seleção do Estudo

Fonte: O autor, 2023.

Os parâmetros utilizados nos estudos são previamente definidos e seus valores são apresentados na Figura 40

Figura 40 - Parâmetros definidos



Settings
Parameters

Label: Parameters 1

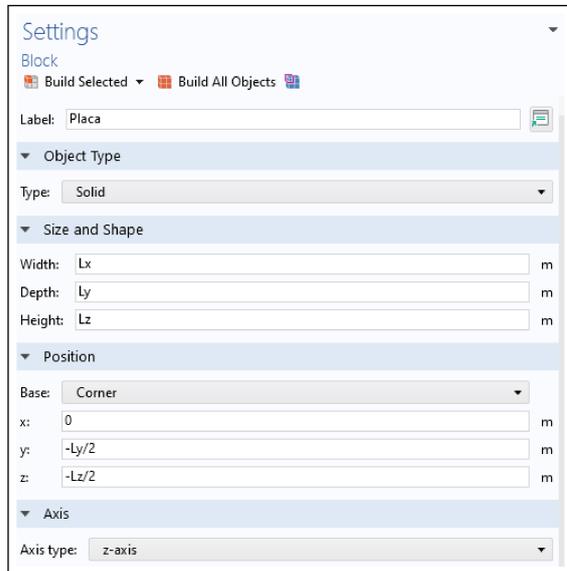
▼ Parameters

Name	Expression	Value	Description
Lx	$40 \cdot 10^{-3}[\text{m}]$	0.04 m	Length
Ly	$40 \cdot 10^{-3}[\text{m}]$	0.04 m	Width
Lz	$1 \cdot 10^{-3}[\text{m}]$	0.001 m	Height
Ri	$225 \cdot 10^{-6}[\text{m}]$	2.25E-4 m	Radius
T0	50[degC]	323.15 K	Initial Temperature
U0	0.0524[m/s]	0.0524 m/s	Inlet velocity
qw	500[W/m ²]	500 W/m ²	wall heat flux
he	15[W/(m ² ·K)]	15 W/(m ² ·K)	External heat transfer coe...
Tinf	20[degC]	293.15 K	Inlet Temperature

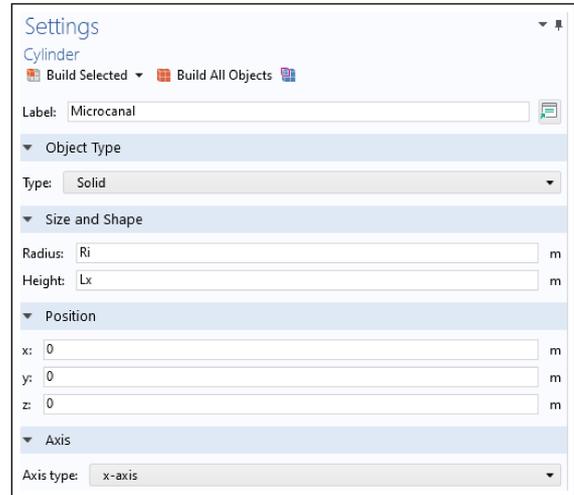
Fonte: O autor, 2023.

Após a seleção das interfaces físicas relevantes, procede-se à criação de um modelo geométrico tridimensional da placa. Esse modelo é construído com base na geometria de um bloco que representa a placa em questão e inclui a inserção de um cilindro dentro desse bloco, representando o microcanal. As dimensões geométricas utilizadas, assim como as coordenadas em relação aos eixos, estão detalhadamente apresentadas na Figura 41.

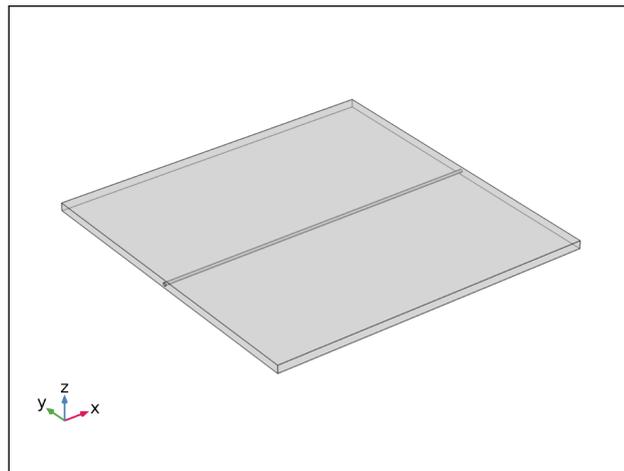
Figura 41 - Criação das geometrias



(a) Criação da placa



(b) Criação do microcanal



(c) Geometria criada

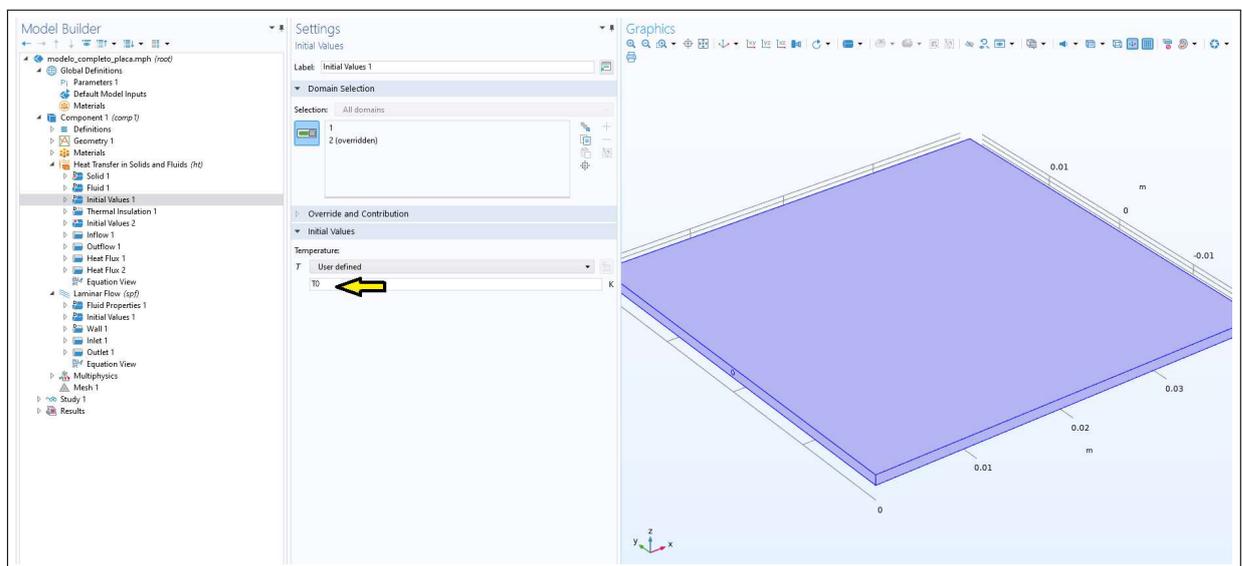
Fonte: O autor, 2023.

De acordo com a configuração padrão do software, o Domínio 1 é definido como a placa, enquanto o Domínio 2 é atribuído ao cilindro, que simboliza o canal por onde ocorre o escoamento do fluido. Com a geometria dos corpos definida, determinam-se as propriedades físicas dos materiais da placa e do cilindro. Foi definido, para a placa, o material Acrylic plastic, disponível na biblioteca do COMSOL e para o fluido refrigerante que passa pelo microcanal (cilindro), foi escolhida a água.

A.0.1 Condições iniciais e de contorno

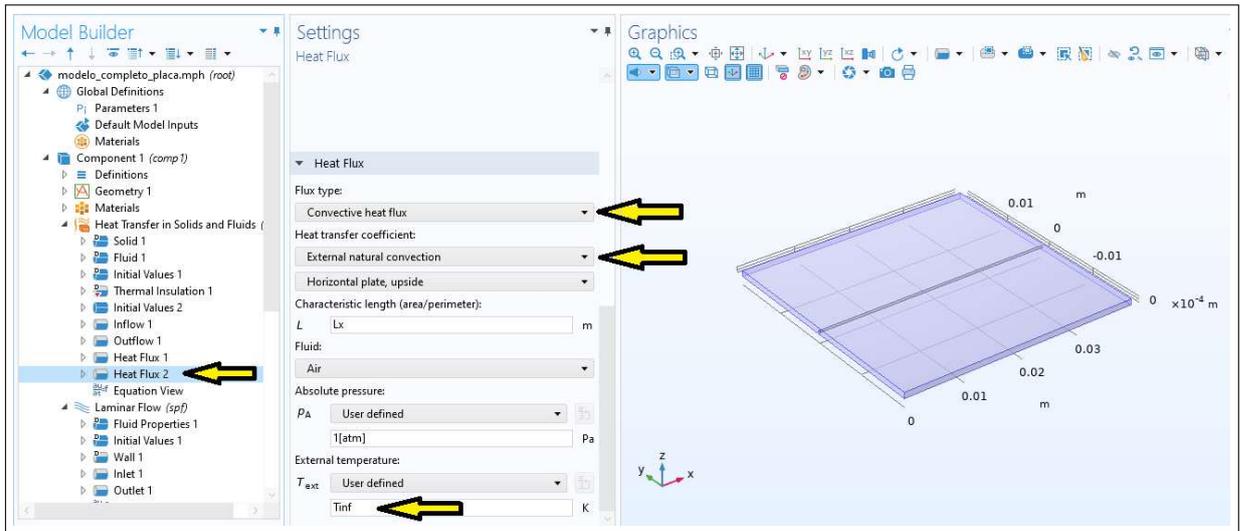
Nesta etapa são definidas as condições de contorno das fronteiras geradas pelo modelo e a condição inicial dos parâmetros do problema. Tanto para a placa quanto para o canal, é definida a temperatura de 50°C nas suas condições iniciais (Figura 42). As fronteiras da borda da placa, assim como a face superior trocam calor por convecção natural com o ambiente (Figura 43), para isso é necessário definir a temperatura externa e a selecionar as faces que possuem esta condição de contorno. Já na face onde ocorre a troca de calor proveniente da resistência elétrica (Figura 44), é criado um Heat Flux, utilizando o valor de q_w .

Figura 42 - Temperatura inicial



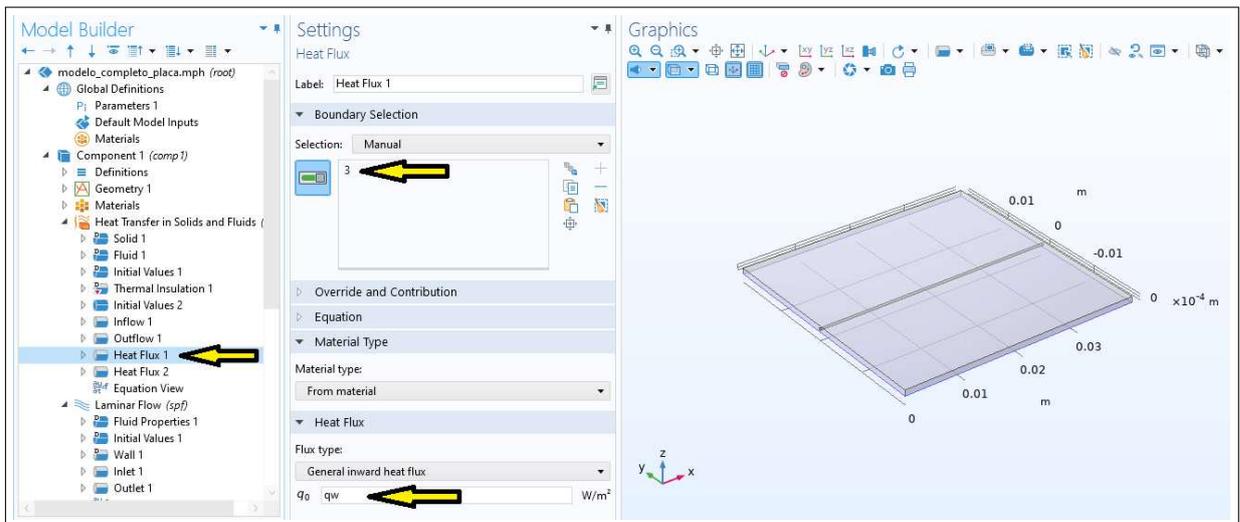
Fonte: O autor, 2023.

Figura 43 - Condição de contorno de convecção interna



Fonte: O autor, 2023.

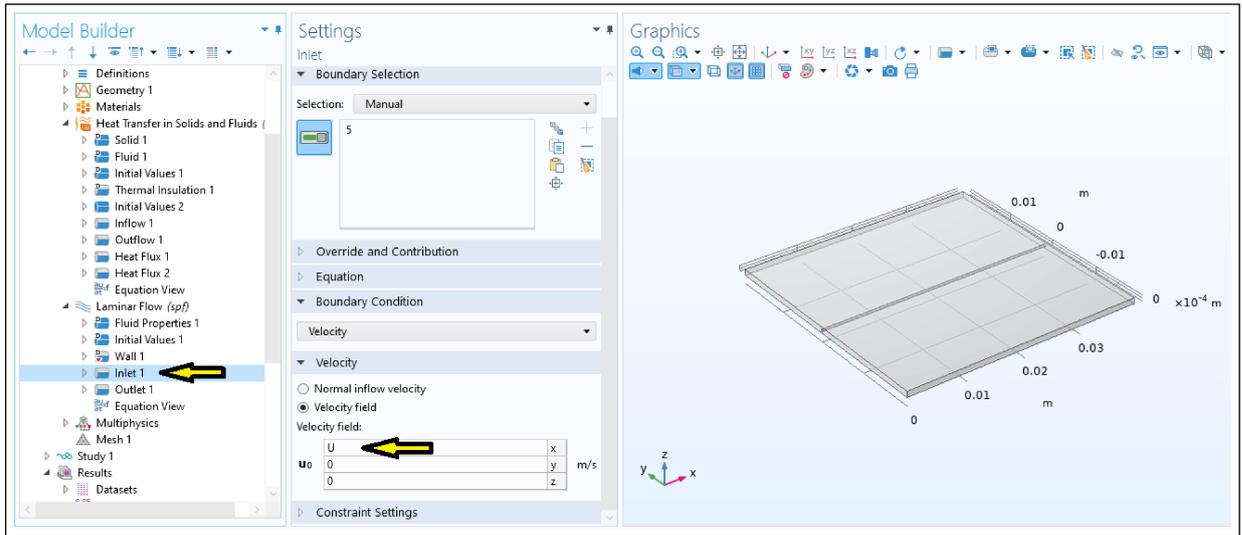
Figura 44 - Condição de contorno de fluxo de calor



Fonte: O autor, 2023.

O domínio do microcanal foi atribuído como fluido e com uma física de escoamento laminar. A temperatura de entrada da água como 20°C e nesta mesma face é determinada a velocidade de entrada no eixo x (Figura 45) através da interface Inlet, e seu valor é calculado com a Eq. 9. A fronteira oposta, é definida como a saída da água, ou Outlet. As velocidades nos outros eixos foram definidas como nulas, dado que o escoamento ocorre apenas na direção do canal.

Figura 45 - Velocidade de entrada do fluido

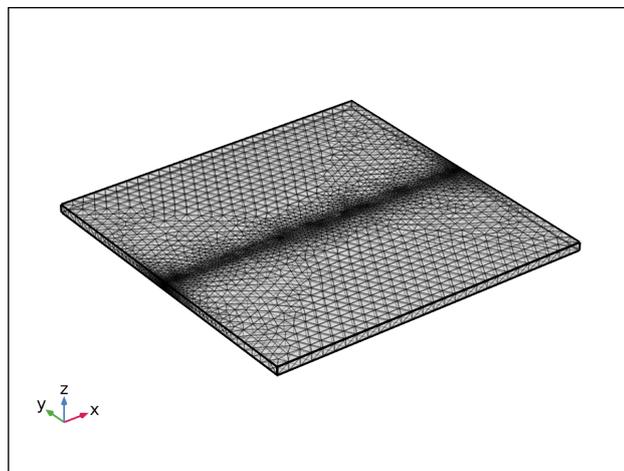


Fonte: O autor, 2023.

A.0.2 Simulação e Resultados

Com a geometria, condições de contorno e condições iniciais definidas, é gerada a malha de estudo. Para este trabalho, foi gerada uma malha definida como *Finer* e a opção *Physics-controlled mesh*. Dessa maneira, a malha criada possui elementos dinâmicos de acordo com a física da região. Na Figura 46 é possível perceber uma maior resolução ao redor da região do microcanal.

Figura 46 - Malha de elementos finitos

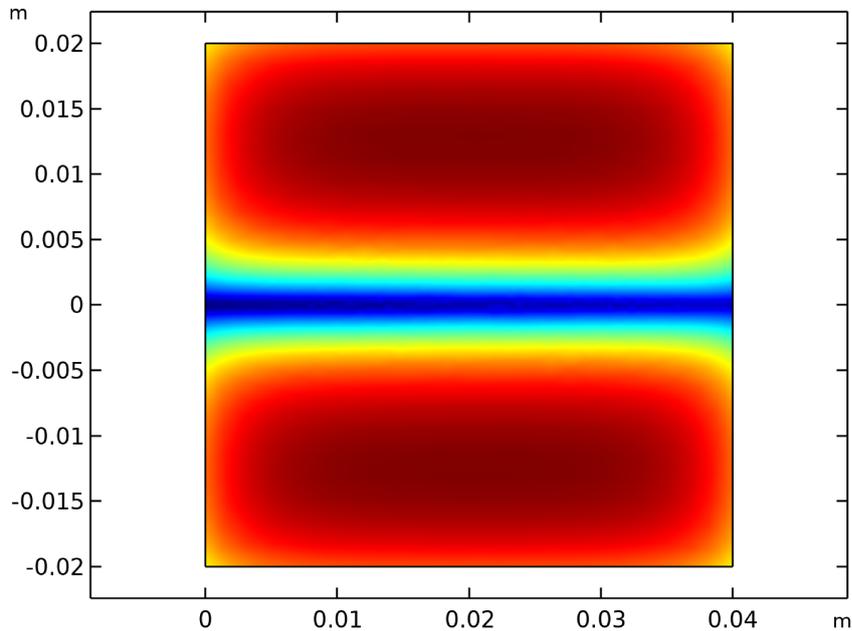


Fonte: O autor, 2023.

Com a malha criada, é possível começar a simulação. Como o problema é transiente, o tempo necessário para que o regime permanente seja atingido é definido como

300s com intervalos igualmente espaçados de 25s. O perfil de temperaturas na superfície externa da placa no regime permanente é apresentado na Figura 47.

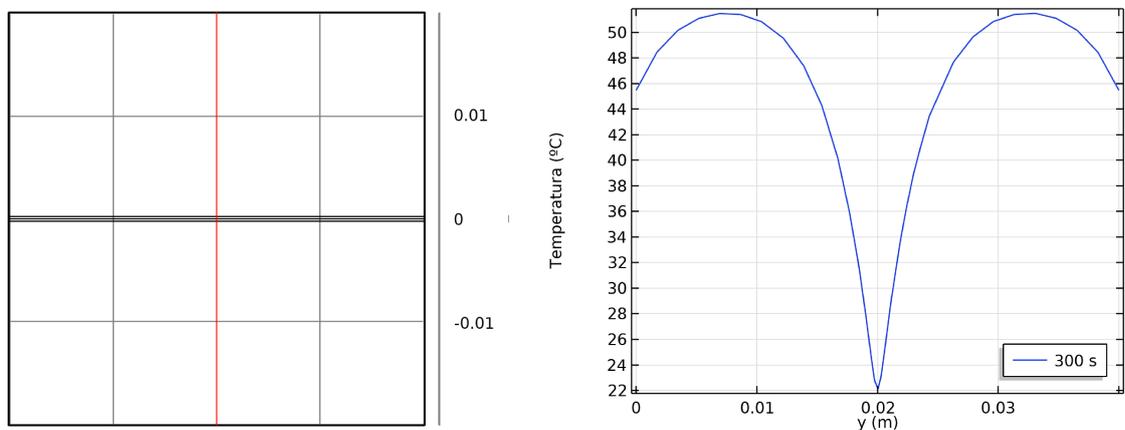
Figura 47 - Perfil de temperatura ($z = L_z$ e $t = 300s$)



Fonte: O autor, 2023.

Também serão apresentados resultados analisados em uma linha ao longo da seção transversal da placa em $x = \frac{L_x}{2}$, em uma linha ao na direção do microcanal e a variação temporal em um ponto próximo ao microcanal. As Figuras 48, 49 e 50 apresentam os locais onde o campo de temperaturas está sendo analisado, assim como a resposta obtida pela simulação computacional.

Figura 48 - Linha transversal em $\frac{L_x}{2}$

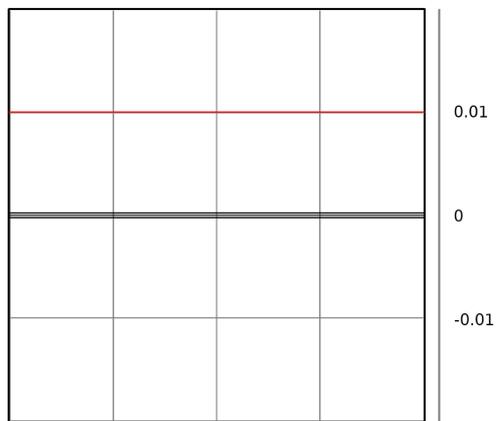


((a)) Linha transversal

((b)) Perfil de temperaturas

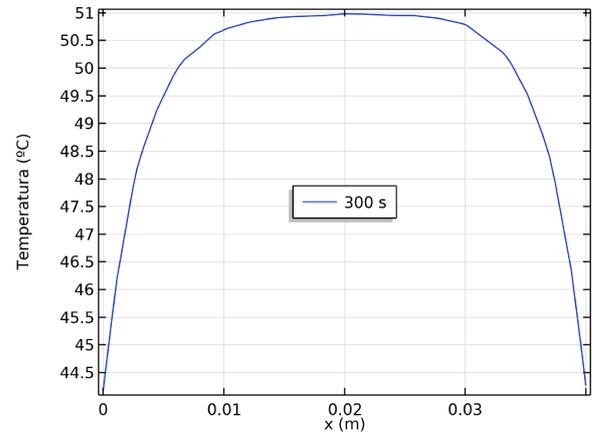
Fonte: O autor, 2023.

Figura 49 - Linha transversal em $\frac{L_y}{4}$



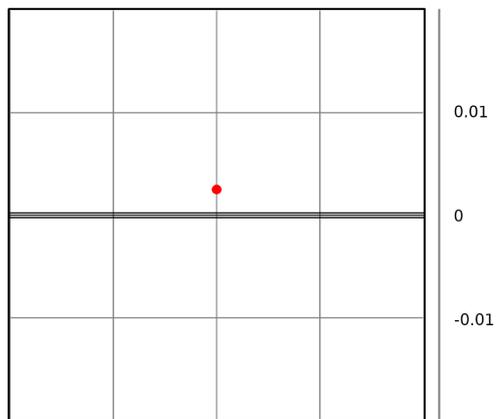
((a)) Linha transversal

Fonte: O autor, 2023.



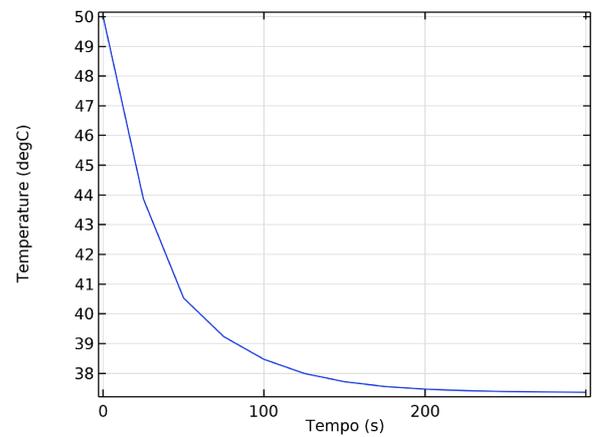
((b)) Perfil de temperaturas

Figura 50 - Ponto em $\frac{L_x}{2}$ e $\frac{L_y}{16}$



((a)) Linha transversal

Fonte: O autor, 2023.



((b)) Perfil de temperaturas

APÊNDICE B – Discretização por Diferenças Finitas

A solução numérica para o sistema de equações da placa e do fluido (Problema do capítulo 2) será feita através o método de diferenças finitas em sua formulação explícita, pela implementação de um código computacional na linguagem de programação *Python* 3. Este método consiste em discretizar o domínio contínuo modelado por uma equação diferencial parcial. A EDP é convertida em equações algébricas fazendo uso da aproximação das derivadas como diferenças a partir da série de Taylor (Pletcher; Tannehill; Anderson, 2012; Ozisik, 1994). Utilizou-se aproximações de segunda ordem nas derivadas espaciais e primeira ordem nas derivadas temporais, de acordo com o esquema Forward Time Centered Space (FTCS) para a equação da placa e Upwind de primeira ordem para a equação do fluido.

Considerando uma malha regular, com espaçamentos iguais ao longo dos eixos \mathbf{x} (aqui, \mathbf{x} representa o domínio espacial, podendo ter até três dimensões), e t , sendo Δx e Δt os espaçamentos ao longo desses eixos, podemos realizar uma expansão em série de Taylor para o campo de temperaturas a partir de um ponto arbitrário do domínio.

$$T(x_0 + \Delta x, t) = T(x_0) + \frac{\partial T(x)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \mathcal{O}(\Delta x)^3 \quad (42a)$$

$$T(x_0 - \Delta x, t) = T(x_0) - \frac{\partial T(x)}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \frac{(\Delta x)^2}{2!} - \mathcal{O}(\Delta x)^3 \quad (42b)$$

Para obter os termos de primeira ordem, pode-se truncar as expansões admitindo apenas as derivadas de ordem 1. Isolando $\frac{\partial T(x)}{\partial x}$, têm-se:

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right|_{x_0} = \frac{T(x_0 + \Delta x) - T(x_0)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (43a)$$

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial x} \right|_{x_0} = \frac{T(x_0) - T(x_0 - \Delta x)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (43b)$$

assim, a equação 43a é conhecida por diferença avançada (*forward difference*) e 43b é conhecida como diferença atrasada (*backward difference*). Usando uma notação mais compacta, pode-se escrever:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_i = \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (44a)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_i = \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (44b)$$

subtraindo 42a de 42b, uma difference centrada (*central difference*) é obtida:

$$T(x_0 + \Delta x) - T(x_0 - \Delta x) = 2 \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x_0} \Delta x + 2 \left. \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \right|_{x_0} \frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots \quad (45)$$

e portanto:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_i = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)^2 \quad (46)$$

Para obtenção da aproximação para a derivada de segunda ordem, a equação 42a é somada a 42b, de modo que:

$$T(x_0 + \Delta x) + T(x_0 - \Delta x) = 2T(x_0) + \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x_0} (\Delta x)^2 + 2 \left. \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \right|_{x_0} \frac{(\Delta x)^4}{4!} + \dots \quad (47)$$

ou seja:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x_0} = \frac{T(x_0 + \Delta x) - 2T(x_0) + T(x_0 - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}(\Delta x)^2 \quad (48)$$

na forma mais compacta:

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x_0} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \mathcal{O}(\Delta x)^2 \quad (49)$$

As mesmas operações podem ser feitas com avanço temporal, aproximando a primeira e segunda derivada do campo de temperaturas $T(\mathbf{x}, t)$ em relação ao tempo. Para o problema estudado neste trabalho adotou-se aproximações de segunda ordem nas derivadas espaciais e primeira ordem nas derivadas temporais, de acordo com o esquema Forward Time Centered Space (FTCS) para a equação da placa e Upwind de primeira

ordem para a equação do fluido. Para o esquema FTCS, tem-se:

$$\frac{\partial T(x,y,t)}{\partial t} \approx \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} \quad (50a)$$

$$\frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i-1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i+1,j}^n}{(\Delta x)^2} \quad (50b)$$

$$\frac{\partial^2 T(x,y,t)}{\partial y^2} \approx \frac{T_{i,j-1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j+1}^n}{(\Delta y)^2} \quad (50c)$$

onde o índice n representa o instante na malha temporal, enquanto os índices i e j representam as posições espaciais, nas malhas de x e y , respectivamente. Dessa maneira, $T_{i,j}^n$ é a temperatura do nó da malha discretizada na posição i,j e no instante de tempo n . Para o esquema *Upwind*, aplicado na equação do fluido, tem-se

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \approx \frac{T_i^n - T_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (51)$$

substituindo a equação (51) na equação (7) obtém-se a expressão da aproximação para equação do fluido, dada por:

$$T_{fi}^n = \frac{1}{1 + r_{up}} (T_{fi}^n + r_{up} T_{pi,0}) \quad (52a)$$

$$r_{up} = \frac{2hi\Delta x}{\rho_f c_f \bar{u} R_i} \quad (52b)$$

substituindo as equações (50a) a (50c) na equação (1), tem-se a expressão para os nós internos da malha espacial da placa, dada por:

$$\begin{aligned} T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (T_{i-1,j}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i+1,j}^n) + \alpha \frac{\Delta t}{\Delta y^2} (T_{i,j-1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j+1}^n) + \\ + \frac{q_w \Delta t}{L_z \rho c_p} + \frac{h_e \Delta t}{L_z \rho c_p} (T_{i,j}^n - T_\infty) \end{aligned} \quad (53)$$

onde $\alpha = k/\rho c_p$ é a difusividade térmica do material, que é a razão do transporte difusivo pela taxa de energia armazenada. Utilizando então a estratégia de nós fictícios para discretização dos contornos do problema, obtém-se um sistema de equações algébricas utilizadas no processo iterativo de solução computacional.

APÊNDICE C – Estimador da Evidência de Modelo

Para desenvolver esta estimativa, o primeiro passo é tomar a plausibilidade w_{j+1} e calcular seu valor esperado:

$$E(w_{j+1}) = \int w_{j+1} p_j(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} \quad (54)$$

Da equação (33), pode-se expressar (54) como:

$$E(w_{j+1}) = \int w_{j+1} p_j(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_{j+1}-q_j} p_j(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} \quad (55)$$

Das equações (24), (25), (31)

$$p_j(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) = \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j}}{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j} d\boldsymbol{\theta}} \quad (56)$$

Aplicando (56) em (55), obtém-se

$$\begin{aligned} E(w_{j+1}) &= \int p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_{j+1}-q_j} \frac{p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j}}{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j} d\boldsymbol{\theta}} d\boldsymbol{\theta} \\ &= \frac{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_{j+1}} d\boldsymbol{\theta}}{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_j} d\boldsymbol{\theta}} \end{aligned} \quad (57)$$

Dessa maneira, o produto entre os valores de w_{j+1} é expresso como

$$\prod_{j=0}^{n_j-2} E(w_{j+1}) = \frac{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_{n_j-1}} d\boldsymbol{\theta}}{\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_0} d\boldsymbol{\theta}} \quad (58)$$

Sabendo que $q_0 = 0$, $q_{n_j-1} = 1$ e também $\int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} = 1$, obtém-se

$$\prod_{j=0}^{n_j-2} E(w_{j+1}) = \int p(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) p(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{q_{n_j-1}} d\boldsymbol{\theta} \quad (59)$$

Se um número suficientemente grande de amostras N_s é escolhido, torna-se possível fazer uso da Lei dos Grandes Números (Ching e Chen 2007), e dessa forma o valor esperado

da plausibilidade pode ser expressado como:

$$E(w_{j+1}) \approx \frac{1}{N_s} \sum_{l=1}^{N_s} w_{j+1,l} \quad (60)$$

Podemos reescrever a Eq. (60) como:

$$\prod_{j=0}^{n_j-2} S_{j+1} \approx p(\mathcal{D}|\mathcal{M}) \quad (61)$$

Portanto, a evidência de modelo pode ser aproximada pelo produto das médias das plausibilidades de cada estágio