



**Universidade do Estado do Rio de Janeiro**  
Centro de Tecnologia e Ciências  
Instituto Politécnico

Caroline Ribeiro Pereira

**Estimulação cerebral profunda: análise térmica via métodos bayesianos**

Nova Friburgo

2024

Caroline Ribeiro Pereira

**Estimulação cerebral profunda: análise térmica via métodos bayesianos**



Tese apresentada como requisito para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Alberto da Silva Abreu

Orientador: Prof. Dr. Diego Campos Knupp

Nova Friburgo

2024

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

P436 Pereira, Caroline Ribeiro.  
Estimulação cerebral profunda : análise térmica via métodos bayesianos / Caroline Ribeiro Pereira. - 2024.  
158 f. : il.

Orientadores: Luiz Alberto da Silva Abreu e Diego Campos Knupp.  
Tese (doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Cérebro - Estimulação - Teses. 2. Análise térmica - Teses. 3. Transferência de calor – Modelos matemáticos – Teses. 4. Temperatura – Medição – Métodos de simulação – Teses. 5. Teoria bayesiana de decisão estatística – Teses. I. Abreu, Luiz Alberto da Silva. II. Knupp, Diego Campos. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 536.4:519.226

Bibliotecária Cleide Sancho CRB7/5843

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

---

Assinatura

---

Data

Caroline Ribeiro Pereira

**Estimulação cerebral profunda: análise térmica via métodos bayesianos**

Tese apresentada como requisito para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 06 de fevereiro de 2024.

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Luiz Alberto da Silva Abreu (Orientador)  
Instituto Politécnico - UERJ

---

Prof. Dr. Diego Campos Knupp (Orientador)  
Instituto Politécnico - UERJ

---

Prof. Dr. Leonardo Tavares Stutz  
Instituto Politécnico - UERJ

---

Prof. Dr. José Mir Justino da Costa  
Universidade Federal do Amazonas

---

Prof. Dr. José Martim Costa Junior  
Instituto Federal do Sertão Pernambucano

---

Prof. Dr. Grazione de Souza Boy  
Instituto Politécnico - UERJ

Nova Friburgo

2024

## **DEDICATÓRIA**

Dedico este trabalho aos meus pais, pilares da minha formação como ser humano.

## AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Thomaz e Neuza, e aos meus irmãos, Marcio, Mauricio e Almir, por todo apoio, cuidado e dedicação à mim e aos meus sonhos. Vocês foram as peças fundamentais para que meu desejo de estudar se tornasse realidade.

Aos meus sobrinhos por estarem sempre por perto tornando os dias mais leves e arrancando meus melhores sorrisos.

A minha grande amiga Camila por sua escuta atenta e pelos conselhos que acalmam.

Aos meus professores orientadores, Prof. Dr. Luiz Alberto da Silva Abreu e Prof. Dr. Diego Campos Knupp, pela confiança, apoio e orientação durante o doutorado.

Aos amigos que fiz durante os últimos onze anos que passei no IPRJ/UERJ. Estar em uma instituição pública, gratuita e de qualidade me proporcionou encontros com uma grande diversidade de pessoas e amizades inesperadas que levarei por toda a minha vida.

Aos colegas do Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional do IPRJ/UERJ pelas trocas, auxílio e esclarecimentos prestados durante a minha permanência no programa.

Aos programas de bolsas cotista e iniciação científica da Universidade do Estado do Rio de Janeiro, a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, pelo financiamento dos meus estudos dentro da UERJ.

Ao programa de mentoria para mulheres das Sociedades Brasileiras de Matemática e Física (SBM e SBF) por me proporcionar conviver e ouvir mulheres cientistas que são inspiração e tratam de temas relevantes, dificuldades e importância da mulher nas áreas exatas. O que vi e ouvi foi motivador e fundamental para que eu continue em busca dos meus sonhos.

Aos professores e demais funcionários do IPRJ/UERJ pelos ensinamentos e dedicação em meio a tantas dificuldades.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

## RESUMO

PEREIRA, C. R. *Estimulação cerebral profunda: análise térmica via métodos bayesianos*. 2024. 158 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

A técnica de estimulação cerebral profunda (do inglês, Deep Brain Stimulation - DBS), um procedimento neurocirúrgico empregado no tratamento de sintomas motores, é caracterizada pelo uso de eletrodos de estimulação que recebem pulsos elétricos. Dependendo do potencial elétrico aplicado, esses pulsos podem ocasionar um aumento de temperatura nas regiões adjacentes à aplicação elétrica. Nesse sentido, aprimorar a precisão da análise térmica, levando em conta as incertezas nos parâmetros físico-matemáticos, e realizar a estimativa de parâmetros desconhecidos são medidas cruciais para prevenir danos térmicos ou aquecimento excessivo decorrente do uso do eletrodo. Esse trabalho trata da aplicação de abordagens bayesianas, por meio de simulação computacional, com o objetivo de analisar o campo de temperaturas em um cérebro com eletrodo DBS. A equação clássica de biotransferência de calor foi empregada para modelar a transferência de calor no tecido, considerando que o aquecimento devido aos pulsos elétricos provenientes do eletrodo é representado por um termo fonte que simboliza o campo elétrico gerado pelo potencial aplicado. A solução do problema direto associado foi obtida utilizando as abordagens numéricas de elementos finitos e diferenças finitas. A análise do campo de temperaturas e a estimativa de parâmetros foram realizadas por meio de problemas inversos, via inferência bayesiana, com a aplicação de filtros de partículas e do método de Monte Carlo com Cadeias de Markov. Nas simulações computacionais realizadas, considerou-se os efeitos produzidos por medições de temperaturas simulada obtidas por meio de um sensor localizado dentro do eletrodo cerebral. Os resultados obtidos, considerando essas medições simuladas, contendo diferentes níveis de ruído, demonstraram boas estimativas de parâmetros e de variáveis de estado. A metodologia apresentada leva em consideração ainda as incertezas associadas aos parâmetros termo-físicos e aos modelos, mostrando-se promissora para reduzir o risco de lesões relacionadas à técnica de estimulação cerebral profunda.

Palavras-chave: estimulação cerebral profunda; biotransferência de calor; problemas inversos; filtros de partículas.

## ABSTRACT

PEREIRA, C. R. *Deep brain stimulation: thermal analysis via Bayesian methods*. 2024. 158 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

The Deep Brain Stimulation (DBS) technique, a neurosurgical procedure commonly employed in the treatment of motor symptoms, is characterized by the use of stimulation leads that receive electrical pulses. Depending on the electrical potential applied, these pulses can cause an increase in temperature in regions adjacent to the electrical application. In this context, enhancing the accuracy of thermal analysis, considering uncertainties in the physical-mathematical parameters, and performing the estimation of unknown parameters are crucial measures to prevent thermal damage or excessive heating resulting from the use of the leads. This work concentrates on the application of Bayesian approaches through computational simulation to analyze the temperature field in a brain with a DBS lead. The classical equation of bioheat transfer in tissues was employed to model heat transfer in the tissue, considering that the heating due to electrical pulses from the lead is represented by a source term symbolizing the electric field generated by the applied potential. The solution to the associated direct problem in this physical-mathematical problem was obtained using numerical approaches such as finite element and finite difference methods. The analysis of the temperature field and parameter estimation were carried out through inverse problems, employing Bayesian inference with the application of particle filters and the Markov Chain Monte Carlo method. In the computational simulations performed, the effects produced by simulated temperature measurements obtained through a sensor located within the brain lead were considered. The results obtained, considering these simulated measurements with varying noise levels, demonstrated accurate estimations of parameters and state variables. The presented methodology also takes into account uncertainties associated with thermophysical parameters and models, proving promising for reducing the risk of injuries related to the DBS technique.

Keywords: deep brain stimulation; bioheat transfer; inverse problems; particle filters.

## LISTA DE FIGURAS

Figura	1 - Representação do sistema DBS. . . . .	18
Figura	2 - Quantidade de arquivos encontrados na PubMed ao pesquisar ( <i>Deep Brain Stimulation</i> ). . . . .	30
Figura	3 - Quantidade de arquivos encontrados na PubMed ao pesquisar ( <i>Deep Brain Stimulation</i> ) AND ( <i>Temperature</i> ). . . . .	31
Figura	4 - Representação esquemática do domínio computacional. . . . .	32
Figura	5 - Representação esquemática do eletrodo modelo 3389 da Medtronic. . . . .	33
Figura	6 - Etapas de previsão e atualização para os filtros bayesianos. . . . .	53
Figura	7 - Processo de seleção das partículas com o filtro SIR. . . . .	58
Figura	8 - Processo de seleção das partículas com o filtro ASIR. . . . .	60
Figura	9 - Convergência de malha do perfil de temperatura para a solução NDSolve. . . . .	69
Figura	10 - Convergência de malha do potencial elétrico para a solução NDSolve. . . . .	70
Figura	11 - Convergência de malha do perfil de temperatura para a solução MDF. . . . .	71
Figura	12 - Convergência de malha do potencial elétrico para a solução MDF. . . . .	72
Figura	13 - Comparação entre as soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico. . . . .	72
Figura	14 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura do problema em regime permanente. . . . .	73
Figura	15 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico. . . . .	74
Figura	16 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente. . . . .	74
Figura	17 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente. . . . .	75
Figura	18 - Curvas de temperatura <i>versus</i> potencial elétrico fazendo diferentes considerações para a queda de tensão na interface eletrodo-tecido cerebral. . . . .	77
Figura	19 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico do problema em regime transiente. . . . .	78
Figura	20 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura do problema em regime transiente. . . . .	78
Figura	21 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura no problema em regime transiente ao longo do tempo. . . . .	79
Figura	22 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente. . . . .	80
Figura	23 - Comparação entre soluções considerando diferentes valores para os parâmetros $\omega_b$ e $Q_m$ . . . . .	81
Figura	24 - Representação esquemática do domínio computacional. . . . .	84

Figura 25 - Pontos de temperatura de <a href="#">Elwassif et al. (2006)</a> que serão utilizados como dados para o problema inverso do modelo matemático em regime permanente.	85
Figura 26 - Análise de sensibilidade para o problema em regime permanente.	87
Figura 27 - Estados da Cadeia de Markov para o caso 1.	88
Figura 28 - Histogramas para o caso 1 com diferentes números de estados da cadeia de Markov.	89
Figura 29 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 1.	90
Figura 30 - Estados da cadeia de Markov considerando as incertezas da Tabela 11 para o caso 2.	91
Figura 31 - Estados da cadeia de Markov para o caso 2.	92
Figura 32 - Histogramas para o caso 2 considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov.	93
Figura 33 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 2.	94
Figura 34 - Estados da cadeia de Markov para o caso 3.	95
Figura 35 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 3.	95
Figura 36 - Histogramas para o caso 3 considerando 15000 estados na cadeia de Markov.	96
Figura 37 - Coeficientes de sensibilidade modificados ao longo do tempo.	98
Figura 38 - Curvas de temperatura considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para $r = R_1 = 0,635$ mm.	100
Figura 39 - Curvas de temperatura considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para $z = 24$ mm.	101
Figura 40 - Histogramas considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para $r = R_1 = 0,635$ mm $z = 24$ mm.	102
Figura 41 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro SIR com diferentes quantidades de partículas.	106
Figura 42 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,05$ °C.	107
Figura 43 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro SIR para os casos com $N = 100$ partículas.	107
Figura 44 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do sensor para $N=100$ .	109
Figura 45 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do eletrodo 2 para $N=100$ .	110
Figura 46 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro ASIR com diferentes quantidades de partículas.	113
Figura 47 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,05$ °C.	114

Figura 48 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro ASIR para os casos com $N = 100$ partículas. . . . .	114
Figura 49 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do sensor para $N=100$ . . . . .	116
Figura 50 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do eletrodo 2 para $N=100$ . . . . .	117
Figura 51 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro de Liu & West com diferentes quantidades de partículas. . .	120
Figura 52 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,05$ °C. . . . .	121
Figura 53 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro de Liu & West para os casos com $N = 100$ partículas. . . . .	121
Figura 54 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do sensor para $N=100$ . . . . .	123
Figura 55 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do eletrodo 2 para $N=100$ . . . . .	124
Figura 56 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,05$ °C. . . . .	126
Figura 57 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,1$ °C. . . . .	127
Figura 58 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,025$ °C e $s_{exp} = 0,2$ °C. . . . .	128
Figura 59 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,1$ °C e $s_{exp} = 0,05$ °C. . . . .	129
Figura 60 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,1$ °C e $s_{exp} = 0,1$ °C. . . . .	130
Figura 61 - Campo de temperatura, em $t = 60$ segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para $s_T = 0,1$ °C e $s_{exp} = 0,2$ °C. . . . .	131
Figura 62 - Estados da Cadeia de Markov para $\sigma$ . . . . .	133
Figura 63 - Histogramas para o caso com $\sigma_{est}$ considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov. . . . .	134
Figura 64 - Estados da Cadeia de Markov para os parâmetros do vetor $\theta_1$ . . . . .	135
Figura 65 - Campos de temperatura obtido com a solução do problema direto NDSolve, estimado, experimental e resíduo entre as soluções. . . . .	136
Figura 66 - Campos de temperatura obtidos com a solução do problema direto NDSolve e estimados em diferentes posições de $r$ e $z$ e $t = tf$ . . . . .	136
Figura 67 - Estados da Cadeia de Markov para $P_3 = \sigma$ e $P_7 = \rho_b c_b \omega_b$ . . . . .	137

Figura 68 - Histogramas para o caso com $P_{3,est}$ e $P_{7,est}$ considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov. . . . .	138
Figura 69 - Estados da Cadeia de Markov para os parâmetros do vetor $\theta_1$ no caso com $P_{3,est}$ e $P_{7,est}$ . . . . .	139
Figura 70 - Campos de temperatura obtidos com a solução do problema direto NDSolve, estimado, experimental e resíduo entre as soluções para o caso com $P_{3,est}$ e $P_{7,est}$ . . . . .	140
Figura 71 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico com os eletrodos 1 e 4 ativos. . . . .	153
Figura 72 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente com os eletrodos 1 e 4 ativos. . . . .	154
Figura 73 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente com os eletrodos 1 e 4 ativos. . . . .	154
Figura 74 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico com o eletrodo 1 ativo. . . . .	155
Figura 75 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente com o eletrodo 1 ativo. . . . .	155
Figura 76 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente com o eletrodo 1 ativo. . . . .	156
Figura 77 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente com os eletrodos 1 e 4 ativos. . . . .	157
Figura 78 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente com o eletrodo 1 ativo. . . . .	158

## LISTA DE TABELAS

Tabela	1 - Passos do algoritmo SIR. . . . .	59
Tabela	2 - Passos do algoritmo ASIR. . . . .	61
Tabela	3 - Passos do algoritmo de Liu & West. . . . .	63
Tabela	4 - Passos para a análise sob incerteza com o método de Monte Carlo. . . . .	66
Tabela	5 - Valores dos parâmetros. . . . .	68
Tabela	6 - Convergência de malha da solução obtida com a NDSolve. . . . .	68
Tabela	7 - Convergência de malha da solução obtida com o MDF. . . . .	71
Tabela	8 - Valores de $\omega_b$ e $Q_m$ utilizados para investigar suas influências na solução do perfil de temperatura. . . . .	82
Tabela	9 - Valores dos parâmetros utilizados para obter a estimativa do potencial elétrico. . . . .	85
Tabela	10 - Valores dos parâmetros utilizados para a solução do problema direto em regime permanente. . . . .	86
Tabela	11 - Valores dos parâmetros e suas incertezas para o caso 2. . . . .	90
Tabela	12 - Valores dos parâmetros e suas incertezas para o caso 2 com priori informativa para as condutividades térmica e elétrica. . . . .	92
Tabela	13 - Valores de potencial elétrico estimado para cada um dos casos analisados. . . . .	96
Tabela	14 - Informações estatísticas sobre os parâmetros utilizados na análise sob incerteza. . . . .	99
Tabela	15 - Algoritmo SIR aplicado ao problema com DBS. . . . .	104
Tabela	16 - Erros RMS e tempo de CPU para o algoritmo SIR. . . . .	105
Tabela	17 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo SIR. . . . .	108
Tabela	18 - Algoritmo ASIR aplicado ao problema com DBS. . . . .	111
Tabela	19 - Erros RMS e tempo de CPU para algoritmo ASIR. . . . .	112
Tabela	20 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo ASIR. . . . .	115
Tabela	21 - Algoritmo de Liu & West aplicado ao problema com DBS. . . . .	118
Tabela	22 - Erros RMS e tempo de CPU para algoritmo de Liu & West. . . . .	119
Tabela	23 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo de Liu & West. . . . .	122
Tabela	24 - Comparação entre as temperaturas máximas obtidas com os algoritmos SIR, ASIR e de Liu & West. . . . .	125
Tabela	25 - Informações estatísticas sobre desvio padrão, média e valores de máximo e mínimo dos parâmetros utilizados na solução MCMC com Metropolis-Hastings em duas etapas. . . . .	133
Tabela	26 - Valor exato, média e desvio padrão obtidos na solução MCMC com Metropolis-Hastings em duas etapas. . . . .	134

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AEM	<i>Approximation Error Model</i>
ASIR	<i>Auxiliary Sampling Importance Resampling</i>
CE	Conformité Européenne
DBS	<i>Deep Brain Stimulation</i>
EDP	Equação Diferencial Parcial
FEM	<i>Finite Element Method</i>
FDA	<i>Food and Drug Administration</i>
IT'IS	<i>Information Technologies in Society</i>
MRI	<i>Magnetic Resonance Imaging</i>
MCMC	<i>Markov Chain Monte Carlo</i>
MAP	<i>Maximum a Posteriori Probability</i>
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
RMS	<i>Root Mean Square</i>
SIR	<i>Sampling Importance Resampling</i>
SIS	<i>Sequential Importance Sampling</i>
TOC	Transtorno Obsessivo-Compulsivo

## LISTA DE SÍMBOLOS

$V_{rms}$	Valor eficaz do potencial elétrico
$T_p$	Período do pulso
$v(t)$	Função de onda
$t$	Coordenada relacionada ao tempo
$r$	Coordenada espacial relacionada ao raio
$R_1$	Raio do eletrodo
$R_2$	Raio externo do domínio computacional
$z$	Coordenada espacial relacionada a altura
$H$	Altura do domínio computacional
$T$	Temperatura ao longo do domínio e do tempo
$\rho$	Massa específica
$c_p$	Calor específico
$k$	Condutividade térmica
$Q$	Fonte de calor
$T_a$	Temperatura inicial do cérebro
$\rho_b$	Massa específica do sangue
$c_b$	Calor específico do sangue
$\omega_b$	Coefficiente de perfusão sanguínea do tecido biológico
$T_b$	Temperatura inicial do sangue no cérebro
$Q_m$	Taxa metabólica de calor
$Q_{ext}$	Taxa de calor fornecida por uma fonte externa
$V$	Potencial elétrico
$\sigma$	Condutividade elétrica
$\nabla V$	Campo elétrico
$f()$	Função utilizada para representar o potencial gerado pelo eletrodo
$\Delta_r$	Passo na direção $r$ do MDF
$\Delta_z$	Passo na direção $z$ do MDF
$O()$	Ordem do erro de truncamento
$N_r$	Número de nós na direção $r$ para o MDF
$N_z$	Número de nós na direção $z$ para o MDF
$\pi()$	Função densidade de probabilidade
$\theta$	Vetor de parâmetros
$\mathbf{z}$	Vetor de das medidas
$D$	Número total de medidas experimentais
$\mathbf{W}$	Matriz de covariância dos dados experimentais
$\mu$	Média

$s$	Desvio padrão
$\mathbf{x}$	Vetor de estado
$\mathbf{h}()$	Função que descreve a evolução de estado
$\mathbf{g}()$	Função que relaciona o estado do sistema com as observações
$\mathbf{v}$	Vetor de incertezas do modelo de evolução de estado
$\mathbf{n}$	Vetor de incertezas do modelo de observação
$\mathbf{s}$	Vetor de controle do filtro de Kalman
$\mathbf{F}$	Matriz de transição de estado do filtro de Kalman
$\mathbf{H}$	Matriz de observação do filtro de Kalman
$\mathbf{P}$	Covariância a priori do erro de estado no filtro de Kalman
$\mathbf{Q}$	Matriz de covariância do ruído do processo no filtro de Kalman
$\mathbf{K}$	Ganho de Kalman
$\mathbf{R}$	Matriz de covariância do ruído da observação no filtro de Kalman
$\mathbf{I}$	Matriz identidade
$\mathbf{w}$	Vetor dos pesos
$\delta()$	Função delta de Dirac
$q()$	Densidade de importância
$T_{\mathbf{w}}$	Peso total
$\mathbf{e}$	Vetor de incertezas dos parâmetros
$\zeta$	Parâmetro de suavização
$\mathbf{m}$	Média calculada a partir da modificação dos parâmetros
$a$ e $\delta$	Fatores de redução
$\mathbf{J}()$	Matriz dos coeficientes de sensibilidade
$J$	Coefficiente de sensibilidade
$P$	Coefficiente de sensibilidade modificado
$N_{mc}$	Número de amostras do método de Monte Carlo

## SUMÁRIO

	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	17
1	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> . . . . .	22
1.1	<b>Contextualização histórica sobre estimulação elétrica e neurologia</b> . . . . .	22
1.2	<b>Estimulação cerebral profunda</b> . . . . .	22
1.3	<b>Modelo matemático de biotransferência de calor</b> . . . . .	24
1.4	<b>Problemas Inversos</b> . . . . .	27
1.5	<b>Contribuição da tese</b> . . . . .	30
2	<b>PROBLEMA FÍSICO E FORMULAÇÃO MATEMÁTICA</b> . . . . .	32
3	<b>FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO</b> . . . . .	36
3.1	<b>Método dos Elementos Finitos (MEF)</b> . . . . .	36
3.2	<b>Método das Diferenças Finitas (MDF)</b> . . . . .	36
3.2.1	<u>Solução MDF do potencial elétrico</u> . . . . .	37
3.2.2	<u>Solução MDF da temperatura em regime permanente</u> . . . . .	40
3.2.3	<u>Solução MDF da temperatura em regime transiente</u> . . . . .	43
4	<b>FORMULAÇÃO DOS PROBLEMAS INVERSOS</b> . . . . .	47
4.1	<b>Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov (MCMC)</b> . . . . .	47
4.1.1	<u>MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas</u> . . . . .	49
4.2	<b>Problema de estimativa de estado</b> . . . . .	50
4.2.1	<u>Filtro de Kalman</u> . . . . .	53
4.2.2	<u>Filtros de Partículas</u> . . . . .	55
4.2.2.1	Filtro Amostragem por Importância Sequencial (SIS) . . . . .	56
4.2.2.2	Filtro Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR) . . . . .	57
4.2.2.3	Filtro Auxiliar de Partícula ou Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR) . . . . .	59
4.2.2.4	Filtro de Liu & West . . . . .	62
4.3	<b>Análise de sensibilidade</b> . . . . .	64
4.4	<b>Análise sob incerteza com o método de Monte Carlo</b> . . . . .	65
5	<b>VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO</b> . . . . .	67
5.1	<b>Verificação da solução da temperatura em regime permanente</b> . . . . .	67
5.2	<b>Validação da solução da temperatura em regime permanente</b> . . . . .	75
5.3	<b>Verificação da solução da temperatura em regime transiente</b> . . . . .	77
6	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> . . . . .	83
6.1	<b>Estimativa do potencial elétrico aplicado utilizando como base os resultados obtidos por <a href="#">Elwassif et al. (2006)</a></b> . . . . .	83
6.1.1	<u>Extração dos dados do artigo de <a href="#">Elwassif et al. (2006)</a></u> . . . . .	83
6.1.2	<u>Análise de sensibilidade</u> . . . . .	86

6.1.3	<u>Solução do problema inverso com o método MCMC</u> . . . . .	87
6.1.3.1	Caso 1 . . . . .	88
6.1.3.2	Caso 2 . . . . .	90
6.1.3.3	Caso 3 . . . . .	94
6.2	<b>Análise do perfil de temperatura obtido utilizando filtros de partículas</b> . .	97
6.2.1	<u>Análise de sensibilidade</u> . . . . .	97
6.2.2	<u>Análise sob incertezas com o método de Monte Carlo</u> . . . . .	98
6.2.3	<u>Solução com filtros de partículas</u> . . . . .	102
6.2.3.1	Filtro SIR . . . . .	103
6.2.3.2	Filtro ASIR . . . . .	111
6.2.3.3	Filtro de Liu & West . . . . .	117
6.2.3.4	Comparação dos resultados com os diferentes filtros . . . . .	124
6.3	<b>Estimativa de parâmetros utilizando o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas</b> . . . . .	132
	<b>CONCLUSÕES</b> . . . . .	141
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	143
	<b>APÊNDICE A – Solução do problema direto com MDF e MEF levando em consideração diferentes configurações de eletrodos ativos</b> . . . . .	153

## INTRODUÇÃO

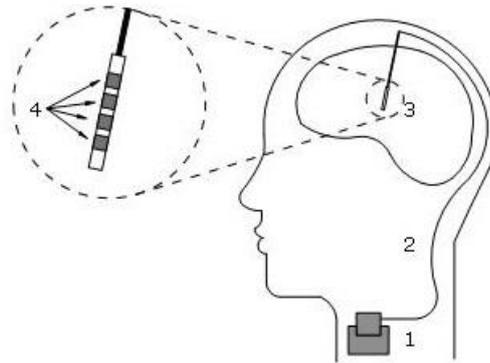
A estimulação cerebral profunda (*Deep Brain Stimulation* - DBS) é um procedimento neurocirúrgico que consiste na implantação de eletrodos intracranianos com o objetivo de enviar pulsos elétricos a áreas cerebrais específicas (Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). O procedimento é realizado para estimular o funcionamento do cérebro e melhorar o desempenho e a qualidade de vida de pessoas que possuem condições neurológicas como doença de Parkinson (Starr; Vitek; Bakay, 1998; Xiao et al., 2021), tremor essencial (Aum; Tierney, 2018), distonia (Krauss et al., 2004; Macerollo et al., 2020), epilepsia (Salanova, 2018), e outros (Harmsen et al., 2020; Lam et al., 2021). A técnica DBS não cura e não impede a progressão das condições neurológicas, mas tem se mostrado eficiente no controle de sintomas motores, como rigidez, dificuldade para andar, lentidão de movimento, tremores e diversos outros, além de apresentar resultados positivos em sintomas de ansiedade, depressão, dor e fadiga (Krauss et al., 2021; Sui et al., 2021). Dessa forma, em grande parte dos casos, o implante DBS consegue devolver autonomia e independência ao paciente, diminuindo as dores e incômodos causados pelas doenças (Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021; Sui et al., 2021).

Conforme mostrado na Figura 1, um sistema DBS típico consiste em quatro componentes principais: (1) um neuroestimulador; (2) um cabo de extensão; (3) um eletrodo; e (4) os contatos do eletrodo. O neuroestimulador possui um microchip com bateria e, em geral, é implantado no peito, logo abaixo da clavícula, sob a pele do paciente. Os eletrodos são implantados em regiões de interesse do cérebro que podem variar de acordo com a doença apresentada pelo paciente. O cabo de extensão conecta o eletrodo ao neuroestimulador e os contatos do eletrodo são responsáveis por transmitir os pulsos elétricos. Além disso, as derivações DBS podem ser unilaterais ou bilaterais. O DBS unilateral possui apenas um eletrodo para realizar a estimulação. Já o bilateral possui dois eletrodos localizados em diferentes regiões do cérebro. Ademais, a estimulação bilateral pode ser feita com a ligação dos eletrodos a um único neuroestimulador ou, em alguns casos, coloca-se dois neuroestimuladores e cada um deles está ligado a um eletrodo (Jardim et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021; Sui et al., 2021).

As características cruciais de um eletrodo incluem biocompatibilidade, inércia, durabilidade, estabilidade ao longo do tempo, viabilidade cirúrgica, boa condutividade elétrica, tratabilidade, distribuição de corrente apropriada e configuração espacial. Além de ser desejável que o dispositivo seja compatível com a utilização da ressonância magnética (*Magnetic Resonance Imaging* - MRI). A maior parte dos estudos recentes se concentraram em desenvolver novos modelos de eletrodo com objetivo de permitir corrente direcionada, maior número de parâmetros para os médicos programarem, avanços na compatibilidade com MRI, entre outros aspectos (Hariz; Blomstedt; Zrinzo, 2010; Bronstein et al., 2011; Gardner, 2013; Aum; Tierney, 2018; Harmsen et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Existem diferentes modelos de eletrodos e marcas no mercado, a implantação de um ou outro eletrodo pode variar

de acordo com a finalidade desejada. Após a cirurgia de inserção do eletrodo DBS o paciente é submetido a um ajuste dos estímulos no cérebro visando os objetivos específicos desejados, ou seja, o alívio de sintomas (Sui et al., 2021; Cubo; Medvedev, 2018).

Figura 1 - Representação do sistema DBS.



Legenda: 1 - Neuroestimulador. 2 - Fio de extensão. 3 - Eletrodo. 4 - Contatos do eletrodo.

Fonte: Adaptado de Jardim et al. (2020).

Apesar da DBS ser um procedimento cirúrgico bem tolerado amplamente utilizado em todo o mundo, novas aplicações da técnica vem requerendo aumento da tensão no eletrodo e, conseqüentemente, podem expor os pacientes com o implante a um aquecimento excessivo na região, que é sensível. Além disso, devido ao acoplamento térmico com outros equipamentos, como por exemplo a MRI, pode ocorrer aumento de temperatura ainda maior, causando danos aos tecidos (Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; McElcheran et al., 2019; Golestanirad et al., 2020; Jardim et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Sui et al., 2021). A MRI é uma ferramenta clínica e de pesquisa importante para análise de imagens com alta qualidade. Todavia, os riscos associados aos dispositivos de imagem em pacientes que possuem o eletrodo DBS implantado levaram a regulamentações rígidas, limitando a utilização da MRI nesses casos (Boutet et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Essa limitação ocorre porque uma vez que o dispositivo está dentro do campo de radiofrequência do *scanner* de MRI, os condutores elétricos atuam como uma antena, amplificando a deposição de energia no tecido e, por consequência, possibilitando que ocorra aquecimento excessivo das regiões do tecido cerebral próximas aos eletrodos (McElcheran et al., 2019; Boutet et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021; Sadeghi-Tarakameh et al., 2022).

Diversos trabalhos se dedicaram ao estudo experimental visando determinar a extensão do aquecimento devido ao acoplamento entre o campo de MRI e os implantes de DBS em modelos realistas da cabeça humana (Rezai et al., 2004; Nordbeck et al., 2009; Davidson et

al., 2021; Sadeghi-Tarakameh et al., 2022) e estudos de simulação (McElcheran et al., 2019; Golestanirad et al., 2020). Além disso, resultados também foram obtidos por meio de modelos computacionais com equações matemáticas que descrevem o problema físico para modelar o aumento de temperatura causado pelo eletrodo. Esses estudos foram realizados resolvendo problemas diretos considerando modelos matemáticos aproximados do cérebro (Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; Jardim et al., 2020; Dawson et al., 2023), ou ainda, modelos mais realistas obtidos com MRI (Khadka et al., 2020). Há também estudos para monitorar o aumento da temperatura resolvendo problemas diretos de biotransferência de calor que utilizam modelos matemáticos semelhantes ao modelo DBS (Fiocchi et al., 2020; Serrano-Amenos et al., 2020). O crescente uso da técnica DBS, incluindo novas aplicações com tensões mais altas aliada ao pouco número de trabalhos dedicados às mudanças de temperatura causadas pela DBS, indicam a necessidade da aplicação de técnicas como as apresentadas neste trabalho visando minimizar o risco de lesões.

Além disso, uma alternativa interessante é utilizar técnicas de problemas inversos que levam em consideração medidas experimentais para estimar algumas propriedades físicas presentes no modelo matemático DBS. Nesse sentido, apenas um trabalho foi encontrado aplicando problemas inversos envolvendo variação de temperatura e estimativa de propriedades (Jardim et al., 2020). A utilização de problemas inversos para estimação de parâmetros e obtenção do campo de temperatura é bastante relevante, pois permite uma análise das incertezas associadas ao modelo matemático e as propriedades do problema, além de levar em consideração medidas experimentais. Nesse cenário, problemas de biotransferência de calor têm sido formulados por meio de abordagens bayesianas, a fim de acoplar os resultados incertos das simulações numéricas com as medidas que contêm incertezas e, com isso, obter uma melhor previsão do campo de temperatura dos tecidos dentro do corpo e estimar propriedades do modelo matemático (Varon; Orlande; Eliçabe, 2015; Lamien et al., 2017; Pacheco et al., 2020; Silva et al., 2021; Ferreira et al., 2023). No que diz respeito a técnica DBS, não foram encontrados estudos que abordem o problema matemático com a equação da DBS acoplada juntamente com a utilização de abordagens bayesianas, nem mesmo trabalhos envolvendo quantificação de incertezas ou projeto ótimo sob incerteza envolvendo o problema térmico como objetivo principal. Sendo assim, o objetivo e contribuição desta tese pode ser definido como apresentado no tópico a seguir.

## **Objetivos**

Esse trabalho visa, utilizando inferência bayesiana, estimar o campo de temperatura e propriedades presentes no modelo matemático de biotransferência de calor no cérebro sujeito a um dispositivo DBS implantado. Com isso, melhora-se a precisão do campo de temperatura estimado e diminui-se o risco de lesões relacionadas a técnica DBS. Nesse sentido, pode-se citar os seguintes objetivos específicos:

- Realizar revisão bibliográfica sobre DBS, biotransferência de calor e problemas inversos;
- Obter a solução do problema direto de biotransferência de calor;
- Verificar a solução e obter a validação do modelo matemático utilizando resultados oriundos da literatura;
- Estimar o potencial elétrico ( $V_{rms}$ ), considerando o problema permanente, utilizando o método de Monte Carlo com Cadeia de Markov (*Markov Chain Monte Carlo* - MCMC) via algoritmo de Metropolis-Hastings;
- Realizar a estimativa de estado com diferentes filtros de partículas considerando o modelo matemático de biotransferência de calor transiente e comparar suas soluções;
- Estimar parâmetros do modelo matemático de biotransferência de calor transiente utilizando o método MCMC via Metropolis-Hastings, bem como a realização de projeto ótimo.

## Organização do Trabalho

No Capítulo 1 apresenta-se a revisão bibliográfica onde se inclui: (1) contextualização histórica sobre estimulação elétrica e neurologia; (2) estimulação cerebral profunda; (3) modelo matemático de biotransferência de calor; (4) problemas inversos; e (5) contribuição da tese para o meio científico.

No Capítulo 2 apresenta-se a formulação do problema físico e a modelagem matemática para transferência de calor em tecido biológico com o eletrodo DBS implantado. Para essa modelagem, a equação clássica de biotransferência de calor foi utilizada em conjunto com uma equação de Laplace acoplada como um termo fonte que representa a contribuição do aquecimento causado pelo eletrodo DBS.

No Capítulo 3, apresentam-se os passos para obter a solução do problema direto utilizando o Método dos Elementos Finitos (MEF) com a rotina computacional NDSolve, intrínseca do *software* Wolfram Mathematica e o Método das Diferenças Finitas (MDF).

No Capítulo 4 apresentam-se os passos para a análise de sensibilidade, a análise sob incerteza e a solução de problemas inversos através do método MCMC e de problemas de estimativa de estado empregando o filtro de Kalman e diferentes filtros de partículas, tais como, os filtros amostragem por importância sequencial (*Sequential Importance Sampling* - SIS), amostragem por importância e reamostragem sequencial (*Sampling Importance Resampling* - SIR), auxiliar de partículas ou amostragem auxiliar e reamostragem por importância (*Auxiliary Sampling Importance Resampling* - ASIR) e de Liu & West.

No Capítulo 5 encontra-se a verificação do modelo matemático apresentado no Capítulo 2 por meio da comparação das soluções numéricas obtidas com MEF e o MDF. Além disso,

apresenta-se a validação do modelo permanente utilizando como referências os dados experimentais disponibilizados por [Elwassif et al. \(2012\)](#).

No Capítulo 6 são apresentados os resultados obtidos para a análise de sensibilidade, a análise sob incertezas e a solução para o problema inverso com o método MCMC e os filtros de partículas SIR, ASIR e de Liu & West. Além das discussões sobre o tema.

Finalmente, no Capítulo 7, encontram-se as Conclusões e sugestões de atividades futuras.

## 1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 1.1 Contextualização histórica sobre estimulação elétrica e neurologia

As primeiras evidências que conduziram pesquisadores a estudar os estímulos elétricos para tratamento de distúrbios neuropsiquiátricos ocorreram por volta de 1800 através de estimulações elétricas aplicadas em músculos de animais (Volta; Banks, 1800; Arianpouya et al., 2021). Esses estudos iniciais levaram cientistas a buscar mais informações sobre o funcionamento do cérebro humano submetido a aplicação de impulsos elétricos. Com isso, no século 19, as aplicações de corrente elétrica tornaram-se comuns em anestésias e percebeu-se que se poderia utilizar estímulos elétricos no cérebro para o tratamento de algumas doenças motoras (Schwalb; Hamani, 2008). No entanto, foi necessário quase um século para que a tecnologia avançasse a ponto de, no século 20, se considerar a implantação de eletrodos de estimulação elétrica (Schwalb; Hamani, 2008; Gardner, 2013; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021).

Antes de haver estimulação elétrica para tratar distúrbios do movimento, já havia a ablação. Segundo Arianpouya et al. (2021) os estudos com o objetivo de melhorar sintomas e dor em distúrbios do movimento utilizando ablação térmica começaram a surgir na década de 1940 com procedimentos para criar lesões permanentes em regiões específicas do cérebro. Nesse contexto, para identificar os melhores alvos de lesão na ablação, começaram a se desenvolver estudos utilizando a eletrografia (DODGE JR. et al., 1954; Schwalb; Hamani, 2008; Arianpouya et al., 2021). Mais adiante, por volta de 1952, ainda com o objetivo de identificar o alvo ideal e diminuir as lesões em locais indesejados, a estimulação de estruturas cerebrais profundas passou a ser usada em pacientes com doenças psiquiátricas como um procedimento que antecedia a cirurgia por ablação (Schwalb; Hamani, 2008; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Nesse contexto, no final da década de 1990, devido a terapia por ablação ter a desvantagem de gerar uma possível lesão mal posicionada irreversível, juntamente com o desenvolvimento da estimulação crônica, ocorreu o surgimento da DBS como uma alternativa de tratamento promissora (Bergman; Wichmann; DeLong, 1990; Schwalb; Hamani, 2008; Hariz; Blomstedt; Zrinzo, 2010; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021).

### 1.2 Estimulação cerebral profunda

A utilização da DBS para tratar distúrbios do movimento começou em 1987, quando Benabid et al. (1987) publicaram um artigo contando suas experiências com DBS no tratamento do tremor essencial e na interrupção de tremores parkinsonianos. Em consequência, foram realizados mais estudos confirmando esses resultados e inicializou-se o interesse pela comercialização de dispositivos DBS (Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Anos depois, em 1995 a

Medtronic, uma empresa de tecnologia médica de Minneapolis nos Estados Unidos, recebeu aprovação regulatória para seu primeiro dispositivo DBS comercial (Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Com isso, segundo Krauss et al. (2021), surgiu o primeiro neuroestimulador para DBS, que permitia apenas estimulação unilateral. Mais adiante, em 1999, o primeiro neuroestimulador *dual-channel* foi lançado na Europa e, com o passar do tempo, tornou-se o mais utilizado em todo o mundo (Krauss et al., 2021). A maior parte dos estudos recentes se concentraram em desenvolver novos modelos de eletrodo com objetivo de permitir corrente direcionada, maior variação nos parâmetros de programação, avanços na compatibilidade com MRI, entre outros aspectos (Hariz; Blomstedt; Zrinzo, 2010; Bronstein et al., 2011; Gardner, 2013; Aum; Tierney, 2018; Harmsen et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021). Existem diferentes modelos de eletrodos e marcas no mercado. A implantação de um ou outro eletrodo pode variar de acordo com a finalidade desejada.

Atualmente a estimulação cerebral profunda tem sido utilizada para diversos tratamentos de origem neurológica sendo aplicada, até o ano de 2021, em mais de 20 indicações diferentes e 40 alvos cerebrais distintos, com mais de 175.000 dispositivos DBS implantados globalmente desde 1987 (Arianpouya et al., 2021). Algumas aplicações já foram aprovadas há anos, enquanto outras estão em processo de estudo ou aprovação.

A primeira aplicação clínica aprovada de DBS foi para o tratamento de tremor essencial na Europa em 1995, depois pela *Food and Drug Administration* (FDA) dos Estados Unidos em 1997 (Gardner, 2013; Aum; Tierney, 2018; Wong et al., 2020; Krauss et al., 2021). O tremor essencial é um distúrbio do movimento em que as contrações oscilatórias dos músculos produzem um tremor de ação involuntária. A técnica DBS melhora os sintomas do tremor com estabilidade a longo prazo garantindo, na maioria dos casos, a redução do tremor por muitos anos (Lozano et al., 2019; Wong et al., 2020; Potel et al., 2022).

Em seguida, em 1998, foi aprovado na Europa o uso da tecnologia DBS para o tratamento da doença de Parkinson, seguida da aprovação da FDA em 2002 (Starr; Vitek; Bakay, 1998; Gardner, 2013; Aum; Tierney, 2018; Arianpouya et al., 2021). Desde então, tornou-se bem aceito na doença de Parkinson para pacientes que não respondem de forma satisfatória aos tratamentos com remédios, e substituiu quase completamente a cirurgia ablativa, com melhores resultados, mais flexibilidade, reversibilidade potencial e menor morbidade (Starr; Vitek; Bakay, 1998; Gardner, 2013; Aum; Tierney, 2018; Lozano et al., 2019; Harmsen et al., 2020; Arianpouya et al., 2021; Krauss et al., 2021; Xiao et al., 2021; Potel et al., 2022).

No que diz respeito a distonia, um distúrbio neurológico do movimento caracterizado por contrações involuntárias dos músculos, desde o primeiro caso publicado em 1977, a DBS tem sido cada vez mais usada como tratamento para suas síndromes, especialmente em pacientes com distonia grave (Krauss et al., 2004; Schwalb; Hamani, 2008; Aum; Tierney, 2018; Lozano et al., 2019; Macerollo et al., 2020; Krauss et al., 2021; Potel et al., 2022). A FDA concedeu permissão para o uso do sistema DBS da Medtronic para distonia em 2003 (Krauss et al., 2021).

Além disso a DBS tem sido estudada no tratamento de transtorno obsessivo-compulsivo

(TOC) desde o primeiro caso relatado na literatura em 1999 e, após estudo controlado publicado em 2008, recebeu aprovação da Conformidade Europeia (Conformité Européenne - CE), seguida da aprovação pela FDA em 2009 (Krauss et al., 2021). Pacientes com TOC submetidos a DBS geralmente apresentam melhora na qualidade de vida, com considerável progresso na qualidade física, psicológica e social (Schwalb; Hamani, 2008; Aum; Tierney, 2018; Lozano et al., 2019; Novak Filho; Meneses; Meneses, 2019; Krauss et al., 2021; Wu et al., 2021).

Para a epilepsia, uma condição médica onde há um mau funcionamento do cérebro devido a emissão de sinais, descargas ou impulsos elétricos incorretos emitidos pelos neurônios, a DBS mostrou-se promissora como tratamento e foi aprovada para uso na Europa sob a marca CE com uma aprovação adicional para epilepsia refratária em 2010 (Aum; Tierney, 2018; Salanova, 2018; Lozano et al., 2019; Arianpouya et al., 2021)

Além disso, a DBS está sob investigação para uma ampla gama de outras condições resistentes ao tratamento, incluindo depressão, doença de Alzheimer (Lozano et al., 2019; Lam et al., 2021), síndrome de Tourette (Lozano et al., 2019; Xu et al., 2020; Potel et al., 2022), entre outras (Aum; Tierney, 2018; Lozano et al., 2019; Harmsen et al., 2020; Krauss et al., 2021; Lopez et al., 2021).

### 1.3 Modelo matemático de biotransferência de calor

A primeira relação matemática que descreveu a transferência de calor entre sangue e tecido foi apresentada por Pennes (1948) a partir de modificações na equação de condução de calor. O modelo proposto pelo autor em 1948 leva em consideração a energia metabólica e a perfusão sanguínea em um tecido vivo e foi projetado originalmente para prever campos de temperatura no antebraço humano, mas pode ser usado para calcular a taxa de transferência de calor quantitativamente em quaisquer tecidos com perfusão (Pennes, 1948). Ao longo dos anos, outros autores propuseram adaptações ao modelo clássico de Pennes com o intuito de incluir efeitos que pudessem ser importantes em determinadas aplicações. Nessas adaptações, foram incluídas a troca de calor entre o sangue arterial e venoso (Mitchell; Myers, 1968; Keller; Seiler Junior, 1971), a consideração de modelos porosos (Shih; Kou; Lin, 2002), a inclusão de mudança de fase da água contida no tecido (Abraham; Sparrow, 2007), mudanças na perfusão sanguínea devido ao aumento da temperatura ou a algum dano térmico sofrido (Chen; Holmes, 1980), problemas multicamada ou situações onde as propriedades variam com o tempo e/ou espaço (Weinbaum et al., 1997; Ciesielski; Mochnacki, 2018; Barros; Abreu; Knupp, 2019; Ansari; Chaudhary; Singh, 2023), entre outros (Shrivastava, 2018).

Existem casos em que, além dos termos relacionados a energia metabólica e a perfusão sanguínea, é interessante considerar uma fonte de calor externa que influencia no aumento de temperatura do tecido biológico. Assim, torna-se possível investigar aquecimentos causados por microeletrodos que transformam energia elétrica em energia térmica (Kim et al., 2007; Ng;

Jamil, 2014; Serrano-Amenos et al., 2020), hipertermia (Gupta; Singh; Rai, 2013; Andreozzi et al., 2021; Malekmohamadi; Ahmadikia, 2023), ablação (Abraham; Sparrow, 2007; Loiola; Orlande; Dulikravich, 2018; Namakshenas et al., 2023), além de estudos relacionado a equação hiperbólica de biotransferência de calor (Hobiny; Abbas, 2018). Nesse contexto, os problemas DBS incluem o termo de fonte externa de calor para representar o aquecimento imposto pelo campo elétrico gerado no eletrodo (Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Raoul et al., 2007; Elwassif et al., 2012; Cubo; Medvedev; Åström, 2015; McElcheran et al., 2019; Khadka et al., 2020; Ahsan et al., 2022). Para descrever o campo elétrico, pode-se utilizar Equações Diferenciais Parciais (EDPs) que depende da condutividade elétrica do cérebro. Nesses casos, resolve-se a EDP para o potencial elétrico, substitui-se a solução no termo de fonte externa de calor e, em seguida, resolve-se a EDP relacionada ao perfil de temperatura (Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Raoul et al., 2007; Elwassif et al., 2012; Cubo; Medvedev; Åström, 2015; Cubo; Medvedev, 2018; Khadka et al., 2020).

Para os modelos matemáticos relacionados com o DBS, segundo Chang (2003), como as sondas de ablação por radiofrequência operam entre 460 kHz e 550 kHz e, nessas frequências, o comprimento de onda é várias ordens de grandeza maior do que o tamanho do eletrodo de ablação, a sonda de ablação dissipa a maior parte de sua energia por condução elétrica e não por acoplamento capacitivo. Nessas condições, o modelo de condução elétrica é quase estático, o que permite resolver o campo elétrico usando EDPs em regime estacionário (Chang, 2003; Cubo; Medvedev, 2018). Essa hipótese permite justificar a utilização da equação de Laplace para o potencial elétrico (Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Lopez-Quintero et al., 2010; Elwassif et al., 2012; Cubo; Medvedev, 2018; Khadka et al., 2020).

Nesse contexto, Chang (2003) utilizou o MEF para resolver um problema permanente tridimensional em coordenadas cartesianas que descreve o campo elétrico e a distribuição de temperatura ao redor de sondas de ablação por radiofrequência. Alguns anos depois, Elwassif et al. (2006), utilizando como referência o trabalho de Chang (2003), investigaram a magnitude e a distribuição espacial de temperatura induzidas pelo DBS. Segundo os autores, esperava-se que ao induzir estimulações elétricas ocorreria um aumento de temperatura como resultado tanto do calor gerado pelo efeito Joule quanto das respostas metabólicas à estimulação. Como os modelos de eletrodo utilizados como referência por Elwassif et al. (2006) eram eletrodos cilíndricos e apresentavam propagação simétrica do potencial elétrico ao longo de toda a base, os autores consideraram o modelo matemático permanente bidimensional em coordenadas cilíndricas, ou seja, com variações no raio e na altura. Além disso, Elwassif et al. (2006) utilizaram a Eq. (1) para realizar o cálculo do valor eficaz (*Root Mean Square* - RMS) de uma função de onda  $v(t)$  em um período de pulso  $T_p$ , onde a integral calcula a média quadrática da função durante o período  $T_p$ , e a raiz quadrada do resultado dessa integral fornece o valor eficaz do

potencial elétrico  $V_{rms}$ .

$$V_{rms} = \sqrt{\frac{1}{T_p} \int_0^{T_p} [v(t)]^2 dt}. \quad (1)$$

Dando continuidade ao trabalho de 2006, foi publicado por [Elwassif et al. \(2012\)](#) um novo artigo, considerando uma geometria realista de um eletrodo DBS da [Medtronic \(2008\)](#). O objetivo dos autores foi analisar as mudanças de temperatura considerando diferentes configurações de eletrodos, protocolos de estimulação e propriedades do tecido, de forma a investigar como a mudança no *design* do dispositivo poderia mitigar o aumento da temperatura de pico, por exemplo, com componentes do dispositivo atuando como dissipadores de calor. Para realizar tal estudo os autores desenvolveram um aparato experimental a fim de validar as soluções obtidas computacionalmente. O experimento foi realizado inserindo um eletrodo Modelo 3389 da [Medtronic \(2008\)](#) no centro de um cilindro com solução salina, onde a concentração de solução foi selecionada para corresponder à condutividade elétrica e térmica do tecido cerebral e as medições de temperatura durante a estimulação do eletrodo DBS foram obtidas por um micro-termopar com precisão de 0,1 °C. A solução computacional utilizou o modelo de biotransferência de calor bidimensional permanente em coordenadas cilíndricas e os resultados obtidos foram validados mostrando que o modelo computacional descreve o comportamento da curva de temperatura obtida experimentalmente. Por fim, os autores aumentaram a voltagem  $V_{rms}$  aplicada para simular o acoplamento do DBS com a MRI, considerando que o aquecimento é proveniente do campo elétrico espalhado devido à interação da frequência de rádio da MRI, do campo magnético e do dispositivo DBS.

Posteriormente, os trabalhos de [Elwassif et al. \(2006\)](#) e [Elwassif et al. \(2012\)](#) serão utilizados como referência para verificação e validação dos resultados obtidos nesta tese. Nestes trabalhos, não foi realizada análise sob incerteza ou estimação de parâmetros térmicos ou elétricos.

Além das análises de temperatura em problemas com o eletrodo DBS acoplado, a equação de biotransferência de calor proposta por [Pennes \(1948\)](#) também é muito utilizada em estudos que abordam dano térmico no cérebro em outros cenários e aplicações ([Nunes; Orlande; Nowak, 2019](#); [Serrano-Amenos et al., 2020](#); [Alamouti et al., 2021](#); [Baker et al., 2022](#); [Bousselham et al., 2022](#); [Nunes; Orlande; Nowak, 2022](#); [Serrano-Amenos et al., 2023](#); [Sung et al., 2023](#)). Assim, [Serrano-Amenos et al. \(2020\)](#) e [Serrano-Amenos et al. \(2023\)](#) modelaram e analisaram numericamente o efeito térmico de um implante de unidade craniana de titânio que faz parte de um sistema de interface cérebro-computador, cujo objetivo é auxiliar na restauração da caminhada e da sensação das pernas em pessoas com lesão medular. [Nunes, Orlande e Nowak \(2019\)](#) e [Nunes, Orlande e Nowak \(2022\)](#) utilizaram modelos matemáticos multicamadas, bidimensionais, em coordenadas esféricas e cilíndricas com o objetivo de analisar a distribuição de temperatura em recém-nascidos e investigar a encefalopatia hipóxico-isquêmica, cujo principal

tratamento é o resfriamento das regiões afetadas.

A partir da revisão apresentada nas seções anteriores, conclui-se que existe uma vasta diversidade de trabalhos com o objetivo de analisar temperatura utilizando a equação de biotransferência de calor, mostrando, com isso, que o modelo matemático proposto por Pennes (1948) continua sendo muito utilizado. Diversos estudos incorporam eletrodos ao problema matemático por meio da introdução de uma taxa de calor fornecida por uma fonte externa, obtida a partir da solução da equação de Laplace para o potencial elétrico. Os trabalhos que estudam, especificamente, a biotransferência de calor no cérebro mostram a importância de analisar e obter o campo de temperatura de forma precisa, pois trata-se de um órgão extremamente sensível, onde pequenas mudanças de temperatura podem ocasionar graves lesões. Com isso, torna-se importante melhorar as técnicas de análise da temperatura de forma a tornar as soluções matemáticas mais precisas e eficientes. Nesse contexto, uma vez que as propriedades térmicas variam de pessoa para pessoa, técnicas de problemas inversos podem ser adequadamente aplicadas para melhorar a precisão dos resultados obtidos, considerar e analisar a incerteza dos parâmetros nos resultados, ou ainda para estimar parâmetros dos modelos matemáticos.

#### 1.4 Problemas Inversos

Os problemas inversos desempenham um papel crucial tanto na engenharia quanto nas ciências em geral, especialmente em estudos que abordam a transferência de calor. Em um problema inverso o objetivo é determinar as causas ou parâmetros de um sistema a partir de observações ou medições das consequências desse sistema. Ou seja, enquanto em um problema direto se conhecem as condições iniciais e/ou parâmetros do sistema e se busca prever suas consequências, em um problema inverso, conhecem-se as consequências e busca-se determinar as condições iniciais e/ou parâmetros do sistema que as geraram. No que diz respeito a transferência de calor, os problemas inversos são tipicamente aplicados em situações onde não é possível realizar uma medição direta de quantidades de interesse presentes no modelo matemático, como, por exemplo, propriedades termo-físicas, coeficientes de troca térmica, fluxos de calor, etc. Assim, o problema inverso consiste na estimativa dos parâmetros e/ou funções de um sistema e geralmente requer a solução do problema direto associado (Beck; Arnold, 1977; Özisik; Orlande, 2000; Beck, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Kaipio; Fox, 2011; Orlande et al., 2011; Orlande et al., 2011b; Silva Neto; Becceneri, 2012; Platt; Yang; Silva Neto, 2018; Özisik; Orlande, 2021).

Ademais, é importante destacar que os problemas inversos são caracterizados por sua natureza mal posta. Em um problema mal posto pequenas variações nos dados de entrada podem resultar em grandes variações nos resultados, tornando a solução do problema instável ou não única. Já nos problemas bem postos atende-se às condições de existência, unicidade e estabilidade em relação aos dados fornecidos inicialmente. Porém, quando se trata de problemas

inversos, a existência e unicidade de uma solução podem ser matematicamente comprovadas em apenas alguns casos, pois a maioria dos problemas inversos são muito sensíveis a erros de medida associados aos dados de entrada (Özisik; Orlande, 2000; Orlande et al., 2011b; Silva Neto; Becceneri, 2012). Com isso, em geral, a aplicação de técnicas de regularização é fundamental para alcançar resultados satisfatórios em problemas inversos. Diversas metodologias estão disponíveis para esse fim, incluindo métodos de mínimos quadrados, técnicas de regularização, abordagens variacionais e estratégias de inferência bayesiana (Alifanov, 1974; Tikhonov, 1975; Tikhonov; Arsenin, 1977; Beck; Blackwell; Clair Junior, 1985; Özisik; Orlande, 2000; Beck, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Silva Neto; Becceneri, 2012; Orlande, 2012; Özisik; Orlande, 2021).

Os problemas inversos são aplicados em problemas de biotransferência de calor tipicamente para estimar propriedades térmicas e elétricas, funções de fluxo de calor e variáveis de estado. O intuito desses problemas é obter o máximo de informação sobre o problema físico em questão e, dessa forma, melhorar a precisão dos resultados, diminuindo, com isso, os riscos de lesões (Varon; Orlande; Eliçabe, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017; Lamien et al., 2017; Pacheco et al., 2018; Jardim et al., 2020; Pacheco et al., 2020; Ventura; Abreu; Loiola, 2020; Silva et al., 2021). Nos problemas de biotransferência de calor que envolvem áreas como a biomédica, a elétrica e a mecânica, além das propriedades físicas do corpo, que podem variar de pessoa para pessoa, existem variáveis de estado como a temperatura, o campo elétrico e o termo fonte que são difíceis de se observar e medir. Com isso, problemas de estimativa de variáveis de estado e parâmetros podem ser aplicados para observar essas variações no momento do tratamento, estabelecer protocolos e realizar o controle de forma mais precisa e eficiente (Kaipio; Somersalo, 2006; Varon; Orlande; Eliçabe, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017; Lamien et al., 2017; Jardim et al., 2020). Quando trata-se da estimativa de variáveis de estado a abordagem bayesiana, uma técnica estatística que permite combinar novas informações com a informação disponível previamente, pode ser utilizada por meio da solução de problemas de estimativa de estado.

Os problemas de estimativa de estado foram desenvolvidos com o propósito de aproveitar os dados medidos disponíveis em conjunto com o conhecimento prévio sobre os fenômenos físicos, parâmetros geométricos e informações pertinentes aos dispositivos de medição. Essa abordagem visa melhorar a precisão da estimativa ao integrar diversos tipos de dados e informações, permitindo uma análise mais abrangente e informada dos sistemas em questão. Nessa abordagem, a solução para um problema inverso é a distribuição de probabilidade da quantidade de interesse quando todas as informações disponíveis foram incorporadas ao modelo. A base para a inferência bayesiana é o teorema de Bayes (Bayes, 1763; Özisik; Orlande, 2000; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Orlande, 2012). As técnicas bayesianas vêm sendo muito empregadas nas mais diversas áreas e utilizando diferentes algoritmos para o cálculo da densidade de probabilidade posterior presente no teorema de Bayes. Diversos autores realizaram análises teóricas detalhadas de problemas inversos, mostrando em seus livros diferentes

métodos de resolução (Doucet et al., 2001; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Simon, 2006; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011; Orlande et al., 2011b). Nesse contexto, o uso de problemas inversos com métodos da Inferência bayesiana aplicados a equação de biotransferência de calor pode ser observado em muitos trabalhos, dos quais pode-se destacar o método MCMC e os filtros de partículas.

Umadevi, Raghavan e Jaipurkar (2011) aplicaram o MCMC em um problema de detecção do câncer de mama com o intuito de estimar o contorno do tumor a partir de medidas de temperatura na superfície da pele da mama. Rojczyk et al. (2017) usaram o MCMC para estimar parâmetros que aparecem na formulação da equação de biotransferência de calor e, com isso, identificar a existência de tumores cutâneos. Alaeian, Orlande e Lamien (2018) utilizaram o método MCMC para estimar parâmetros e obter a distribuição de temperatura em um caso relacionado ao tratamento de hipertermia do câncer com aquecimento a laser. Ventura, Abreu e Loiola (2020) utilizaram o método MCMC, para obter informações sobre as propriedades ópticas decorrentes da simulação de tecidos tratados por ablação a laser. Silva et al. (2021) usaram o método MCMC juntamente com um modelo de erro de aproximação (*Approximation Error Model* - AEM) para estimar os parâmetros de um modelo de aquecimento a laser considerando a presença de células cancerígenas sob os efeitos de um medicamento quimioterápico. Cardenas, Varon e Pereira (2022) implementaram o método MCMC para estimar parâmetros que influenciam o problema físico utilizado para simular o tratamento de câncer utilizando hipertermia por ultrassom focalizado de alta intensidade. Mais recentemente, Ferreira et al. (2023) e Silva, Alaeian e Orlande (2023) implementaram o MCMC com amostragem sequencial por blocos de parâmetros para estimar propriedades em problemas de ablação térmica de tumores.

No que diz respeito aos filtros de partículas, Varon, Orlande e Eliçabe (2015) utilizaram o filtro SIR para obter simulações numéricas sob incertezas em um estudo sobre o tratamento do câncer baseado na hipertermia induzida por ondas eletromagnéticas de radiofrequência. Posteriormente, em Varon, Orlande e Eliçabe (2016), os autores utilizaram o filtro de Liu & West para obter a estimativa simultânea de parâmetros do modelo e variáveis de estado considerando novamente o tratamento do câncer por hipertermia. Em seguida, Lamien, Orlande e Eliçabe (2017) resolveram problemas inversos utilizando o filtro de Liu & West juntamente com a técnica AEM a fim de agilizar a solução do problema de estimativa de estado. No ano seguinte, Lamien et al. (2018) apresentaram a comparação da solução do problema inverso com os filtros de partículas SIR, ASIR e Liu & West. Nunes, Orlande e Nowak (2019) e posteriormente, Nunes, Orlande e Nowak (2022) utilizaram o filtro de partículas SIR para analisar as distribuições de temperaturas transitórias do cérebro e de outras regiões do corpo de recém-nascidos com encefalopatia hipóxico-isquêmica. Magalhães, Orlande e Suassuna (2021) utilizaram o filtro SIR para estimar sequencialmente a concentração de creatinina no sangue e auxiliar no monitoramento e controle *on-line* da terapia de hemodiálise.

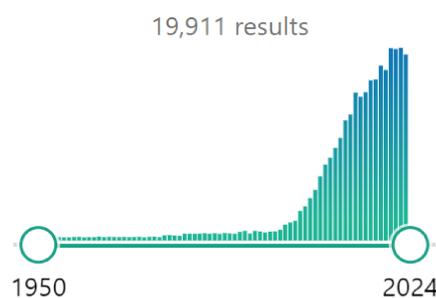
Com relação a estimulação cerebral profunda, até a redação desse texto apenas um trabalho foi encontrado envolvendo problemas inversos em biotransferência de calor aplicado na

modelagem de DBS, publicado por [Jardim et al. \(2020\)](#). Nesse trabalho, foi resolvido um problema de biotransferência de calor no cérebro contendo um eletrodo DBS e, aplicando as técnicas de problemas inversos considerando uma função objetivo de máximo a posteriori (*Maximum a Posteriori Probability* - MAP), foram estimadas as condutividades térmica e elétrica usando medidas obtidas com um sensor dentro do eletrodo DBS. Nesse contexto, dando continuidade ao trabalho de [Jardim et al. \(2020\)](#), percebe-se a importância de realizar estudos mais detalhados e completos que englobem análises sob incertezas dos parâmetros e estimativas sequenciais de vetores de estado, que serão o foco desta tese.

### 1.5 Contribuição da tese

A técnica DBS vem sendo aplicada ultimamente de forma crescente, visando em geral aperfeiçoar os tratamentos de doenças existentes e/ou ampliar a gama de distúrbios e doenças tratadas com essa abordagem. Uma consulta ao PubMed retorna quase 20 mil artigos relacionados a *Deep Brain Stimulation*, sendo o primeiro publicado em 1950, conforme indicado na Figura 2. Nota-se que houve um aumento significativo do número de trabalhos publicados nos últimos dez anos, sendo quase 1.500 desses somente no último ano. Na Figura 3 está o resultado obtido ao incluir na pesquisa o termo *Temperature* que faz o número de trabalhos encontrados cair para 208, sendo 2023 o ano com maior número de publicações. Esses dados evidenciam o crescente desenvolvimento das pesquisas relacionadas à técnica DBS e a importância de se investigar o campo de temperatura causado pelo uso do DBS em novas aplicações.

Figura 2 - Quantidade de arquivos encontrados na PubMed ao pesquisar (*Deep Brain Stimulation*).

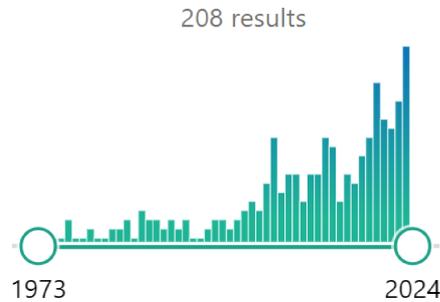


Fonte: Adaptado de [PubMed \(2024a\)](#).

Dado que o cérebro é extremamente sensível a variações de temperatura, e pequenas oscilações térmicas podem resultar em danos ao tecido cerebral, diversos estudos publicados destacam a importância da análise do campo de temperatura em cérebros sujeitos à um eletrodo DBS, conforme discutido nas seções anteriores. Portanto, é fundamental o desenvolvimento de técnicas computacionais que auxiliem na obtenção do campo de temperatura e investiguem de maneira precisa os possíveis danos em aplicações com maiores valores de tensão aplicada

ao eletrodo, assim como em situações em que ocorre aquecimento devido ao acoplamento do eletrodo DBS com outros equipamentos, como, por exemplo, a MRI.

Figura 3 - Quantidade de arquivos encontrados na PubMed ao pesquisar (*Deep Brain Stimulation*) AND (*Temperature*).



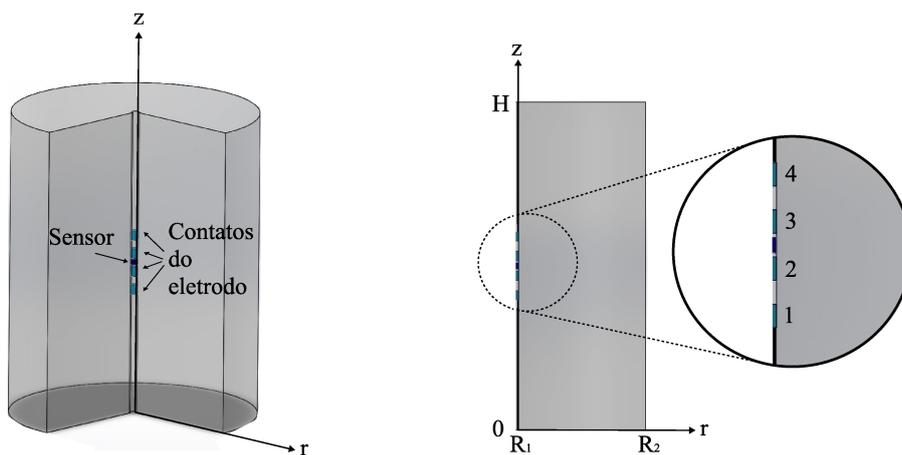
Fonte: Adaptado de [PubMed \(2024b\)](#).

Até o momento, a autora não encontrou na literatura trabalhos que abordem a análise conjunta de medidas experimentais de temperatura com modelos matemáticos, conforme ocorre nos problemas inversos que utilizam filtros bayesianos. Da mesma forma, não foram identificadas aplicações de métodos que incorporem uma análise de incerteza dos parâmetros físicos e matemáticos, explorando sua influência nas soluções desses problemas específicos. Portanto, a principal contribuição desta tese reside na aplicação de técnicas bayesianas para estimar variáveis de estado e parâmetros em um contexto de biotransferência de calor acoplado com o problema eletromagnético do DBS. Assim, os resultados deste estudo têm o potencial de fornecer *insights* valiosos para o desenvolvimento de métodos de monitoramento eficazes ou para a análise de projetos ótimos sob incertezas relacionadas ao DBS.

## 2 PROBLEMA FÍSICO E FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O problema físico considerado neste trabalho envolve a biotransferência de calor no cérebro com um estimulador elétrico DBS implantado, como pode ser observado na Figura 1. A análise será feita considerando uma região cilíndrica suficientemente longa ao redor do eletrodo, conforme ilustra a Figura 4 à esquerda. A troca de calor que ocorre na direção do interior do eletrodo será desprezada, ou seja, a região de raio entre  $r = 0$  e  $r = R_1$  não fará parte do domínio. Essa simplificação gera resultados com menor custo computacional quando comparado aos modelos disponíveis na literatura, além de ser um modelo mais conservador, pois as temperaturas tendem a ser ligeiramente mais altas do que as encontradas nos modelos que levam em conta a dissipação ao longo do próprio eletrodo. Além disso, considera-se que o cilindro possui propriedades constantes ao longo do domínio, uma vez que o gradiente de temperaturas gerado pelo uso dos eletrodos é pequeno. Assumindo que o problema possui simetria, a solução se reduz a resolver o caso de um plano axissimétrico definido pelo comprimento do condutor e o raio de um sistema de coordenadas cilíndricas, conforme mostra a Figura 4 à direita. Este plano tem limites que variam de  $r = R_1$  à  $r = R_2$  e de  $z = 0$  à  $z = H$ , onde  $R_1$  é o raio do eletrodo e  $R_2$  e  $H$  são, respectivamente, uma distância e uma altura suficientemente longas para não influenciar a solução da simulação computacional.

Figura 4 - Representação esquemática do domínio computacional.



Legenda: Esquerda - Domínio tridimensional. Direita - Domínio bidimensional.

Fonte: A autora, 2022.

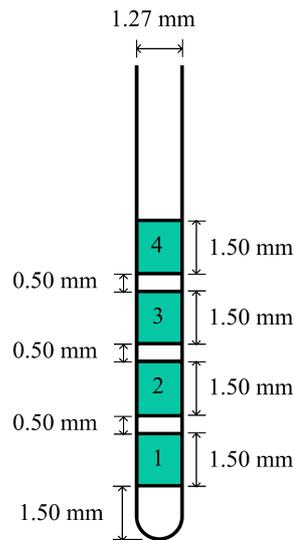
Para a análise dos resultados, será estudado um modelo DBS de eletrodo cilíndrico da Medtronic conhecido como Modelo 3389 que pode ser visualizado na Figura 5 (Medtronic, 2008). Em cada eletrodo há quatro contatos com 1,5 mm comprimento e espaçamento entre

os contatos de 0,5 mm. Além disso, propõe-se que existe um sensor localizado no centro do eletrodo, em  $H/2$ , utilizado para obter medidas experimentais de temperatura (Pennes, 1948; Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; Jardim et al., 2020; Khadka et al., 2020). Para modelar matematicamente esse problema, pode-se utilizar a equação clássica de biotransferência de calor proposta por Pennes (1948), cuja expressão matemática em regime transiente é dada por (Pennes, 1948; Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; Jardim et al., 2020; Khadka et al., 2020):

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q, \quad \text{em } R_1 < r < R_2, \quad 0 < z < H \quad \text{e } t > 0 \quad (2)$$

sendo, para o tecido cerebral,  $\rho$  a massa específica,  $c_p$  o calor específico,  $k$  a condutividade térmica,  $T(r, z, t)$  a temperatura variando com o tempo  $t$  e com as coordenadas espaciais  $r$  e  $z$  e  $Q$  o termo fonte de calor.

Figura 5 - Representação esquemática do eletrodo modelo 3389 da Medtronic.



Fonte: Adaptado de Medtronic (2008).

A condição inicial é definida de forma que todo o domínio tenha temperatura inicial igual à temperatura em condições normais do cérebro. Para as condições de contorno considera-se que em  $r = R_1$  a superfície está termicamente isolada e nos demais limites externos do tecido cerebral a temperatura seja fixada na temperatura em condições normais do cérebro. Logo,

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \text{em } r = R_1, \quad 0 < z < H \quad \text{e } t > 0 \quad (3)$$

$$T(r, z, t) = T_a, \text{ em } r = R_2, \quad 0 < z < H \text{ e } t > 0 \quad (4)$$

$$T(r, z, t) = T_a, \text{ em } R_1 < r < R_2, \quad z = 0 \text{ e } t > 0 \quad (5)$$

$$T(r, z, t) = T_a, \text{ em } R_1 < r < R_2, \quad z = H \text{ e } t > 0 \quad (6)$$

$$T(r, z, t) = T_a, \text{ em } R_1 < r < R_2, \quad 0 < z < H \text{ e } t = 0 \quad (7)$$

onde  $T_a$  é a temperatura inicial do cérebro quando não há aquecimento elétrico. Além disso, a fonte de calor  $Q$  será definida para o caso em estudo como:

$$Q = \rho_b c_b \omega_b [T_b - T(r, z, t)] + Q_m + Q_{ext}(r, z, V), \quad (8)$$

com  $Q_m$  sendo a geração metabólica de calor. O termo  $\rho_b c_b \omega_b [T_b - T(r, z, t)]$  representa a entrada de energia devido à interação entre tecido biológico e o sangue no cérebro, onde,  $\omega_b$  é a perfusão sanguínea,  $\rho_b$  é a massa específica do sangue,  $c_b$  é o calor específico do sangue e  $T_b$  é a temperatura sanguínea. O termo  $Q_{ext}(r, z, V)$  representa a taxa de calor fornecida por uma fonte externa. Neste caso,  $Q_{ext}(r, z, V)$  será dado pelo aquecimento imposto por radiofrequência do eletrodo (Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; Lamien et al., 2017; Jardim et al., 2020; Khadka et al., 2020). Então,

$$Q_{ext}(r, z, V) = \sigma |\nabla V|^2, \quad (9)$$

sendo  $\sigma$  a condutividade elétrica,  $\nabla V$  o campo elétrico e  $V(r, z)$  o potencial elétrico, obtido resolvendo a seguinte equação de Laplace (Chang, 2003; Elwassif et al., 2006; Elwassif et al., 2012; Lamien et al., 2017; Cubo; Medvedev, 2018; Jardim et al., 2020; Khadka et al., 2020):

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \sigma r \frac{\partial V}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \sigma \frac{\partial V}{\partial z} \right) = 0. \text{ em } R_1 < r < R_2 \text{ e } 0 < z < H \quad (10)$$

Para as condições de contorno, em  $r = R_1$  considera-se um potencial aplicado aos eletrodos energizados ajustado para uma função que dependa somente de  $z$ , e para os demais

limites externos do tecido cerebral considera-se que estão isolados eletricamente. Assim,

$$V(r, z) = f(z), \text{ em } r = R_1 \text{ e } 0 < z < H \quad (11)$$

$$\frac{\partial V}{\partial r} = 0, \text{ em } r = R_2 \text{ e } 0 < z < H \quad (12)$$

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0, \text{ em } R_1 < r < R_2 \text{ e } z = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0, \text{ em } R_1 < r < R_2 \text{ e } z = H \quad (14)$$

onde a função  $f(z)$  será definida conforme o modelo de eletrodo utilizado. Nesse caso,

$$f(z) = \begin{cases} V_{rms}, & \text{nas posições dos contatos ativos} \\ 0, & \text{nas demais posições} \end{cases} \quad (15)$$

Ademais, em algumas situações o interesse está em analisar o regime permanente. Nestes casos, pode-se simplificar a Eq. (2), retirando o termo do lado esquerdo da igualdade.

### 3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

A solução das equações diferenciais parciais do capítulo anterior será obtida de forma numérica. A fim de fazer a verificação da solução, serão utilizados dois diferentes métodos, sendo eles o MEF e o MDF. O MEF será empregado a partir da biblioteca *NDSolve*, disponível no *software* de computação simbólica Wolfram Mathematica, cujos detalhes estão disponíveis na seção 3.1. Já o MDF será implementado também no *software* Wolfram Mathematica conforme os passos descritos na seção 3.2.

#### 3.1 Método dos Elementos Finitos (MEF)

O problema apresentado pelas equações no Capítulo 2 pode ser resolvido utilizando o MEF, o qual subdividirá o domínio do problema em uma coleção de subdomínios menores, denominados elementos finitos. Cada subdomínio é representado por um conjunto de equações que são elementos do problema original. Em seguida, esses conjuntos de equações de cada elemento são recombinados sistematicamente em um sistema global de equações para realizar o cálculo final (Bathe, 1996; Cook, 2001; Wolfram Research INC, 2020).

Para implementar a solução utilizando o MEF, será utilizada uma sub-rotina da função *NDSolve*, intrínseca ao *software* de computação simbólica Wolfram Mathematica. A função *NDSolve* é um solucionador de equações diferenciais numéricas gerais. Para especificar o uso do MEF e carregar os comandos úteis do método, deve-se iniciar o código computacional com o comando `Needs["NDSolve'FEM'"]`, onde a sigla FEM representa o MEF em inglês, *Finite Element Method*. Além disso, a função *NDSolve* permite especificar algumas opções, como a *InterpolationOrder* e o *Method*, que foram utilizados neste caso. O comando *InterpolationOrder* especifica a ordem de interpolação, enquanto o *Method* caracteriza o método utilizado na solução. Por fim, a malha será obtida com o comando *ToElementMesh*, que possibilita especificar o tamanho máximo de cada elemento com o *MaxCellMeasure* e o *MaxBoundaryCellMeasure*, o tipo de elemento com o *MeshElementType*, e a ordem com o *MeshOrder* (Wolfram Research INC, 2020).

#### 3.2 Método das Diferenças Finitas (MDF)

Para resolver os sistemas de equações dados no Capítulo 2 com o MDF, primeiramente, será necessário resolver o problema para o potencial elétrico ( $V$ ). Em seguida, de posse da solução para  $V$  em todos os pontos da malha, poderá ser obtida a solução para a temperatura. Nesse caso, foram consideradas duas opções: (1) A solução do problema permanente; e (2) A

solução do problema transiente. A seguir, estão os passos para cada caso.

### 3.2.1 Solução MDF do potencial elétrico

Considerando que a condutividade elétrica ( $\sigma$ ) é constante ao longo do domínio computacional, a Eq. (10) pode ser reescrita como:

$$\sigma \left[ \frac{\partial^2 V(r, z)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V(r, z)}{\partial r} + \frac{\partial^2 V(r, z)}{\partial z^2} \right] = 0. \quad \text{em } R_1 < r < R_2 \quad \text{e} \quad 0 < z < H \quad (16)$$

Aplicando expansões em série de Taylor para aproximar as derivadas parciais, define-se diferenças centradas para as derivadas de segunda ordem e diferenças atrasadas para as derivadas de primeira ordem (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$\left. \frac{\partial^2 V(r, z)}{\partial r^2} \right|_{i,j} = \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta r^2} + O(\Delta r^2), \quad (17)$$

$$\left. \frac{\partial V(r, z)}{\partial r} \right|_{i,j} = \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} + O(\Delta r), \quad (18)$$

$$\left. \frac{\partial^2 V(r, z)}{\partial z^2} \right|_{i,j} = \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} + O(\Delta z^2), \quad (19)$$

onde  $i = 1, 2, \dots, N_r$  e  $j = 1, 2, \dots, N_z$  representam, respectivamente, os nós nas direções  $r$  e  $z$ , sendo  $\Delta$  e  $N$  o tamanho do passo e o número de nós em cada uma das direções  $r$  e  $z$ , e  $O(\Delta r)$ ,  $O(\Delta r^2)$  e  $O(\Delta z^2)$  representam os erros de truncamento obtidos.

Substituindo as Eqs. (17) - (19) na Eq. (16) e desprezando os erros de truncamento, encontra-se (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$\left( \frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta r^2} \right) + \left( \frac{1}{R_1 + \Delta r i} \right) \left( \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} \right) + \left( \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right) = 0, \quad (20)$$

onde  $\Delta r i = \Delta r \times i$ . Reorganizando,

$$B_{1,i} V_{i,j} + B_{2,i} V_{i-1,j} + B_3 V_{i+1,j} + B_4 V_{i,j-1} + B_4 V_{i,j+1} = 0, \quad (21)$$

sendo  $B_{1,i}$ ,  $B_{2,i}$ ,  $B_3$ ,  $B_4$  dadas por:

$$B_{1,i} = -\frac{2}{\Delta r^2} + \frac{1}{\Delta r(R_1 + \Delta ri)} - \frac{2}{\Delta z^2}, \quad (22)$$

$$B_{2,i} = \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{\Delta r(R_1 + \Delta ri)}, \quad (23)$$

$$B_3 = \frac{1}{\Delta r^2}, \quad (24)$$

$$B_4 = \frac{1}{\Delta z^2}. \quad (25)$$

No que diz respeito as condições de contorno, para Eq. (11) em  $r = R_1$  a formulação é dada pela solução de  $f(z)$  em cada ponto do contorno, enquanto que para as Eqs. (12) - (14) as formulações são obtidas utilizando a aproximação por diferenças atrasadas para  $r = R_2$  e  $z = H$  e diferenças avançadas para  $z = 0$ . Desconsiderando os erros de truncamento, têm-se (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$V_{0,j} = f(z_j), \quad (26)$$

$$V_{N_r,j} = V_{N_r-1,j}, \quad (27)$$

$$V_{i,1} = V_{i,0}, \quad (28)$$

$$V_{i,N_z} = V_{i,N_z-1}. \quad (29)$$

Utilizando as Eqs. (21) - (29) obtém-se o sistema de equações lineares que dará a solução

MDF do problema. A formulação matricial em blocos para este problema é dada por:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{D}_1 & \mathbf{A}_1 & \mathbf{E} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{D}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{E} & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{D}_3 & \mathbf{A}_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{A}_{N_r-3} & \mathbf{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{D}_{N_r-2} & \mathbf{A}_{N_r-2} & \mathbf{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{D}_{N_r-1} & \mathbf{A}_{N_r-1} & \mathbf{E} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \mathbf{F} & \mathbf{G} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 \\ \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_2 \\ \mathbf{H}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{H}_{N_z-3} \\ \mathbf{H}_{N_z-2} \\ \mathbf{H}_{N_z-1} \\ \mathbf{H}_{N_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (30)$$

nos quais a matriz identidade ( $\mathbf{I}$ ),  $\mathbf{A}_i$ ,  $\mathbf{D}_i$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{F}$  e  $\mathbf{G}$  são matrizes quadradas de ordem  $N_r$  e aparecem na formulação da Eq. (30)  $N_z$  vezes. Sendo

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ B_4 & B_{1,i} & B_4 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_4 & B_{1,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & B_{1,i} & B_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & B_4 & B_{1,i} & B_4 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_{2,i} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_{2,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & B_{2,i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & B_{2,i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & B_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & B_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} V_{0,k} \\ V_{1,k} \\ V_{2,k} \\ \vdots \\ V_{N_r-2,k} \\ V_{N_r-1,k} \\ V_{N_r,k} \end{pmatrix},$$

onde os vetores  $\mathbf{H}_k$  com  $k = 0, 1, 2, \dots, N_z$  representam os pontos associados com valores fixos

de  $j = k$ . Com isso, a partir das matrizes obtidas pode-se encontrar a solução do problema para o potencial elétrico utilizando a função *LinearSolve* disponível no *software Wolfram Mathematica*.

De posse da solução para o potencial elétrico, as soluções para a temperatura considerando os casos permanente e transiente podem ser obtidas, conforme descrito nas subseções a seguir.

### 3.2.2 Solução MDF da temperatura em regime permanente

Considerando o problema permanente com condutividade térmica ( $k$ ) constante, a Eq. (2) pode ser reescrita como:

$$k \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q(r, z, V) = 0. \quad \text{em } R_1 < r < R_2, \quad 0 < z < H \quad \text{e } t > 0 \quad (31)$$

Aplicando expansões em série de Taylor para aproximar as derivadas parciais da temperatura, considerando diferenças centradas para as derivadas de segunda ordem e diferenças atrasadas para a derivada de primeira ordem, têm-se (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$\left. \frac{\partial^2 T(r, z)}{\partial r^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta r^2} + O(\Delta r^2), \quad (32)$$

$$\left. \frac{\partial T(r, z)}{\partial r} \right|_{i,j} = \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta r} + O(\Delta r), \quad (33)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T(r, z)}{\partial z^2} \right|_{i,j} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta z^2} + O(\Delta z^2). \quad (34)$$

Substituindo as Eqs. (32) - (34) na Eq. (31) e desprezando os erros de truncamento, encontra-se (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$k \left( \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta r^2} \right) + \left( \frac{k}{R_1 + \Delta r i} \right) \left( \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta r} \right) + k \left( \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta z^2} \right) + \rho_b c_b \omega_b (T_b - T_{i,j}) + Q_m + \sigma \left[ \left( \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} \right)^2 + \left( \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta z} \right)^2 \right] = 0, \quad (35)$$

ou ainda,

$$C_{1,i}T_{i,j} + C_{2,i}T_{i-1,j} + C_3T_{i+1,j} + C_4T_{i,j-1} + C_4T_{i,j+1} = C_{5,i,j}, \quad (36)$$

sendo  $C_{1,i}$ ,  $C_{2,i}$ ,  $C_3$ ,  $C_4$  e  $C_{5,i,j}$  dadas por:

$$C_{1,i} = -\frac{2k}{\Delta r^2} + \frac{k}{(R_1 + \Delta r i)\Delta r} - \frac{2k}{\Delta z^2} - \rho_b c_b \omega_b, \quad (37)$$

$$C_{2,i} = \frac{k}{\Delta r^2} - \frac{k}{(R_1 + \Delta r i)\Delta r}, \quad (38)$$

$$C_3 = \frac{k}{\Delta r^2}, \quad (39)$$

$$C_4 = \frac{k}{\Delta z^2}, \quad (40)$$

$$C_{5,i,j} = \rho_b c_b \omega_b T_b + Q_m + \sigma \left[ \left( \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} \right)^2 + \left( \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta z} \right)^2 \right]. \quad (41)$$

A Eq. (36) foi utilizada para os nós internos e as condições de contorno foram calculadas utilizando as seguintes formulações (Özsisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$T_{0,j} = T_{1,j}, \quad (42)$$

$$T_{N_r,j} = T_a, \quad (43)$$

$$T_{i,0} = T_a, \quad (44)$$

$$T_{i,N_z} = T_a. \quad (45)$$

Assim, com as Eqs. (36) - (45) obtêm-se a solução para o problema da temperatura permanente cuja formulação matricial em blocos é dada por:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{D}'_1 & \mathbf{A}'_1 & \mathbf{E}' & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{D}'_2 & \mathbf{A}'_2 & \mathbf{E}' & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{D}'_3 & \mathbf{A}'_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{A}'_{N_r-3} & \mathbf{E}' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{D}'_{N_r-2} & \mathbf{A}'_{N_r-2} & \mathbf{E}' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{D}'_{N_r-1} & \mathbf{A}'_{N_r-1} & \mathbf{E}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathbf{H}'_0 \\ \mathbf{H}'_1 \\ \mathbf{H}'_2 \\ \mathbf{H}'_3 \\ \vdots \\ \mathbf{H}'_{N_z-3} \\ \mathbf{H}'_{N_z-2} \\ \mathbf{H}'_{N_z-1} \\ \mathbf{H}'_{N_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{F}'_1 \\ \mathbf{F}'_2 \\ \mathbf{F}'_3 \\ \vdots \\ \mathbf{F}'_{N_z-3} \\ \mathbf{F}'_{N_z-2} \\ \mathbf{F}'_{N_z-1} \\ \mathbf{G}' \end{pmatrix}, \quad (46)$$

sendo

$$\mathbf{A}'_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ C_4 & C_{1,i} & C_4 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_4 & C_{1,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C_{1,i} & C_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C_4 & C_{1,i} & C_4 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}'_k = \begin{pmatrix} T_{0,k} \\ T_{1,k} \\ T_{2,k} \\ \vdots \\ T_{N_r-2,k} \\ T_{N_r-1,k} \\ T_{N_r,k} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}'_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{2,i} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{2,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & C_{2,i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_{2,i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}'_k = \begin{pmatrix} T_a \\ C_{5,1,k} \\ C_{5,2,k} \\ \vdots \\ C_{5,N_r-2,k} \\ C_{5,N_r-1,k} \\ T_a \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{E}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}' = \begin{pmatrix} T_a \\ T_a \\ T_a \\ \vdots \\ T_a \\ T_a \\ T_a \end{pmatrix},$$

onde, a partir das matrizes obtidas, pode-se encontrar a solução do problema permanente para a temperatura utilizando a função *LinearSolve* disponível no *software Wolfram Mathematica*.

### 3.2.3 Solução MDF da temperatura em regime transiente

Considerando o problema transiente com condutividade térmica ( $k$ ) constante, a Eq. (2) pode ser reescrita como:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + Q(r, z, V). \text{ em } R_1 < r < R_2, \quad 0 < z < H \text{ e } t > 0 \quad (47)$$

Novamente, aplicando expansões em série de Taylor para aproximar as derivadas parciais, considerando diferenças avançadas para a derivada temporal, diferenças centradas para as derivadas de segunda ordem espacial e diferenças atrasadas para a derivada de primeira ordem espacial, têm-se (Özisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$\left. \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} \right|_{i,j}^n = \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} + O(\Delta t), \quad (48)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T(r, z, t)}{\partial r^2} \right|_{i,j}^{n+1} = \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r^2} + O(\Delta r^2), \quad (49)$$

$$\left. \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial r} \right|_{i,j}^{n+1} = \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r} + O(\Delta r), \quad (50)$$

$$\left. \frac{\partial^2 T(r, z, t)}{\partial z^2} \right|_{i,j}^{n+1} = \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} + O(\Delta z^2). \quad (51)$$

Substituindo as Eqs. (48) - (51) na Eq. (2) e desprezando os erros de truncamento, encontra-se (Özisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$\begin{aligned} \rho c_p \left( \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} \right) = & k \left( \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r^2} \right) + \frac{k}{(R_1 + \Delta r i)} \left( \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r} \right) + \\ & k \left( \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) + \sigma \left[ \left( \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} \right)^2 + \left( \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta z} \right)^2 \right] + \\ & Q_m + \rho_b c_b \omega_b (T_b - T_{i,j}^{n+1}). \end{aligned} \quad (52)$$

Reorganizando,

$$C'_{1,i}T_{i,j}^{n+1} + C'_{2,i}T_{i-1,j}^{n+1} + C'_3T_{i+1,j}^{n+1} + C'_4T_{i,j-1}^{n+1} + C'_4T_{i,j+1}^{n+1} = C'^n_{5,i,j}, \quad (53)$$

sendo  $C'_{1,i}$ ,  $C'_{2,i}$ ,  $C'_3$ ,  $C'_4$  e  $C'^n_{5,i,j}$  dadas por:

$$C'_{1,i} = \frac{\rho c_p}{\Delta t} + \frac{2k}{\Delta r^2} - \frac{2k}{\Delta z^2} - \frac{k}{\Delta r(R_1 + \Delta r i)} + \rho_b c_b \omega_b, \quad (54)$$

$$C'_{i,2} = -\frac{k}{\Delta r^2} + \frac{k}{\Delta r(R_1 + \Delta r i)}, \quad (55)$$

$$C'_3 = -\frac{k}{\Delta r^2}, \quad (56)$$

$$C'_4 = -\frac{k}{\Delta z^2}, \quad (57)$$

$$C'^n_{5,i,j} = \frac{\rho c_p}{\Delta t} T_{i,j}^n + \rho_b c_b \omega_b T_b + Q_m + \sigma \left[ \left( \frac{V_{i,j} - V_{i-1,j}}{\Delta r} \right)^2 + \left( \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta z} \right)^2 \right]. \quad (58)$$

Com condições inicial e de contorno dadas por (Özisik, 1993; Tannehill; Anderson; Pletcher, 1997; Peyret; Taylor, 2012):

$$T_{i,j}^0 = T_a, \quad (59)$$

$$T_{0,j}^{n+1} = T_{1,j}^{n+1}, \quad (60)$$

$$T_{N_r,j}^{n+1} = T_a, \quad (61)$$

$$T_{i,0}^{n+1} = T_a, \quad (62)$$

$$T_{i,N_z}^{n+1} = T_a. \quad (63)$$

Assim, com as Eqs. (53) - (63) obtêm-se a solução para o problema da temperatura transiente, cuja formulação matricial em blocos é dada por:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{D}'_1 & \mathbf{A}'_1 & \mathbf{E}' & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{D}'_2 & \mathbf{A}'_2 & \mathbf{E}' & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{D}'_3 & \mathbf{A}'_3 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{A}'_{N_r-3} & \mathbf{E}' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbf{D}'_{N_r-2} & \mathbf{A}'_{N_r-2} & \mathbf{E}' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{D}'_{N_r-1} & \mathbf{A}'_{N_r-1} & \mathbf{E}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathbf{H}'_0^{n+1} \\ \mathbf{H}'_1^{n+1} \\ \mathbf{H}'_2^{n+1} \\ \mathbf{H}'_3^{n+1} \\ \vdots \\ \mathbf{H}'_{N_z-3}^{n+1} \\ \mathbf{H}'_{N_z-2}^{n+1} \\ \mathbf{H}'_{N_z-1}^{n+1} \\ \mathbf{H}'_{N_z}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{F}'_1^n \\ \mathbf{F}'_2^n \\ \mathbf{F}'_3^n \\ \vdots \\ \mathbf{F}'_{N_z-3}^n \\ \mathbf{F}'_{N_z-2}^n \\ \mathbf{F}'_{N_z-1}^n \\ \mathbf{G}' \end{pmatrix}, \quad (64)$$

com

$$\mathbf{A}'_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ C'_4 & C'_{1,i} & C'_4 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C'_4 & C'_{1,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C'_{1,i} & C'_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C'_4 & C'_{1,i} & C'_4 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}'_k^{n+1} = \begin{pmatrix} T_{0,k}^{n+1} \\ T_{1,k}^{n+1} \\ T_{2,k}^{n+1} \\ \vdots \\ T_{N_r-2,k}^{n+1} \\ T_{N_r-1,k}^{n+1} \\ T_{N_r,k}^{n+1} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}'_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C'_{2,i} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C'_{2,i} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & C'_{2,i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C'_{2,i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}'_k^n = \begin{pmatrix} T_a \\ C'_{5,1,k}^n \\ C'_{5,2,k}^n \\ \vdots \\ C'_{5,N_r-2,k}^n \\ C'_{5,N_r-1,k}^n \\ T_a \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{E}' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C'_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C'_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & C'_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & C'_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}' = \begin{pmatrix} T_a \\ T_a \\ T_a \\ \vdots \\ T_a \\ T_a \\ T_a \end{pmatrix},$$

onde pode-se encontrar a solução do problema transiente da temperatura utilizando a função *LinearSolve* para cada instante de tempo.

## 4 FORMULAÇÃO DOS PROBLEMAS INVERSOS

Conforme mencionado na seção 1.4 a solução do problema inverso pode ser obtida de diferentes formas. Nesse trabalho, serão utilizadas técnicas de solução via métodos bayesianos, conforme descrito nas seções 4.1 e 4.2. Nesse caso, antes de formular o problema inverso é importante realizar a análise de sensibilidade, descrita na seção 4.3. Além disso, pode ser interessante investigar a influência dos parâmetros no comportamento do campo de temperatura obtido com a solução do problema matemático. Para tal propósito, pode-se utilizar o método de Monte Carlo ou simulações diretas de Monte Carlo, descrito na seção 4.4.

### 4.1 Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov (MCMC)

Como mencionado na seção 1.4, um método de solução amplamente utilizado em problemas inversos de transferência de calor é o método MCMC, que pode ser formulado na abordagem bayesiana, onde os parâmetros do problema são modelados como variáveis aleatórias. Nesta abordagem é utilizado como base o teorema de Bayes, dado por (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Orlande, 2012):

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z}) = \frac{\pi(\boldsymbol{\theta})\pi(\mathbf{z}|\boldsymbol{\theta})}{\pi(\mathbf{z})}, \quad (65)$$

onde  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z})$  é a distribuição a posteriori,  $\boldsymbol{\theta}$  representa o vetor de parâmetros do problema,  $\mathbf{z}$  contém as temperaturas medidas experimentalmente,  $\pi(\boldsymbol{\theta})$  é a densidade de probabilidade a priori dos parâmetros,  $\pi(\mathbf{z}|\boldsymbol{\theta})$  é a função de verossimilhança e o denominador  $\pi(\mathbf{z})$  é a densidade de probabilidade marginal das medições que desempenha o papel de uma constante de normalização (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Orlande, 2012).

A função de verossimilhança contém a distribuição das variáveis medidas,  $\mathbf{z}$ , dados os parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$ . Assumindo que os erros de medição são variáveis aleatórias gaussianas independentes, com média zero e desvio padrão conhecido, a função de verossimilhança pode ser expressa como:

$$\pi(\mathbf{z}|\boldsymbol{\theta}) = (2\pi)^{-\frac{D}{2}} |\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{z} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta})] \right\}, \quad (66)$$

sendo  $\mathbf{T}(\boldsymbol{\theta})$  o vetor que contém as temperaturas previstas pelo modelo,  $D$  o número total de medidas experimentais e  $\mathbf{W}$  matriz de covariância dos dados experimentais (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Orlande, 2012).

A função densidade de probabilidade a priori dos parâmetros, denotada por  $\pi(\boldsymbol{\theta})$ , representa a distribuição de probabilidade dos parâmetros do modelo antes de qualquer observação de

dados experimentais. Em termos simples, é uma expressão matemática que reflete as crenças ou conhecimentos prévios sobre os parâmetros do modelo, antes de considerar qualquer evidência observada. Geralmente, essa distribuição é determinada com base no conhecimento especializado, informações históricas, restrições físicas ou qualquer outra informação relevante disponível antes da análise dos dados experimentais. Nesse caso, ela irá depender do tipo de informação à priori disponível. Existem diferentes formas de expressar as médias e desvios-padrão relacionados com os parâmetros, como exemplo pode-se citar as prioris uniforme, gaussiana e gaussiana truncada, dadas, respectivamente, pelas Eqs. (67), (68) e (69) (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b; Orlande, 2012).

$$\pi(\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \frac{1}{\boldsymbol{\theta}_{max} - \boldsymbol{\theta}_{min}}, & \boldsymbol{\theta}_{min} < \boldsymbol{\theta} < \boldsymbol{\theta}_{max} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (67)$$

$$\pi(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{s_{\boldsymbol{\theta}}\sqrt{2\pi}} e^{\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\mu}}{s_{\boldsymbol{\theta}}}\right)^2\right]}, \quad (68)$$

$$\pi(\boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} \frac{1}{s_{\boldsymbol{\theta}}\sqrt{2\pi}} e^{\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\mu}}{s_{\boldsymbol{\theta}}}\right)^2\right]}, & \boldsymbol{\theta}_{min} < \boldsymbol{\theta} < \boldsymbol{\theta}_{max} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (69)$$

sendo  $\boldsymbol{\mu}$  a média,  $s_{\boldsymbol{\theta}}$  o desvio padrão e  $\boldsymbol{\theta}_{min}$  e  $\boldsymbol{\theta}_{max}$ , respectivamente, os vetores com os valores de mínimo e máximo que os parâmetros podem assumir.

O método MCMC possibilita a estimativa da função à posteriori utilizando propriedades das cadeias de Markov em um algoritmo específico. Neste contexto, será considerado o algoritmo de *Metropolis-Hastings*, que pode ser resumido nos seguintes passos (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande et al., 2011b).

1. Inicializar a cadeia com  $\boldsymbol{\theta}^k$ ;
2. Gerar o candidato  $\boldsymbol{\theta}^*$  com distribuição  $q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k)$ ;
3. Avaliar a probabilidade de aceitação calculando:

$$\alpha = \min \left[ 1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^*|\mathbf{z})q(\boldsymbol{\theta}^k|\boldsymbol{\theta}^*)}{\pi(\boldsymbol{\theta}^k|\mathbf{z})q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k)} \right]; \quad (70)$$

4. Gerar um número aleatório  $\beta$  com distribuição uniforme em (0,1);
5. Se  $\beta < \alpha$ , aceitar  $\boldsymbol{\theta}^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}^{k+1} = \boldsymbol{\theta}^*$ . Caso contrário, descartar  $\boldsymbol{\theta}^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}^{k+1} = \boldsymbol{\theta}^k$ ;
6. Voltar para o passo 2 e repetir o processo para gerar a sequência  $[\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \boldsymbol{\theta}^3, \dots, \boldsymbol{\theta}^N]$ .

Para os casos onde  $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}^k + \Psi$ , com  $\Psi$  sendo um vetor de variáveis aleatórias de distribuição  $q_1(\Psi)$  e sendo  $q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k) = q_1(\Psi)$ , se a distribuição proposta for simétrica, isto é  $q_1(\Psi) = q_1(-\Psi)$  ou  $q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k) = q(\boldsymbol{\theta}^k|\boldsymbol{\theta}^*)$ , a Eq. (70) se reduz a (Orlande et al., 2011b).

$$\alpha = \min \left[ 1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^*|\mathbf{z})}{\pi(\boldsymbol{\theta}^k|\mathbf{z})} \right]. \quad (71)$$

Considerando uma distribuição gaussiana para a variável aleatória proposta têm-se:

$$\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}^k + \boldsymbol{\omega}, \quad (72)$$

onde  $\boldsymbol{\omega}$  tem média zero e desvio padrão conhecido. O valor atribuído ao desvio padrão deve ser analisado, pois valores pequenos tendem a levar a maiores taxas de aceitação, porém a uma convergência mais lenta da cadeia, enquanto valores muito grandes tendem a levar a taxas de aceitação muito baixas. Dessa forma, obtêm-se uma sequência  $[\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \boldsymbol{\theta}^3, \dots, \boldsymbol{\theta}^N]$ , onde apenas os estados após a convergência da cadeia devem ser mantidos para as inferências estatísticas da distribuição de probabilidade dos parâmetros (Orlande et al., 2011b).

Além do algoritmo de Metropolis-Hastings descrito anteriormente, há trabalhos na literatura que utilizam o algoritmo MCMC com Metropolis-Hastings em duas etapas, cujo objetivo é, a partir de uma modificação do Metropolis-Hastings clássico, melhorar a convergência em alguns problemas (Gamerman; Lopes, 2006; Cui, 2010; Orlande; Lutaif; Gontijo, 2019). Esse algoritmo é apresentado com mais detalhes na subseção a seguir.

#### 4.1.1 MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas

O método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas divide o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$  em dois grupos de parâmetros ( $\boldsymbol{\theta}_1$  e  $\boldsymbol{\theta}_2$ ). Essa divisão pode ser feita, por exemplo, separando os parâmetros físicos do problema que possuem incertezas no vetor  $\boldsymbol{\theta}_1$  e os parâmetros que variam com o tempo ou as variáveis de projeto que se pretende estimar no vetor  $\boldsymbol{\theta}_2$ . Essa divisão permite que a avaliação da probabilidade de aceitação dos grupos de parâmetros seja feita separadamente. O método MCMC com algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas pode ser resumido nos seguintes passos (Gamerman; Lopes, 2006; Cui, 2010; Orlande; Lutaif; Gontijo, 2019).

1. Inicializar a cadeia com  $\boldsymbol{\theta}^k$ ;
2. Gerar o candidato  $\boldsymbol{\theta}_1^*$  com distribuição  $q_1(\boldsymbol{\theta}_1^*|\boldsymbol{\theta}_1^k)$  para o vetor  $\boldsymbol{\theta}_1$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_2^* = \boldsymbol{\theta}_2^k$ ;
3. Avaliar a probabilidade de aceitação do primeiro grupo de parâmetros calculando:

$$\alpha_1(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k) = \min \left[ 1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^*|\mathbf{z})q_1(\boldsymbol{\theta}_1^k|\boldsymbol{\theta}_1^*)}{\pi(\boldsymbol{\theta}^k|\mathbf{z})q_1(\boldsymbol{\theta}_1^*|\boldsymbol{\theta}_1^k)} \right]; \quad (73)$$

4. Gerar um número aleatório  $\beta_1$  com distribuição uniforme em  $(0,1)$ ;
5. Se  $\beta_1 < \alpha_1(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k)$ , aceitar  $\boldsymbol{\theta}_1^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_1^{k+1} = \boldsymbol{\theta}_1^*$ . Caso contrário, descartar  $\boldsymbol{\theta}_1^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_1^{k+1} = \boldsymbol{\theta}_1^k$ ;
6. Gerar o candidato  $\boldsymbol{\theta}_2^*$  com distribuição  $q_2(\boldsymbol{\theta}_2^*|\boldsymbol{\theta}_2^k)$  para o vetor  $\boldsymbol{\theta}_2$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_1^* = \boldsymbol{\theta}_1^{k+1}$ ;
7. Avaliar a probabilidade de aceitação do segundo grupo de parâmetros calculando:

$$\alpha_2(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k) = \min \left[ 1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^*|\mathbf{z})q_2(\boldsymbol{\theta}_2^*|\boldsymbol{\theta}_2^k)}{\pi(\boldsymbol{\theta}^k|\mathbf{z})q_2(\boldsymbol{\theta}_2^*|\boldsymbol{\theta}_2^k)} \right]; \quad (74)$$

8. Gerar um número aleatório  $\beta_2$  com distribuição uniforme em  $(0,1)$ ;
9. Se  $\beta_2 < \alpha_2(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^k)$ , aceitar  $\boldsymbol{\theta}_2^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_2^{k+1} = \boldsymbol{\theta}_2^*$ . Caso contrário, descartar  $\boldsymbol{\theta}_2^*$  e fazer  $\boldsymbol{\theta}_2^{k+1} = \boldsymbol{\theta}_2^k$ ;
10. Fazer  $k = k + 1$ , voltar para o passo 2 e repetir o processo para gerar a sequência  $[\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \boldsymbol{\theta}^3, \dots, \boldsymbol{\theta}^N]$ .

#### 4.2 Problema de estimativa de estado

Conforme mencionado na seção 1.4 os problemas de estimativa de estado foram desenvolvidos a fim de produzir sequencialmente estimativas de variáveis dinâmicas desejadas. Para produzir essas estimativas são utilizados dados de medidas experimentais em conjunto com as informações disponíveis a priori sobre os fenômenos físicos, parâmetros geométricos e dispositivos de medição (Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande, 2012; Özisik; Orlande, 2021). Esses problemas podem ser escritos na forma de modelos de evolução e observação, que são modelados como processos estocásticos. O modelo de evolução de estado descreve a evolução das variáveis de estado de um sistema ao longo do tempo, geralmente em resposta a forças, entradas ou outras influências externas. Esta representação matemática das dinâmicas do sistema é usada para prever o estado futuro com base no estado atual e nas entradas conhecidas. Por outro lado, o modelo de observação está relacionado às medidas experimentais disponíveis que podem ser usadas para inferir o estado do sistema. Este modelo descreve a relação entre o estado do sistema e as observações que podem ser feitas dele, incluindo como as variáveis de estado estão relacionadas às medidas observáveis e como as incertezas e erros de medição afetam essas observações. Ou seja, enquanto o modelo de evolução de estado descreve a dinâmica interna do sistema ao longo do tempo, o modelo de observação descreve como é possível observar o sistema e como essas observações estão relacionadas ao estado real do sistema. Os modelos de evolução e observação podem ser escritos, respectivamente, das seguintes maneiras (Kalman, 1960; Doucet et al., 2001; Liu; West, 2001; Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam;

Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017; Nunes; Orlande; Nowak, 2019):

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{v}_{k-1}), \quad k = 1, \dots, M \quad (75)$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{n}_k), \quad k = 1, \dots, M \quad (76)$$

onde  $\mathbf{x}_k$  é o vetor de estado no instante de tempo  $t_k$ ,  $\mathbf{z}_k$  é o vetor de observação no instante de tempo  $t_k$ ,  $\mathbf{h}()$  é uma função que descreve a evolução do estado,  $\mathbf{g}()$  é uma função que relaciona o estado do sistema com as observações, e  $\mathbf{v}_k$  e  $\mathbf{n}_k$  representam os ruídos no modelo de evolução de estado e no modelo de observação, respectivamente (Kalman, 1960; Doucet et al., 2001; Liu; West, 2001; Arulampalam et al., 2002; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017; Nunes; Orlande; Nowak, 2019). Assim, o objetivo do problema de estimativa de estado é, com base nos modelos de evolução e observação definidos pelas Eqs. (75) e (76), obter informações sobre o vetor de estado  $\mathbf{x}_k$ . Para que os processos estocásticos  $\mathbf{x}_k$  e  $\mathbf{z}_k$  possam ser chamados de modelo de evolução-observação eles devem satisfazer as seguintes hipóteses (Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a; Silva, 2012; Varon, 2015):

1. A sequencia de vetores  $\mathbf{x}_k$  para  $k = 1, 2, 3, \dots, M$  é um processo de Markov, ou seja,

$$\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}); \quad (77)$$

2. A sequencia de vetores  $\mathbf{z}_k$  para  $k = 1, 2, 3, \dots, M$  é um processo de Markov em relação à história de  $\mathbf{x}_k$ , ou seja,

$$\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k) = \pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k); \quad (78)$$

3. A sequência de vetores  $\mathbf{x}_k$  depende das observações passadas apenas através de sua própria história, ou seja,

$$\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{z}_0, \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_{k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}). \quad (79)$$

Naturalmente, para que o modelo de evolução-observação seja completamente definido, precisa-se especificar (Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Silva, 2012; Varon, 2015):

1. A densidade de probabilidade do estado inicial  $\mathbf{x}_0$ ;

2. Os núcleos de transição de Markov  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1})$  para  $k = 1, 2, 3, \dots, M$ ;
3. As funções de verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k)$  para  $k = 1, 2, 3, \dots, M$ .

Além disso, para que os processos  $\mathbf{x}_k$  e  $\mathbf{z}_k$  sejam um modelo de evolução-observação, é necessário fazer as seguintes suposições sobre os ruídos do modelo de evolução de estado e de observação (Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Silva, 2012; Varon, 2015):

1. Para  $k \neq l$ , os vetores de ruído  $\mathbf{v}_k$  e  $\mathbf{v}_l$  são mutuamente independentes e também mutuamente independentes do estado inicial  $\mathbf{x}_0$ ;
2. Para  $k \neq l$ , os vetores de ruído  $\mathbf{n}_k$  e  $\mathbf{n}_l$  são mutuamente independentes e também mutuamente independentes do estado inicial  $\mathbf{x}_0$ ;
3. Os vetores de ruído  $\mathbf{v}_k$  e  $\mathbf{n}_l$  são mutuamente independentes para todo  $k, l$ .

Diferentes problemas podem ser considerados com os modelos de evolução-observação (Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Silva, 2012; Varon, 2015), por exemplo,

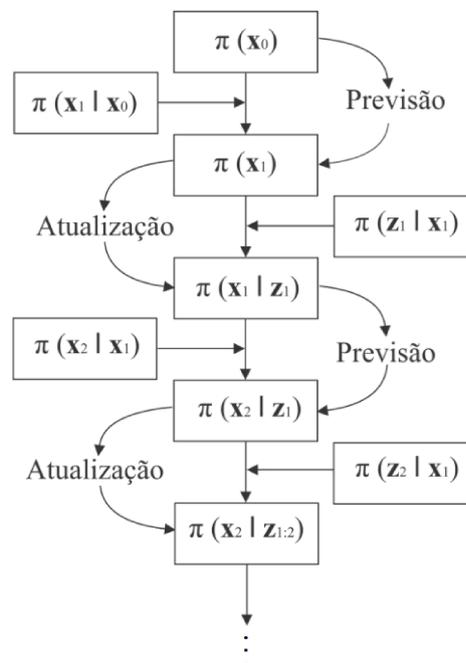
1. O problema de previsão (*prediction problem*), cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k-1})$ ;
2. O problema de filtragem (*filtering problem*), cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k})$ ;
3. O problema de suavização com retardo fixo (*fixed-lag domain smoothing problem*), cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k+p})$ , onde  $p \geq 1$  é o retardo fixo;
4. O problema de suavização de domínio completo (*whole-domain smoothing problem*), cujo objetivo é estimar  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:K})$ , onde  $\mathbf{z}_{1:K} = \{\mathbf{z}_i, i = 1, 2, 3, \dots, K\}$  é a sequência completa das medidas.

Os problemas listados servem para diferentes propósitos. O problema de previsão pode ser útil quando decisões futuras precisam ser tomadas com base no conhecimento atual. Em problemas em que a informação em tempo real do estado  $\mathbf{x}_k$  é essencial, a abordagem de filtragem é importante. Caso haja a possibilidade de realizar uma série mais longa de observações antes de estimar o estado  $\mathbf{x}_k$ , as abordagens de suavização podem ser mais interessantes, pois produzem erros de estimativa menores do que a filtragem. Ademais, em muitos casos o problema de previsão é utilizado apenas como uma etapa intermediária para a etapa de filtragem (Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Silva, 2012; Varon, 2015).

Nesse caso, será considerado na solução o problema de filtragem, onde se assume uma densidade de probabilidade  $\pi(\mathbf{x}_0 | \mathbf{z}_0) = \pi(\mathbf{x}_0)$  conhecida a priori no instante inicial  $t_0$ , de forma

que a distribuição a posteriori  $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$  passa a ser o objetivo do problema que pode ser resolvido por meio de filtros bayesianos em duas etapas, previsão e atualização, conforme ilustrado na Figura 6 (Kalman, 1960; Doucet et al., 2001; Liu; West, 2001; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a; Silva, 2012; Varon, 2015). Com isso, na etapa de previsão são utilizadas as informações do vetor de estado no tempo anterior ( $\mathbf{x}_{k-1}$ ) para prever os valores do vetor no tempo atual ( $\mathbf{x}_k$ ). Na etapa de atualização, após definir  $\mathbf{x}_k$ , é obtida a distribuição a posteriori  $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$  a partir da verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k)$ . Existem vários tipos de filtros bayesianos, sendo os principais o Filtro de Kalman e os Filtros de Partículas, descritos nas seções seguintes.

Figura 6 - Etapas de previsão e atualização para os filtros bayesianos.



Legenda: Inicialmente assume-se uma densidade de probabilidade  $\pi(\mathbf{x}_0|\mathbf{z}_0) = \pi(\mathbf{x}_0)$  conhecida a priori no instante inicial  $t_0$ , em seguida faz-se a etapa de previsão, utilizando as informações do vetor de estado no tempo anterior ( $\mathbf{x}_0$ ) para prever os valores do vetor no tempo atual ( $\mathbf{x}_1$ ) e, por fim, faz-se a etapa de atualização, onde após definir  $\pi(\mathbf{x}_1)$ , é obtida a distribuição a posteriori  $\pi(\mathbf{x}_1|\mathbf{z}_{1:1})$  a partir da verossimilhança  $\pi(\mathbf{z}_1|\mathbf{x}_1)$ . O processo se repete até o tempo final ( $t_k$ ).

Fonte: Adaptado de Kaipio e Somersalo (2006).

#### 4.2.1 Filtro de Kalman

O filtro de Kalman é um método de estimativa empregado para deduzir o estado de um sistema dinâmico com base em uma série de observações, sujeitas a ruídos e incertezas,

comumente utilizado em modelos gaussianos e problemas lineares (Kalman, 1960; Doucet et al., 2001; Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a). Mesmo em situações onde o problema não é intrinsecamente linear, o filtro de Kalman pode ser aplicado caso exista uma técnica que permita a sua linearização. Nesse contexto, assume-se que os modelos de evolução e observação, expressos pelas equações (75) e (76), são lineares. Adicionalmente, presume-se que os ruídos  $\mathbf{v}_k$  e  $\mathbf{n}_k$  são aditivos, gaussianos, possuindo médias e covariâncias conhecidas. Consequentemente, a distribuição a posteriori  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_1 : k)$  em  $t_k$  para  $k = 1, 2, 3, \dots$  apresenta uma distribuição gaussiana, permitindo que o filtro de Kalman resulte na solução ótima, isto é, a distribuição a posteriori é calculada de forma exata. Com as suposições mencionadas, os modelos de evolução e observação podem ser expressos, respectivamente, como (Kalman, 1960; Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a):

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{F}_k \mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{s}_k + \mathbf{v}_{k-1}, \quad (80)$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k + \mathbf{n}_k, \quad (81)$$

onde  $\mathbf{s}_k$  é um vetor de controle,  $\mathbf{F}_k$  é a matriz de transição de estado e  $\mathbf{H}_k$  é a matriz de observação.

Essas equações são fundamentais para a implementação do filtro de Kalman que opera em duas etapas principais: previsão e atualização. Durante a etapa de previsão, utilizando o modelo de evolução de estado, ele projeta o estado futuro do sistema para o próximo instante de tempo. Essa projeção é realizada aplicando o modelo de evolução de estado ao estado atual do sistema e às entradas conhecidas. Além disso, durante essa etapa, são estimadas as incertezas associadas à previsão do estado, levando em conta o ruído do processo. Já na etapa de atualização, após receber uma nova medida observada, o filtro de Kalman revisa sua estimativa do estado do sistema. Isso é feito combinando a previsão do estado com a medida observada, ponderando-as de acordo com suas respectivas incertezas. Quanto mais confiável for a medida observada (ou seja, menor for sua incerteza), maior será sua influência na atualização do estado estimado. O resultado final é uma estimativa otimizada do estado do sistema, que leva em consideração tanto o modelo dinâmico quanto as medidas observadas. Com isso, as etapas de previsão e atualização podem ser descritas matematicamente por (Kalman, 1960; Arulampalam et al., 2002; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a):

#### **Etapa de previsão:**

1. Previsão do estado:

$$\mathbf{x}_k^- = \mathbf{F}_k \hat{\mathbf{x}}_{k-1} + \mathbf{s}_k; \quad (82)$$

2. Previsão da covariância do erro de estado:

$$\mathbf{P}_k^- = \mathbf{F}_k \mathbf{P}_{k-1} \mathbf{F}_k^T + \mathbf{Q}_k. \quad (83)$$

### Etapa de atualização:

1. Cálculo do ganho de Kalman:

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T (\mathbf{H}_k \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k)^{-1}; \quad (84)$$

2. Atualização do estado estimado:

$$\hat{\mathbf{x}}_k = \mathbf{x}_k^- + \mathbf{K}_k (\mathbf{z}_k - \mathbf{H}_k \mathbf{x}_k^-); \quad (85)$$

3. Atualização da covariância do erro de estado:

$$\mathbf{P}_k = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \mathbf{H}_k) \mathbf{P}_k^-. \quad (86)$$

sendo  $\mathbf{x}_k^-$  a estimativa a priori do estado no instante  $t_k$  antes de receber a nova observação,  $\mathbf{P}_k^-$  a covariância a priori do erro de estado no instante  $t_k$ ,  $\mathbf{Q}_k$  a matriz de covariância do ruído do processo,  $\mathbf{K}_k$  o ganho de Kalman,  $\mathbf{R}_k$  a matriz de covariância do ruído da observação, e  $\mathbf{I}$  a matriz identidade.

Para casos onde as hipóteses dos modelos lineares de observação e da evolução gaussiana são inválidas, o uso do filtro de Kalman não resulta em soluções ótimas porque a distribuição a posteriori não é analítica. Nesse caso, é possível fazer uso do filtro de Kalman estendido e suas variações, que geralmente envolvem uma linearização do problema (Arulampalam et al., 2002; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a). Outra opção é utilizar filtros de partículas, uma abordagem mais geral e robusta para distribuições não lineares e/ou não gaussianas (Arulampalam et al., 2002; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a). Na próxima seção encontram-se descritos os filtros de partículas para simular as distribuições por amostras aleatórias.

#### 4.2.2 Filtros de Partículas

O método do filtro de partículas é uma técnica de Monte Carlo empregada na resolução de problemas de estimativa de estado. Neste método, a função densidade de probabilidade a posteriori é representada por um conjunto de amostras aleatórias, conhecidas como partículas, cada uma com um peso associado. Os filtros de partículas iniciam com uma distribuição inicial  $\mathbf{x}_0$  e buscam calcular a melhor estimativa para o estado atual  $\mathbf{x}_k$ , com base na sequência de me-

didadas  $\mathbf{z}_k$  (Doucet et al., 2001; Liu; West, 2001; Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017; Nunes; Orlande; Nowak, 2019). Existem diversas variações dos filtros de partículas, diferenciando-se principalmente no cálculo dos pesos. No entanto, todas essas variações utilizam a função de verossimilhança em sua formulação e na seleção das partículas, como será abordado nas próximas subseções.

#### 4.2.2.1 Filtro Amostragem por Importância Sequencial (SIS)

Os filtros de partículas são construídos com base no filtro SIS. A ideia principal por trás do algoritmo SIS é representar a função densidade de probabilidade a posteriori por meio de um conjunto de amostras aleatórias, cada uma associada a um peso correspondente. Assim, considera-se que  $\{\mathbf{x}_k^i, \mathbf{w}_k^i\}_{i=0}^N$  seja uma amostra aleatória que representa  $\pi(\mathbf{x}_k, \mathbf{z}_k)$ , onde  $N$  é o número de partículas,  $\{\mathbf{x}_k^i, i = 0, 1, 2, \dots, N\}$  são as partículas com pesos associados  $\{\mathbf{w}_k^i, i = 0, 1, 2, \dots, N\}$ , e  $\mathbf{x}_{0:k} = \{\mathbf{x}_j, j = 0, 1, 2, \dots, k\}$  é o conjunto de todos os estados até o instante  $t_k$ . Em seguida, os pesos são normalizados, garantindo que  $\sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i = 1$ , de modo que a distribuição a posteriori no instante  $t_k$  pode ser aproximada por (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011a; Silva, 2012; Varon, 2015):

$$\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_k) \approx \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i \delta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^i), \quad (87)$$

onde  $\delta(\cdot)$  é a função delta de Dirac. Considerando, para o cálculo dos pesos, que as partículas  $\mathbf{x}_k^i$  foram obtidas de uma densidade de importância  $q(\cdot)$  e que, a partir do teorema de Bayes, a atualização dos pesos será dada por (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Silva, 2012; Varon, 2015):

$$\mathbf{w}_k^i = \mathbf{w}_{k-1}^i \frac{\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i) \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)}{q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k)}, \quad (88)$$

onde a escolha ótima para a densidade de importância, que minimiza a variância dos pesos por importância e limita a degeneração das partículas, é dada por  $q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k) = \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k)$ . Porém, para grande parte dos casos de interesse prático, esta escolha ótima é analiticamente complicada. Então, a escolha mais utilizada para a densidade de importância é tratá-la como sendo uma distribuição a priori, ou seja,  $q(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i, \mathbf{z}_k) = \pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ . Dessa forma a Eq. (88) se reduz à (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Silva, 2012; Varon, 2015):

$$\mathbf{w}_k^i = \mathbf{w}_{k-1}^i \pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i). \quad (89)$$

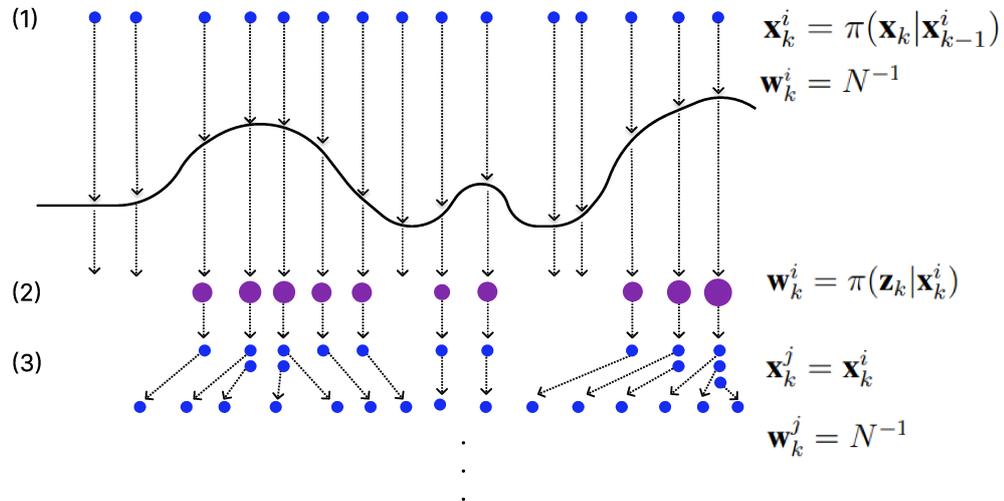
Aplicar sequencialmente o filtro SIS pode resultar no fenômeno da degeneração, onde após alguns estados a maioria das partículas tem peso desprezível (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006). Esse fato incide em um grande esforço computacional para atualizar partículas das quais a contribuição para a aproximação da função de densidade à posteriori é quase zero. Para superar esse problema, pode-se aumentar o número de partículas ou acrescentar uma etapa de reamostragem (Kalman, 1960; Doucet et al., 2001; Liu; West, 2001; Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017; Nunes; Orlande; Nowak, 2019). A reamostragem pode ser realizada com o algoritmo SIR, descrito na subseção seguinte.

#### 4.2.2.2 Filtro Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR)

O filtro SIR faz a eliminação das partículas de baixo peso e replica partículas com pesos maiores ou de maior importância. Assim, a reamostragem envolve um mapeamento de  $\{\mathbf{x}_k^i, \mathbf{w}_k^i\}$  em  $\{\mathbf{x}_k^{i*}, N^{-1}\}$  com pesos uniformes. A Figura 7 apresenta o processo de seleção das partículas através da reamostragem, onde em (1) estão as  $N$  partículas com peso uniforme no instante  $t = t_k$ , em (2) estão os pesos das partículas atualizados após as medições, em (3) ocorre a etapa de reamostragem e obtêm-se as partículas com pesos uniformes que serão utilizadas posteriormente no instante  $t = t_{k+1}$ . O processo se repete até que  $t = t_{k_{final}}$  (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Orlande; Dulikravich; Colaço, 2008; Orlande et al., 2011; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017; Nunes; Orlande; Nowak, 2019).

O algoritmo SIR é descrito detalhadamente na Tabela 1. O processo se inicia gerando um conjunto de partículas a partir do modelo de evolução ou de uma distribuição inicial. Na sequência é feito o cálculo dos pesos associados a cada partícula e suas normalizações, considerando que neste instante têm-se medidas experimentais disponíveis  $\mathbf{z}_k$ . A função de verossimilhança, usada para o cálculo dos pesos, varia de acordo com as informações à priori utilizadas. Considerando que as medidas experimentais possuem distribuição gaussiana, a função de verossimilhança é dada pela Eq. (90) onde  $\mathbf{I}$  é o número de medições em cada instante  $t_k$  e  $\mathbf{R}$  a matriz de covariância (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Kaipio; Somersalo, 2006; Varon, 2015; Nunes; Orlande; Nowak, 2019). No passo seguinte, é realizada a reamostragem das partículas. Como as partículas de maior peso representam as regiões de maior importância da distribuição, elas são escolhidas para serem repetidas uma ou mais vezes dependendo do valor do peso, e aquelas com pesos desprezíveis são eliminadas. Além disso, são dados pesos uniformes  $\frac{1}{N}$  para cada partícula selecionada. Finalmente, é feito o cálculo da média e do desvio padrão. A média encontrada será então a solução para a variável de estado naquele passo de tempo. Esses passos se repetem enquanto  $t_k$  for menor ou igual ao  $t_{final}$  (Silva, 2012; Varon, 2015).

Figura 7 - Processo de seleção das partículas com o filtro SIR.



Fonte: Adaptado de [Arulampalam et al. \(2002\)](#).

$$\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k) = (2\pi)^{-I/2} |\mathbf{R}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{z}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_k)]^T \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{z}_k - \mathbf{g}_k(\mathbf{x}_k)] \right\}. \quad (90)$$

Como mencionado anteriormente, o filtro SIR reduz os efeitos da degeneração, pois elimina as partículas com pesos muito pequenos, porém, em contrapartida, as amostras com pesos maiores são selecionadas muitas vezes, o que pode levar a uma amostra final com uma grande quantidade de partículas repedidas. Essa repetição pode provocar um empobrecimento da amostra bastante significativo nos processos onde o modelo de evolução de estado apresenta baixo nível de ruído ([Arulampalam et al., 2002](#); [Ristic](#); [Arulampalam](#); [Gordon, 2003](#); [Silva, 2012](#); [Varon, 2015](#); [Lamien et al., 2017](#)). Para reduzir o empobrecimento da amostra pode ser utilizado o filtro ASIR descrito na subseção seguinte.

Tabela 1 - Passos do algoritmo SIR.

---

<b>Passo 1 - Inicialização:</b>
Faça $k=1$ ;
Para $i = 1, \dots, N$ , onde $N$ é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k   \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .
<b>Passo 2 - Avaliação dos pesos:</b>
Calcule os pesos $\mathbf{w}_k^i = \pi(\mathbf{z}_k   \mathbf{x}_k^i)$ ;
Calcule o peso total $T_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i$ ;
Normalize os pesos $\widehat{\mathbf{w}}_k^i = \frac{\mathbf{w}_k^i}{T_w}$ .
<b>Passo 3 - Reamostragem ou Seleção:</b>
Construa a soma dos pesos acumulativos $c_i = c_{i-1} + \widehat{\mathbf{w}}_k^i$ com $c_0 = 0$ ;
Tome $i = 1$ e gere $u_1$ de uma distribuição uniforme $U[0, N^{-1}]$ ;
Para $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:
Calcule $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;
Enquanto $u_j > c_i$ , faça $i = i + 1$ ;
Designe as partículas $\mathbf{x}_k^j = \mathbf{x}_k^i$ ;
Designe os pesos para $\mathbf{w}_k^j = N^{-1}$ .
<b>Passo 4 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:</b>
$\bar{x}_k = \sum_{i=0}^N \mathbf{x}_k^i \widehat{\mathbf{w}}_k^i; \quad s_k = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=0}^N \widehat{\mathbf{w}}_k^i (\mathbf{x}_k^i - \bar{x}_k)^2}.$
<b>Passo 5 - Evolução do Modelo:</b>
Faça $k = k + 1$ ;
Se $k > k_{final} + 1$ , então pare;
Se não, faça $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k   \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .
<b>Passo 6 - Retorne para o Passo 2.</b>

---

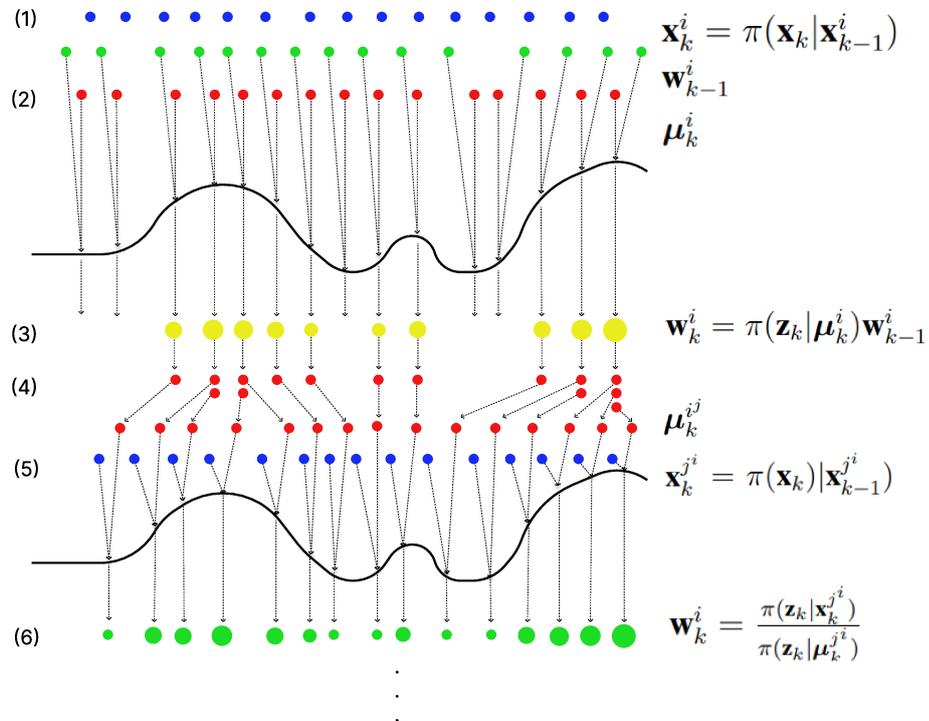
Fonte: Adaptado de [Arulampalam et al. \(2002\)](#).

#### 4.2.2.3 Filtro Auxiliar de Partícula ou Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR)

No algoritmo ASIR uma etapa de reamostragem é realizada no tempo  $t_{k-1}$  com as medidas disponíveis no tempo  $t_k$ . Com isso, aumenta-se o custo computacional, porém ao usar as informações de um passo a frente para refazer a reamostragem, espera-se que menos partículas sejam necessárias para se obter resultados tão bons ou melhores do que os obtidos com o algoritmo SIR. Assim, gera-se um novo conjunto de partículas,  $\boldsymbol{\mu}_k^i$ , baseada em alguma estimativa pontual que caracteriza  $\pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ , onde  $\boldsymbol{\mu}_k^i$  é alguma estatística de  $\mathbf{x}_k$  dada por  $\mathbf{x}_{k-1}^i$ . Essa descrição pode ser, por exemplo, a média ou uma amostra  $\pi(\mathbf{x}_k^i | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .

Na Figura 8 encontra-se o processo de seleção das partículas utilizado com o filtro ASIR, onde em (1) estão as  $N$  partículas  $\mathbf{x}_k^i$ , em (2) encontra-se o novo conjunto de partículas  $\mu_k^i$  e os pesos obtidos no instante anterior, em (3) estão os pesos das partículas calculados levando em consideração as medições, o novo conjunto de partículas e os pesos do tempo anterior, em (4) ocorre a etapa de reamostragem, em (5) estão as partículas que serão utilizadas para o cálculo dos novos pesos e em (6) obtêm-se os novos pesos que serão utilizados no tempo seguinte. O processo se repete até que  $t = t_{k_{final}}$ . O algoritmo ASIR é descrito detalhadamente da Tabela 2 (Arulampalam et al., 2002; Ristic; Arulampalam; Gordon, 2003; Silva, 2012; Varon, 2015; Lamien et al., 2017).

Figura 8 - Processo de seleção das partículas com o filtro ASIR.



Fonte: Adaptado de Arulampalam et al. (2002).

Os filtros SIR e ASIR baseiam-se em valores determinísticos dos parâmetros do modelo, ou seja, teoricamente, eles não permitem estimar parâmetros ou considerar incertezas associadas. Mas caso seja necessário incluir incertezas, uma possibilidade é aplicar os filtros SIR e ASIR colocando os parâmetros como variáveis de estado com um modelo de evolução, por exemplo, considerando uma incerteza associada, ou seja (Lamien et al., 2017):

$$\theta_k = \theta_{k-1} + e_k, \quad (91)$$

onde  $e_k$  é um vetor de incertezas com média zero e desvio padrão constante. O subscrito  $k$  denota que os parâmetros serão estimados sequencialmente junto com as variáveis de estado,

mas isso não significa que os parâmetros sejam dependentes do tempo (Varon, 2015; Lamien et al., 2017). Nesse caso, a distribuição a priori das Tabelas 1 e 2 será dada por  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^i, \boldsymbol{\theta}_k)$ .

Tabela 2 - Passos do algoritmo ASIR.

---

**Passo 1 - Inicialização:**

Faça  $k = 1$ ;  
 Para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial  $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .

---

**Passo 2 - Cálculo da amostra para a Variável Auxiliar:**

Calcule alguma caracterização  $\boldsymbol{\mu}_k^i$  de  $\mathbf{x}_k$  dado  $\mathbf{x}_{k-1}^i$ .

---

**Passo 3 - Avaliação dos pesos:**

Calcule os pesos  $\mathbf{w}_k^i = \pi(\mathbf{z}_k | \boldsymbol{\mu}_k^i) \mathbf{w}_{k-1}^i$ ;  
 Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i$ ;  
 Normalize os pesos  $\widehat{\mathbf{w}}_k^i = \frac{\mathbf{w}_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 4 - Reamostragem ou Seleção:**

Construa a soma dos pesos acumulativos  $c_i = c_{i-1} + \widehat{\mathbf{w}}_k^i$  com  $c_0 = 0$ ;  
 Tome  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;  
 Para  $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:  
     Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;  
     Enquanto  $u_j > c_i$ , faça  $i = i + 1$ ;  
     Designe as partículas  $\boldsymbol{\mu}_k^{ij} = \mathbf{x}_k^i$  e os índices  $i^j = i$ ;

---

**Passo 5 - Amostragem:**

Para  $j = 1, \dots, N$  gere partículas  $\mathbf{x}_k^{j^i}$  da distribuição a priori  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^{j^i})$ , usando o índice  $j^i$ , e então, com a função de verossimilhança, calcule os novos pesos  $\mathbf{w}_k^i = \frac{\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^{j^i})}{\pi(\mathbf{z}_k | \boldsymbol{\mu}_k^{j^i})}$ .

---

**Passo 6 - Avaliação dos pesos:**

Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i$ ;  
 Normalize os pesos  $\widehat{\mathbf{w}}_k^i = \frac{\mathbf{w}_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 7 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:**

$$\bar{x}_k = \sum_{i=0}^N \mathbf{x}_k^i \widehat{\mathbf{w}}_k^i; \quad s_k = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=0}^N \widehat{\mathbf{w}}_k^i (\mathbf{x}_k^i - \bar{x}_k)^2}.$$


---

**Passo 8 - Evolução do Modelo:**

Faça  $k = k + 1$ ;  
 Se  $k > k_{final} + 1$ , então pare;  
 Se não, faça  $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .

---

**Passo 9 - Retorne para o Passo 2.**

---

Fonte: Adaptado de Arulampalam et al. (2002).

Por outro lado, a simulação de parâmetros como variáveis de estado pode degenerar

rapidamente as partículas (Varon, 2015; Lamien et al., 2017). Então, outra possibilidade é estimar os parâmetros do modelo com o algoritmo de Liu & West, que se baseia na versão ASIR do filtro de partículas (Liu; West, 2001; Varon, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017). Na subseção seguinte estão descritos os passos desse algoritmo.

#### 4.2.2.4 Filtro de Liu & West

O filtro de Liu e West (2001) foi desenvolvido com uma abordagem que permite a suavização e a regeneração da amostra do modelo dos parâmetros sem a perda de informação. Esse filtro foi desenvolvido com o objetivo de realizar a estimativa combinada de parâmetros e variáveis de estado. No algoritmo de Liu & West as partículas são geradas levando em consideração incertezas associadas aos parâmetros contabilizadas por meio de uma mistura de distribuições normais. Esses artifícios desenvolvidos por Liu e West (2001) procuram controlar a evolução das partículas e, com isso, evitar a degeneração (Liu; West, 2001; Varon, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017). Assim, baseada na hipótese de uma distribuição gaussiana para o vetor de parâmetros  $\theta$ , têm-se

$$\pi(\theta|\mathbf{z}_{1:k-1}) \approx \sum_{i=1}^N \omega_{k-1}^i N(\theta|\mathbf{m}_{k-1}^i, \zeta^2 \mathbf{V}_{k-1}), \quad (92)$$

onde  $N(\cdot|\mathbf{m}_{k-1}^i, \zeta^2 \mathbf{V}_{k-1})$  é uma densidade gaussiana sendo  $\zeta$  um parâmetro de suavização,  $\mathbf{V}_{k-1}$  a matriz de covariância com as incertezas dos parâmetros e  $\mathbf{m}_{k-1}^i$  a média calculada a partir de uma modificação dos parâmetros determinada pelas partículas dos parâmetros  $\theta$  e sua média  $\bar{\theta}_{k-1}$ , isto é (Liu; West, 2001; Varon, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017):

$$\mathbf{m}_{k-1}^i = a\theta_{k-1}^i + (1-a)\bar{\theta}_{k-1}, \quad (93)$$

onde  $a$  é o fator de redução, definido por (Liu; West, 2001; Varon, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017),

$$a = \frac{3\delta - 1}{2\delta}, \quad (94)$$

com  $0.95 < \delta < 0.99$ . O fator de suavização  $\zeta$  depende também do fator de redução  $a$ , de forma que, (Liu; West, 2001; Varon, 2015; Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien; Orlande; Eliçabe, 2017).

$$\zeta = \sqrt{1 - a^2}. \quad (95)$$

Os passos para implementação do algoritmo de Liu & West encontram-se na Tabela 3.

Tabela 3 - Passos do algoritmo de Liu & West.

---

**Passo 1 - Inicialização:**

Faça  $\delta \in [0, 95; 0, 99]$  e calcule  $a$  com a Eq.(94) e  $\zeta$  com a Eq. (95);  
 Faça  $k = 1$ , para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial  $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .

---

**Passo 2 - Cálculo da amostra para a Variável Auxiliar e das médias:**

Encontre a média  $\bar{\theta}_{k-1}$  dos parâmetros  $\theta$  no tempo  $t_{k-1}$ ;  
 Calcule  $\mathbf{m}_{k-1}^i$  com a Eq. (93);  
 Calcule alguma caracterização  $\mu_k^i$  de  $\mathbf{x}_k$  dado  $\mathbf{x}_{k-1}^i$ .

---

**Passo 3 - Avaliação dos pesos:**

Calcule os pesos  $\mathbf{w}_k^i = \pi(\mathbf{z}_k | \mu_k^i, \mathbf{m}_{k-1}^i) \mathbf{w}_{k-1}^i$ ;  
 Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i$ ;  
 Normalize os pesos  $\hat{\mathbf{w}}_k^i = \frac{\mathbf{w}_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 4 - Reamostragem ou Seleção:**

Construa a soma dos pesos acumulativos  $c_i = c_{i-1} + \hat{\mathbf{w}}_k^i$  com  $c_0 = 0$ ;  
 Tome  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;  
 Para  $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:  
     Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;  
     Enquanto  $u_j > c_i$ , faça  $i = i + 1$ ;  
     Designe as partículas  $\mu_k^{ij} = \mathbf{x}_k^i$  e os índices  $i^j = i$ ;

---

**Passo 5 - Amostragem:**

Para  $j = 1, \dots, N$  gere  $\theta_k^j$  a partir da Eq. (92), gere as partículas  $\mathbf{x}_k^j$  da distribuição a priori  $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^{j^i}, \theta_k^i)$ , usando o índice  $j^i$ , e então, com a função de verossimilhança, calcule os novos pesos:  $\mathbf{w}_k^i = \frac{\pi(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i, \theta_k^i)}{\pi(\mathbf{z}_k | \mu_k^i, \mathbf{m}_{k-1}^i)}$ .

---

**Passo 6 - Avaliação dos pesos:**

Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_k^i$ ;  
 Normalize os pesos  $\hat{\mathbf{w}}_k^i = \frac{\mathbf{w}_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 7 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:**

$\bar{x}_k = \sum_{i=0}^N \mathbf{x}_k^i \hat{\mathbf{w}}_k^i$      $s_k = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=0}^N \hat{\mathbf{w}}_k^i (\mathbf{x}_k^i - \bar{x}_k)^2}$ .

---

**Passo 8 - Evolução do Modelo:**

Faça  $k = k + 1$ . Se  $k > k_{final} + 1$ , então pare;  
 Se não, faça  $\mathbf{x}_k^i = \pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{x}_{k-1}^i)$ .

---

**Passo 9 - Retorne para o Passo 2.**

---

Fonte: Adaptado de Liu e West (2001).

### 4.3 Análise de sensibilidade

No contexto dos problemas inversos, a análise de sensibilidade desempenha um papel crucial ao examinar como as variações nos parâmetros de entrada impactam os resultados do modelo. Essencialmente, ela quantifica a influência de cada parâmetro de entrada na estimativa dos parâmetros desconhecidos ou na previsão dos resultados do modelo. Ao fazer isso, é possível identificar relações lineares e correlações entre os parâmetros do problema, que podem complicar ou até mesmo impedir a resolução adequada. A análise de sensibilidade é essencial para determinar quais parâmetros têm maior influência nos resultados do modelo e quais têm uma contribuição menor. Isso permite direcionar os esforços para obter medições mais precisas ou reduzir a incerteza associada aos parâmetros menos sensíveis. Adicionalmente, ao oferecer informações sobre a robustez do modelo e suas limitações, a análise de sensibilidade é valiosa para aprimorar a qualidade das estimativas ou previsões resultantes do problema inverso.

Uma maneira de realizar análise de sensibilidade é através do cálculo das derivadas das variáveis de saída em relação a cada parâmetro de entrada. Isso permite quantificar a sensibilidade de uma variável de saída em relação às mudanças nos parâmetros de entrada. Nesse caso, é preciso obter a matriz dos coeficientes de sensibilidade  $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta})$ . Nesse trabalho, essa matriz é obtida fazendo a derivada da solução do problema direto  $T(r, z, t)$  com relação a cada grupo de parâmetros considerado no vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$  (Beck; Arnold, 1977; Özisik; Orlande, 2021). Logo,  $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta})$  é dada por:

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}) = \left[ \frac{\partial T_k^T(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} \right]^T, \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, A \text{ e } j = 1, 2, \dots, B \quad (96)$$

sendo  $A$  o número total de medidas no tempo e  $B$  o número total de parâmetros de  $\boldsymbol{\theta}$  (Beck; Arnold, 1977; Özisik; Orlande, 2021). Na forma matricial têm-se:

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_1(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} & \frac{\partial T_1(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2} & \frac{\partial T_1(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial T_1(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_B} \\ \frac{\partial T_2(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} & \frac{\partial T_2(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2} & \frac{\partial T_2(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial T_2(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_B} \\ \frac{\partial T_3(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} & \frac{\partial T_3(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2} & \frac{\partial T_3(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial T_3(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_B} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial T_A(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_1} & \frac{\partial T_A(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_2} & \frac{\partial T_A(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial T_A(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_B} \end{bmatrix}. \quad (97)$$

Em problemas que envolvem a transferência de calor, para obter estimativas no problema inverso, é importante que a matriz de sensibilidade possua coeficientes de alta magnitude e colunas linearmente independentes. Quando o problema possui coeficientes com baixa magnitude em determinados parâmetros de  $\boldsymbol{\theta}$ , ele é pouco sensível à variação desses parâmetros e, com isso, estimativas relacionadas à essas variáveis tipicamente são difíceis de serem realizadas. Além disso, quando existem colunas linearmente dependentes, os parâmetros pertencentes a essas colunas não poderão ser estimados simultaneamente (Beck; Arnold, 1977; Özisik; Orlande,

2021).

Nesse trabalho, os coeficientes de sensibilidade da matriz serão avaliados de forma numérica. Para isso, a derivada da temperatura com relação aos parâmetros pode ser aproximada utilizando diferenças centradas (Özisik; Orlande, 2021). Logo,

$$J_{kj} = \left[ \frac{\partial T_k^T(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j} \right]^T \approx \frac{T_k(\theta_1, \theta_2, \theta_j + \epsilon\theta_j, \dots, \theta_B) - T_k(\theta_1, \theta_2, \theta_j - \epsilon\theta_j, \dots, \theta_B)}{2\epsilon\theta_j}, \quad (98)$$

onde  $\epsilon$  será definido de modo que a convergência da derivada numérica seja alcançada. Para possibilitar uma avaliação gráfica e qualitativa da dependência linear entre os parâmetros, os coeficientes de sensibilidade,  $J_{kj}$ , serão multiplicados por seus respectivos parâmetros  $\theta_j$ , obtendo os chamados coeficientes de sensibilidade modificados dados por:

$$P_j = J_{kj}\theta_j. \quad (99)$$

#### 4.4 Análise sob incerteza com o método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo é uma abordagem estatística em que uma sequência de números aleatórios é utilizada para aproximar resultados de problemas estocásticos. Este método se baseia em repetidas tentativas aleatórias, independentes entre si, realizadas uma quantidade determinada de vezes. Posteriormente, os resultados de todas essas tentativas são calculados, permitindo a obtenção da média e do desvio padrão das soluções. Dessa forma, o método de Monte Carlo possibilita a simulação de qualquer processo influenciado por fatores aleatórios. Além disso, para muitos problemas matemáticos que não apresentam intrinsecamente aleatoriedade, o método permite a construção artificial de um modelo probabilístico, viabilizando a solução desses problemas. Em suma, a essência do método de Monte Carlo reside na estimativa de determinadas quantidades por meio da observação do comportamento de um grande número de eventos individuais (Sobol, 1994; Yoriyaz, 2009; Soize, 2012; Castello; Ritto, 2016; Rubinstein; Kroese, 2016; Silva et al., 2021; Silva, 2022).

Se o objeto for levantar as características estatísticas de uma variável de projeto  $\mathbf{T}_{N_{mc}} = T(\boldsymbol{\theta})$ , onde  $\boldsymbol{\theta}$  é o vetor de parâmetros e com função densidade de probabilidade  $\pi(\boldsymbol{\theta})$  conhecida, pode-se utilizar o algoritmo básico para a simulação de Monte Carlo que, resumidamente, encontra-se na Tabela 4 (Soize, 2012; Castello; Ritto, 2016).

Tabela 4 - Passos para a análise sob incerteza com o método de Monte Carlo.

---

**Passo 1** - Gerando realizações das variáveis aleatórias:

Faça  $i = 0$ ;

Para  $i = 0$  até  $N_{mc}$ , onde  $N_{mc}$  é o número de amostras desejadas;

Faça:  $i = i + 1$ ;

Gere uma realização  $\theta_i$  a partir de  $\theta$  e  $\pi(\theta)$ ;

Simule o modelo computacional para calcular  $\mathbf{T}_{N_{mc},i} = T(\theta_i)$ ;

Arquive a realização  $\theta_i$ .

---

**Passo 2** - Gerando uma aproximação do valor esperado:

Se  $i > N_{mc}$ , calcule os valores para a média e para o desvio padrão:

$$\bar{T}_{N_{mc}} = \frac{1}{N_{mc}} \sum_{i=1}^{N_{mc}} \mathbf{T}_{N_{mc},i}; \quad s_{\mathbf{T}_{N_{mc}}} = \sqrt{\frac{1}{N_{mc}-1} \sum_{i=1}^{N_{mc}} (\mathbf{T}_{N_{mc},i} - \bar{T}_{N_{mc}})^2}.$$


---

Fonte: Adaptado de [Castello e Ritto \(2016\)](#).

## 5 VERIFICAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo será feita a verificação do modelo matemático apresentado no Capítulo 2 por meio da comparação das soluções numéricas obtidas com MEF e o MDF, conforme descrito no Capítulo 3. Além disso, utilizando como referências os dados experimentais disponibilizados por [Elwassif et al. \(2012\)](#), será realizada a validação da solução da temperatura para o caso permanente. Para tal, os códigos foram implementados no *software* Wolfram Mathematica e executados em um notebook com processador Intel(R) Core(TM) i7-11390H@3,40 GHz com 16 GB de RAM.

### 5.1 Verificação da solução da temperatura em regime permanente

Inicialmente, foi realizada uma análise de convergência de malha considerando nas simulações as características do eletrodo 3389 da Medtronic com os contatos 1 e 2 ativos ([Medtronic, 2008](#)). A solução do modelo permanente foi obtida utilizando o MEF com a NDSolve e o MDF, conforme descrito no Capítulo 3. Os dados utilizados para obter as soluções do problema direto estão listados na Tabela 5, cujos valores que foram utilizados para os parâmetros do tecido cerebral e para sangue são as médias disponibilizadas pela Fundação de Pesquisa em Tecnologias da Informação na Sociedade (*Foundation for Research on Information Technologies in Society - IT'IS Foundation*), disponíveis em [Hasgall et al. \(2018\)](#), segunda coluna da Tabela 5. Já os valores para as temperaturas e para os parâmetros dimensionais foram disponibilizados por [Elwassif et al. \(2006\)](#), terceira coluna da Tabela 5. Além disso, o potencial elétrico aplicado foi considerado como  $V_{rms} = 1, 2$  V.

A solução com NDSolve foi obtida escolhendo uma malha composta por elementos quadrangulares. Na Tabela 6 estão os valores encontrados para a temperatura variando a quantidade de elementos de malha. Os números de elementos apresentados na Tabela 6 foram definidos variando os valores de *MaxBoundaryCellMeasure* da NDSolve entre 1/1000 e 1/1600. Os valores foram obtidos no contorno em  $r = R_1$  e em  $r = 6$  mm, considerando  $z$  na posição central do contato ativo 1 ( $z = 22$  mm), na posição central entre os contatos ativos 1 e 2 ( $z = 23$  mm) e na posição central do contato 4 ( $z = 28$  mm). Trata-se de uma função degrau para o potencial elétrico, portanto há dificuldade de convergência nas regiões próximas à mudança brusca de potencial. No termo fonte da equação para a temperatura aparece a derivada do potencial elétrico elevada ao quadrado, portanto a convergência da temperatura fica ainda mais comprometida e, como pode ser observado na Tabela 6, possui variação que oscila na segunda casa decimal.

Tabela 5 - Valores dos parâmetros.

Parâmetros	Valores	
	(Hasgall et al., 2018)	(Elwassif et al., 2006)
Massa específica do cérebro ( $\rho$ )	1046 kg/m <sup>3</sup>	1040 kg/m <sup>3</sup>
Calor específico do cérebro ( $c_p$ )	3630 J/kgK	3650 J/kgK
Condutividade térmica ( $k$ )	0,510 W/mK	0,527 W/mK
Condutividade elétrica ( $\sigma$ )	0,375 S/m	0,350 S/m
Taxa metabólica de calor ( $Q_m$ )	11893 W/m <sup>3</sup>	9132 W/m <sup>3</sup>
Massa específica do sangue ( $\rho_b$ )	1050 kg/m <sup>3</sup>	1057 kg/m <sup>3</sup>
Calor específico do sangue ( $c_b$ )	3617 J/kgK	3600 J/kgK
Perfusão sanguínea ( $\omega_b$ )	0,010 s <sup>-1</sup>	0,008 s <sup>-1</sup>
Temperatura do sangue ( $T_b$ )	-	36,70 °C
Temperatura inicial do cérebro ( $T_a$ )	-	37,0 °C
Raio interno ( $R_1$ )	-	0,635 mm
Raio externo ( $R_2$ )	-	20,00 mm
Altura ( $H$ )	-	50,00 mm

Legenda: Valores disponibilizados por [Hasgall et al. \(2018\)](#) e [Elwassif et al. \(2006\)](#).

Fonte: A autora, 2023.

Tabela 6 - Convergência de malha da solução obtida com a NDSolve.

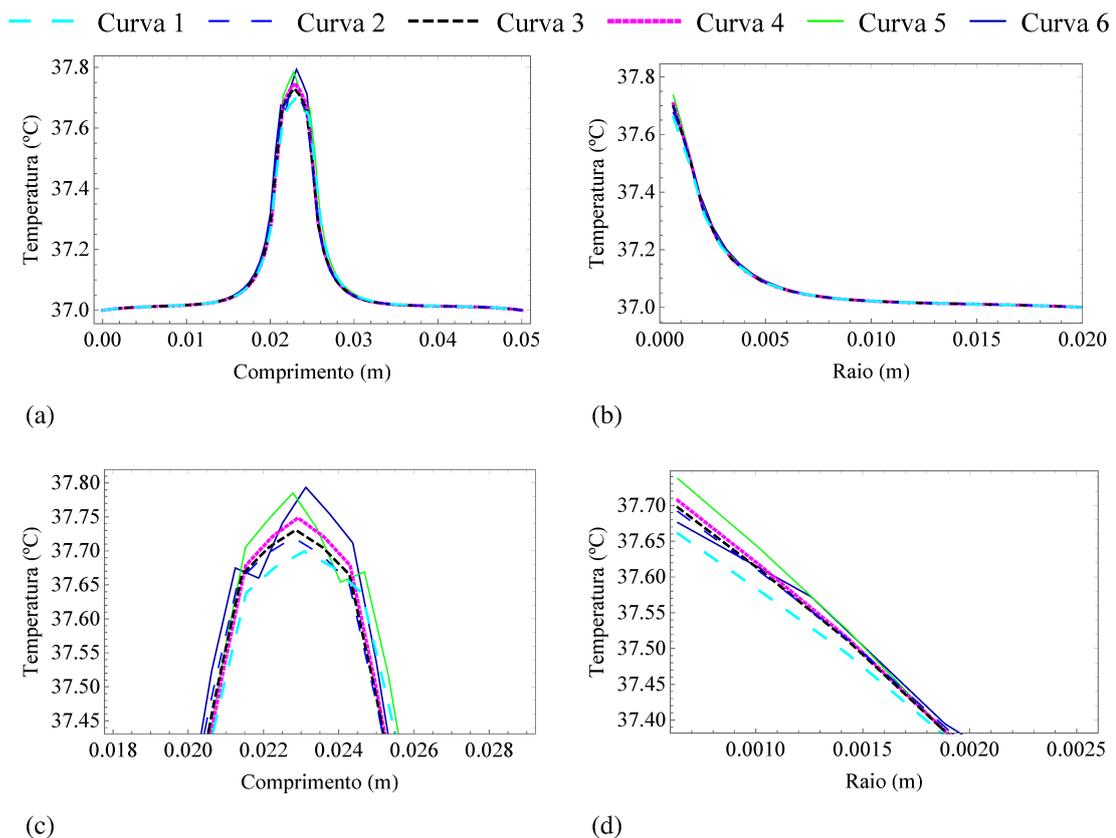
Número de elementos	Temperatura (°C)					
	Variando $z$ com $r = R_1$			Variando $z$ com $r = 6$ mm		
	22 mm	23 mm	28 mm	22 mm	23 mm	28 mm
1000	37,57	37,54	37,07	37,05	37,05	37,03
1440	37,53	37,50	37,08	37,05	37,05	37,03
1690	37,66	37,70	37,11	37,06	37,06	37,04
1742	37,67	37,71	37,11	37,06	37,06	37,04
1836	37,69	37,71	37,09	37,06	37,06	37,04
1960	37,70	37,73	37,09	37,06	37,06	37,04
2016	37,71	37,74	37,09	37,06	37,06	37,04
2146	37,71	37,71	37,10	37,06	37,06	37,04
2280	37,72	37,77	37,09	37,06	37,06	37,04
2449	37,74	37,77	37,11	37,06	37,06	37,04
2480	37,68	37,78	37,10	37,06	37,06	37,04

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 9 estão os perfis de temperatura em diferentes posições, considerando diferentes quantidades de elementos. A Figura 9a mostra o perfil de temperatura em  $r = R_1$  ao longo de todo o comprimento  $z$ , enquanto a Figura 9b apresenta o perfil de temperatura ao longo do

raio na posição central do eletrodo 1. As Figuras 9c e 9d mostram um zoom das Figuras 9a e 9b com foco na região onde há maior variação. Com a Tabela 6 e a Figura 9 é possível notar que há uma variação no valor da temperatura independente da quantidade de elementos utilizados. Além disso, a partir de uma certa quantidade de elementos o método numérico passou a apresentar picos de temperatura, possivelmente causados por erro numérico, conforme pode ser observado nas curvas 5 e 6, com 2449 e 2480 elementos, respectivamente. Com isso, foi considerado que 1960 elementos são suficientes para obter uma malha refinada que represente a solução. Na Figura 10 estão os resultados obtidos para o potencial elétrico entre 1836 e 2016 elementos, onde é possível notar que as curvas estão sobrepostas. A solução exata para o potencial elétrico apresentada na Figura 10 trata-se da função  $f(z)$  utilizada como condição de contorno em  $r = R_1$ . Conforme pode ser visto na Figura 10a, as curvas estão próximas à solução exata do potencial em  $r = R_1$ , mostrando assim a convergência da solução NDSolve desse caso.

Figura 9 - Convergência de malha do perfil de temperatura para a solução NDSolve.

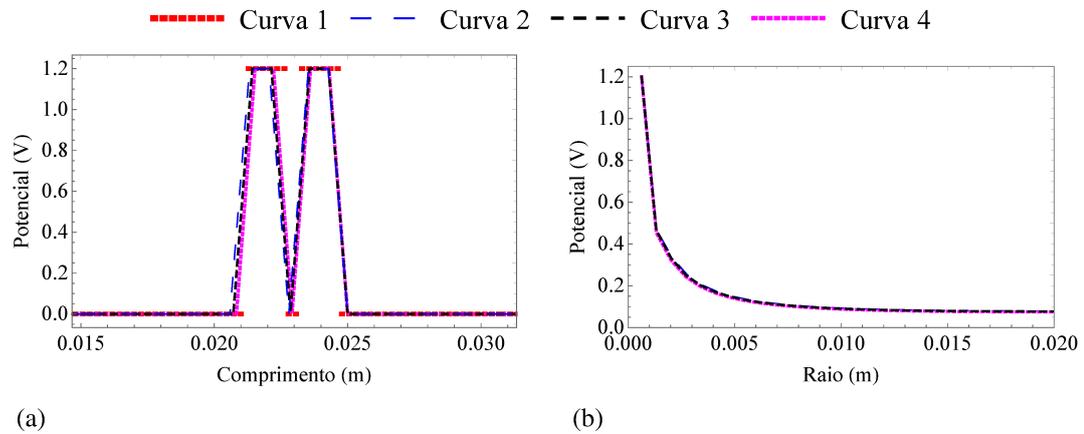


Legenda: (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ . (c) Zoom da Figura (a). (d) Zoom da Figura (b).

As curvas 1, 2, 3, 4, 5 e 6 têm, respectivamente, 1690, 1836, 1960, 2016, 2449 e 2480 elementos de malha.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 10 - Convergência de malha do potencial elétrico para a solução NDSolve.



Legenda: (a) Em  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

A curva 1 representa a solução exata e as curvas 2, 3 e 4 têm, respectivamente, 1836, 1960 e 2016 elementos de malha.

Fonte: A autora, 2023.

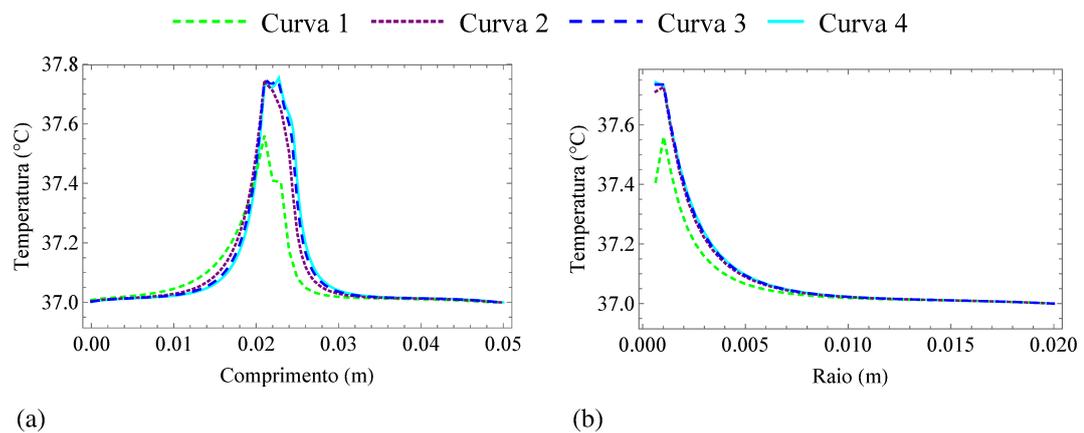
A solução MDF foi obtida considerando o método das diferenças finitas com diferenças centradas para as derivadas de segunda ordem e diferenças atrasadas para as derivadas de primeira ordem, conforme descrito nas subseções 3.2.1 e 3.2.2. A Tabela 7 mostra a convergência da solução obtida com o MDF para os mesmos pontos analisados na convergência NDSolve. Primeiramente, fixando o valor de  $N_r = 51$  e variando  $N_z$  entre 26 e 201 elementos, percebe-se que inicialmente a diferença é maior, mas a partir de 101 elementos a diferença passa a oscilar na segunda casa decimal independente do número de elementos utilizados. Então, escolhendo  $N_z = 151$  e variando  $N_r$  entre 26 e 101 percebe-se que os valores obtidos possuem maior diferença com  $N_r = 26$ . Portanto, como as variações são relativamente pequenas (menos de  $0,1$  °C) e devido às incertezas ocasionadas pela solução da função degrau, foram escolhidos os valores destacados em azul da tabela, sendo eles  $N_r = 51$  e  $N_z = 151$ . Nas Figuras 11 e 12 estão as curvas para a temperatura e para o potencial elétrico para alguns valores de  $N_z$  com  $N_r = 51$ , onde é notável que a solução converge a partir de 101 elementos para  $N_z$ .

Tabela 7 - Convergência de malha da solução obtida com o MDF.

Número de elementos		Temperatura (°C)					
$N_r$	$N_z$	Variando $z$ com $r = R_1$			Variando $z$ com $r = 6$ mm		
		22 mm	23 mm	28 mm	22 mm	23 mm	28 mm
51	26	37,24	37,17	37,02	37,05	37,05	37,03
51	51	37,41	37,40	37,03	37,05	37,05	37,03
51	76	37,51	37,48	37,05	37,06	37,06	37,03
51	101	37,71	37,65	37,06	37,06	37,06	37,04
51	126	37,76	37,69	37,05	37,06	37,06	37,03
51	151	37,74	37,71	37,07	37,06	37,06	37,04
51	176	37,79	37,76	37,07	37,06	37,06	37,04
51	201	37,72	37,72	37,07	37,06	37,06	37,04
26	151	37,65	37,64	37,08	37,06	37,06	37,04
51	151	37,74	37,71	37,07	37,06	37,06	37,04
76	151	37,75	37,70	37,05	37,06	37,06	37,03
101	151	37,73	37,66	37,05	37,06	37,06	37,03

Fonte: A autora, 2023.

Figura 11 - Convergência de malha do perfil de temperatura para a solução MDF.

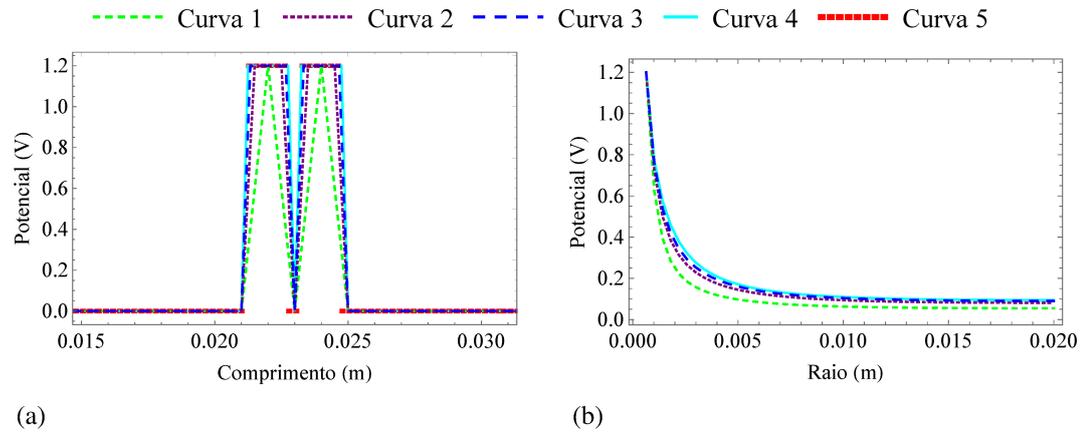


Legenda: (a) Em  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

As curvas 1, 2, 3 e 4 têm, respectivamente, 51, 101, 151 e 251 nós na direção  $z$  e 51 nós na direção  $r$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 12 - Convergência de malha do potencial elétrico para a solução MDF.



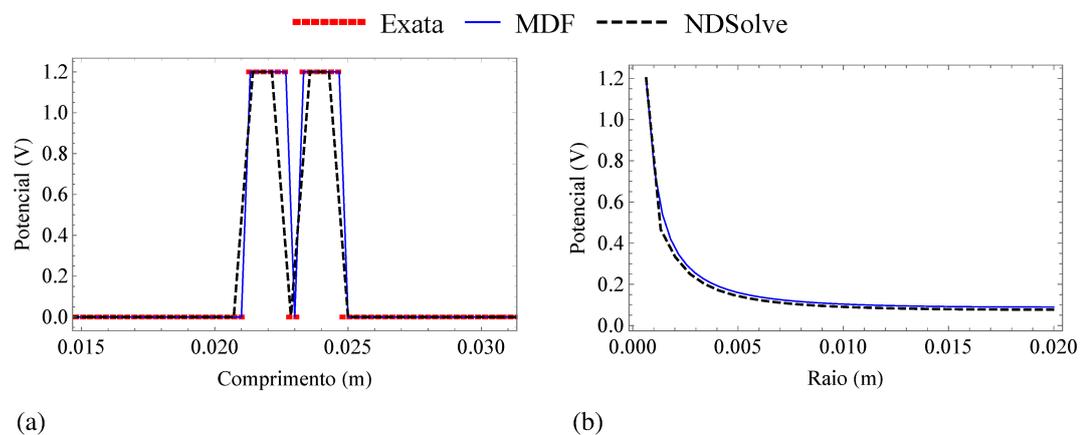
Legenda: (a) Em  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

As curvas 1, 2, 3 e 4 têm, respectivamente, 51, 101, 151 e 251 nós na direção  $z$  e 51 nós na direção  $r$  e a curva 5 representa a solução exata.

Fonte: A autora, 2023.

Nas Figuras 13 e 14, são apresentados os perfis do potencial elétrico e da temperatura obtidos pelas soluções NDSolve e MDF em malhas convergidas. Embora haja um leve deslocamento entre as soluções na Figura 14a, ambas exibem um comportamento semelhante de pico de temperatura devido à aplicação do potencial elétrico, gerando aumento de temperatura local devido ao efeito Joule. As Figuras 14c e 14d mostram o erro absoluto entre as curvas, demonstrando que a maior diferença de temperatura é inferior a  $0,2^\circ\text{C}$ .

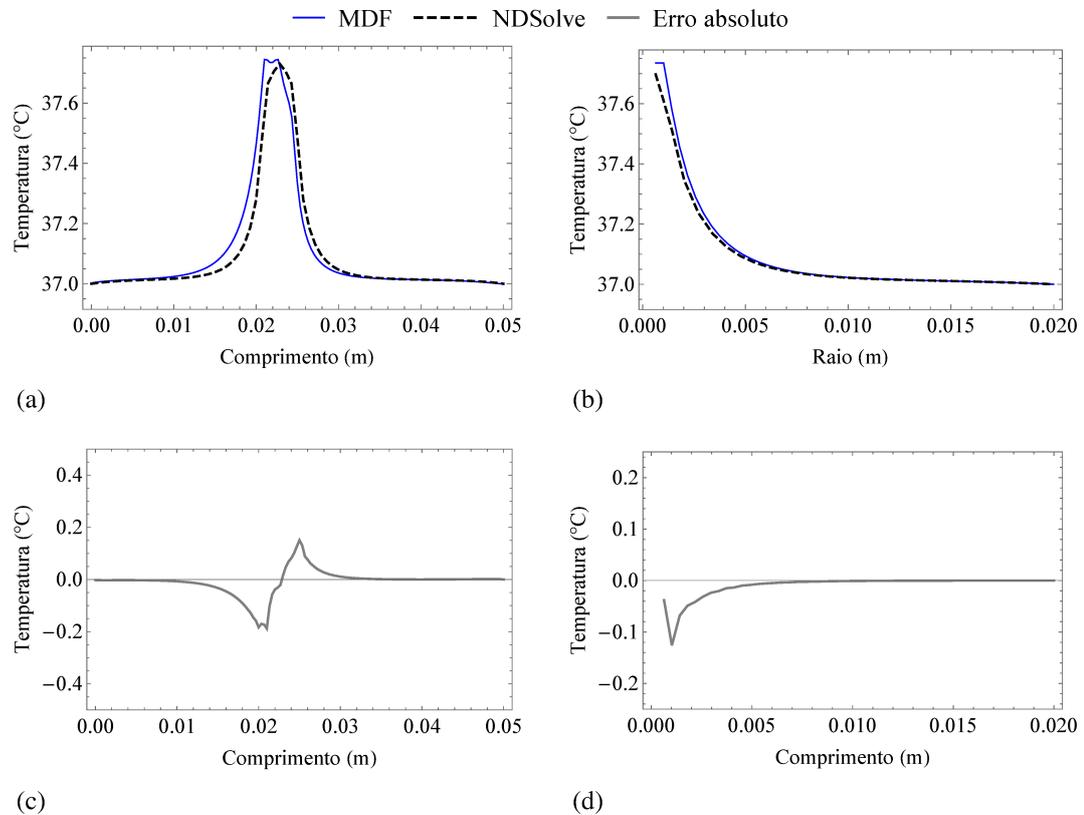
Figura 13 - Comparação entre as soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico.



Legenda: (a) Em  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 14 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura do problema em regime permanente.

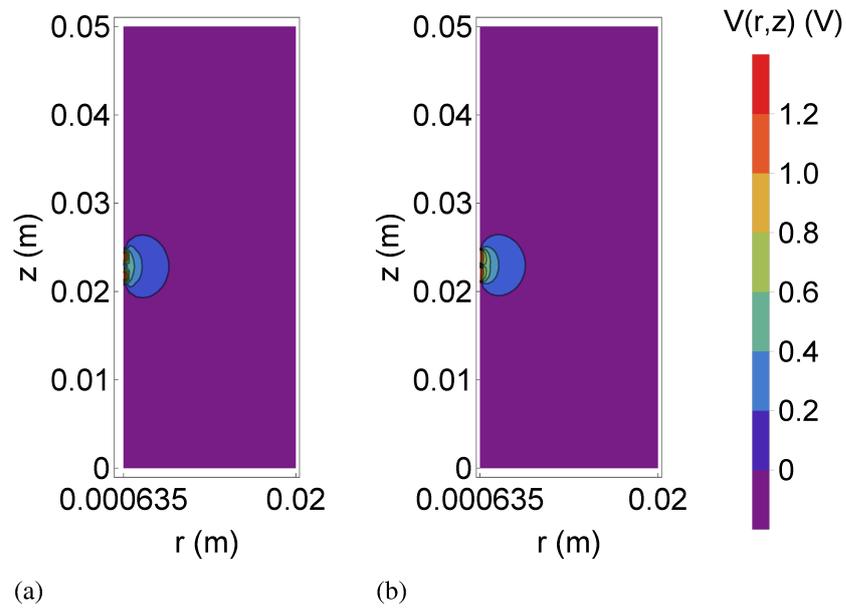


Legenda: (a) Em  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $z = 0,022$  m para  $R_1 \leq r \leq R_2$ . (c) Erro absoluto entre as curvas da Figura 14a. (d) Erro absoluto entre as curvas da Figura 14b.

Fonte: A autora, 2023.

A Figura 15 mostra o potencial elétrico ao longo de  $r$  e  $z$  para as soluções NDSolve e MDF, onde nota-se que ambas apresentam um comportamento de distribuição simétrico ao redor dos pontos de aplicação do potencial. O comportamento do campo de temperatura pode ser visto na Figura 16 que apresenta o pico de maior temperatura acontecendo no mesmo ponto para ambas as soluções, mas com uma pequena diferença na distribuição de temperatura ao se afastar do pico. A solução NDSolve apresenta uma distribuição de temperatura mais simétrica ao redor do ponto de aplicação, enquanto a solução MDF apresenta um pequeno deslocamento na variação de temperatura devido a erro numérico. O campo tridimensional de temperatura pode ser visto na Figura 17 onde nota-se que ambas conseguem capturar o pico de temperatura e que há semelhança na solução ao longo de todo o domínio computacional. A solução NDSolve foi obtida com menos de um minuto, enquanto a solução MDF levou cerca de quatro minutos. No Apêndice A.1 podem ser encontradas a verificação das soluções levando em consideração outras configurações de eletrodos ativos.

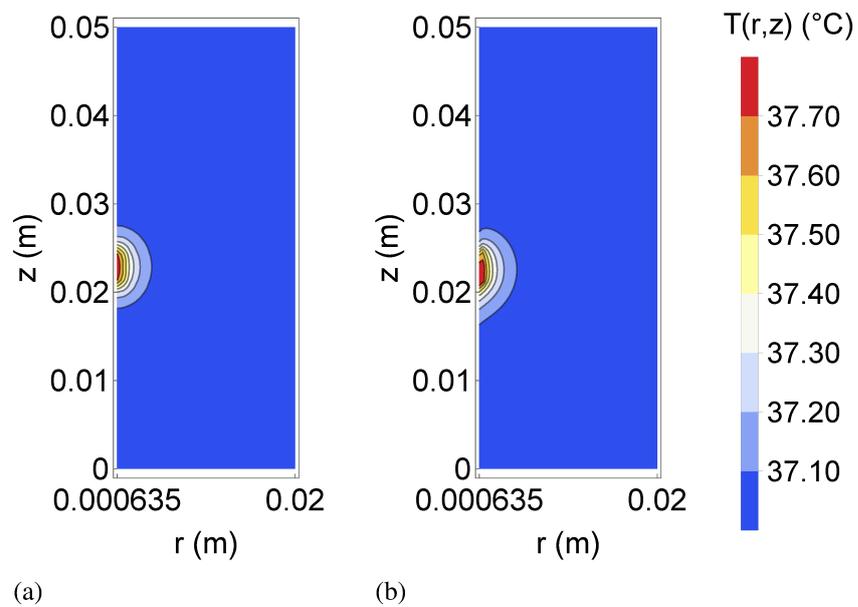
Figura 15 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

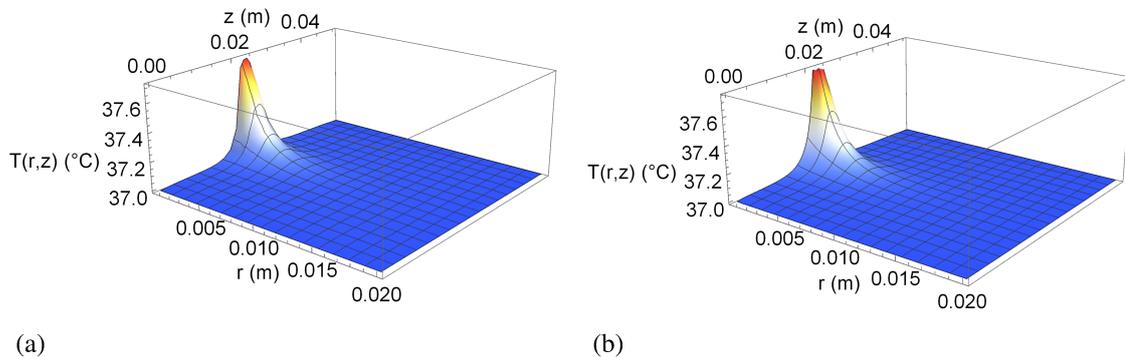
Figura 16 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 17 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

## 5.2 Validação da solução da temperatura em regime permanente

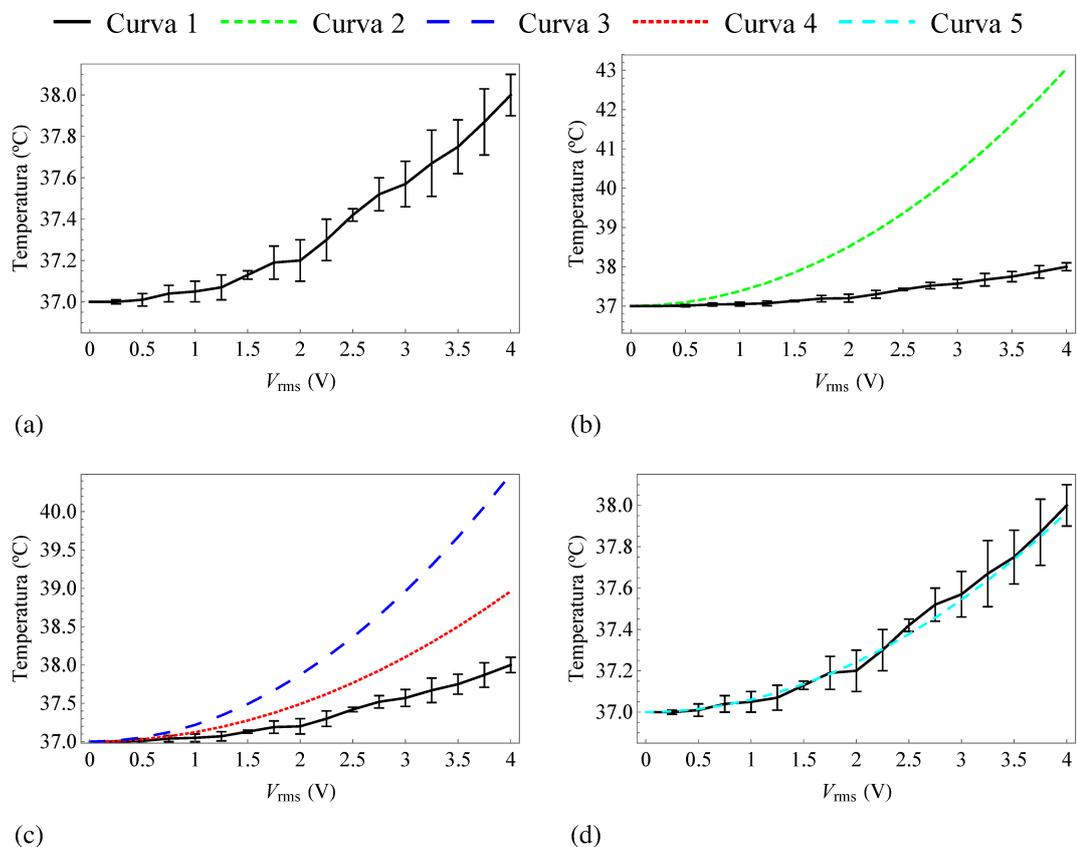
Para fazer a validação do modelo matemático foram utilizados os dados experimentais obtidos por [Elwassif et al. \(2012\)](#). Os autores realizaram o experimento imergindo o eletrodo DBS 3389 da Medtronic no centro de um recipiente cilíndrico, com raio  $R = 25$  mm e altura  $H = 50$  mm, cheio de solução salina. A solução salina foi preparada de forma que as condutividades elétrica e térmica ficassem próximas às condutividades do tecido cerebral ( $k = 0,85$  W/(m $^{\circ}$  C) e  $\sigma = 0,35$  S/m) e desprezando a perfusão sanguínea e a taxa metabólica de calor ( $\omega_b = 0$  e  $Q_m = 0$ ). Além disso, como o objetivo era investigar o aumento máximo de temperatura, o problema foi considerado em regime estacionário, ou seja, desprezando a parte transiente do problema. Para controlar a temperatura dos contornos, o recipiente cilíndrico foi imerso em banho-maria com temperatura monitorada de 37  $^{\circ}$ C. Para registrar a temperatura, os autores utilizaram um termopar com precisão de 0,1  $^{\circ}$ C localizado na borda do eletrodo considerando a região central entre os contatos ativos. Em seus experimentos, [Elwassif et al. \(2012\)](#) concluíram que a mudança no pico de temperatura durante a estimulação ocorre em função da tensão  $V_{rms}$  aplicada e não depende da forma da onda ou da frequência utilizada. Assim, para investigar os aumento da temperatura, os autores mediram o pico de temperatura em função do valor  $V_{rms}$  considerando um intervalo de 0 à 4 V, medidos a cada 0,25 V, em um problema onde os contatos 1 e 2 estavam ativos no eletrodo.

Na Figura 18a estão os resultados experimentais obtidos por [Elwassif et al. \(2012\)](#) juntamente com seus desvios-padrão, extraídos utilizando a *WebPlotDigitizer*, uma ferramenta baseada na Web para extrair dados de plotagens, imagens e mapas ([Rohatgi, 2022](#)). Assim, fazendo as simplificações necessárias na Eq. (2) para tornar o problema em regime permanente, despre-

zando a perfusão sanguínea e a taxa metabólica de calor, e considerando os valores das propriedades conforme os dados de [Elwassif et al. \(2012\)](#), obtém-se o perfil de temperaturas na posição central entre os eletrodos 1 e 2, conforme pode ser visto na curva 2 da Figura 18b. Com as Figuras 18a e 18b percebe-se que o modelo computacional simplificado produz picos de temperatura significativamente maiores do que os encontrados experimentalmente por [Elwassif et al. \(2012\)](#). Isso era esperado, pois quando um eletrodo é colocado em um meio como o tecido cerebral uma interface que causa queda de tensão entre eletrodo-solução salina é formada. Essa queda de tensão na interface durante o DBS pode ser modelada considerando uma redução no valor do  $V_{rms}$  aplicado com variação de 24% a 43% em um problema com eletrodo realista ([Merrill; Bikson; Jefferys, 2005](#); [Cantrell et al., 2007](#); [Elwassif et al., 2012](#)). Nas curvas 3 e 4 da Figura 18c estão os resultados obtidos considerando tais variações, onde em azul (curva 3) encontra-se o resultado com uma redução de 24% e em vermelho (curva 4) o resultado para 43%. Como explicado na literatura, a queda de 24% a 43% na interface ocorre em problemas onde o eletrodo DBS é modelado de forma realista. Nesse caso, como o modelo computacional utilizado é um modelo simplificado que despreza a transferência de calor que ocorre do tecido para o eletrodo, a redução de 43% ainda não é suficiente para alcançar temperaturas compatíveis com os dados experimentais. Então, na curva 5 da Figura 18d estão os resultados obtidos considerando uma queda da interface de 60% do potencial elétrico real  $V_{rms}$  aplicado. Logo, quando o potencial elétrico real aplicado for  $V_{rms,real}$ , considera-se  $V_{rms} = 0,40V_{rms,real}$  para obter resultados computacionais próximos. Por exemplo, se  $V_{rms,real} = 2V$ , tem-se  $V_{rms} = 0,40 * 2V = 0,80V$ .

Portanto, o modelo computacional utilizado neste trabalho trata-se de um modelo simplificado que despreza a transferência de calor que ocorre do tecido cerebral para o eletrodo, mas é capaz de capturar o comportamento dos picos de temperatura causados pelo potencial elétrico aplicado. Além disso, esse modelo tem a vantagem de possuir baixo custo computacional e alcançar resultados conservadores, visto que as medidas de temperatura atingidas computacionalmente são maiores do que as medidas obtidas experimentalmente. Para levar em consideração a troca de calor entre o tecido cerebral e o eletrodo torna-se necessário incluir no domínio computacional a região de raio entre 0 e  $R_1$  e as propriedades relacionadas as condutividades térmica e elétrica do eletrodo ([Elwassif et al., 2006](#); [Elwassif et al., 2012](#)). Essas considerações levam a um aumento do custo computacional. Nesse sentido, trabalhos futuros podem ser realizados para tornar o problema mais realista e abordagens como AEM podem ser utilizadas com o intuito de diminuir o custo computacional da solução ([Pereira; Abreu; Knupp, 2022](#)).

Figura 18 - Curvas de temperatura *versus* potencial elétrico fazendo diferentes considerações para a queda de tensão na interface eletrodo-tecido cerebral.



Legenda: (a) Com a curva 1 representando os dados experimentais disponibilizados por [Elwassif et al. \(2012\)](#). (b) Com a curva 2 representando a curva sem queda de tensão na interface. (c) Com as curvas 3 e 4 representando, respectivamente, as quedas de tensão de 24% e 43% na interface. (d) Com a curva 5 representando a queda de tensão de 60% na interface.

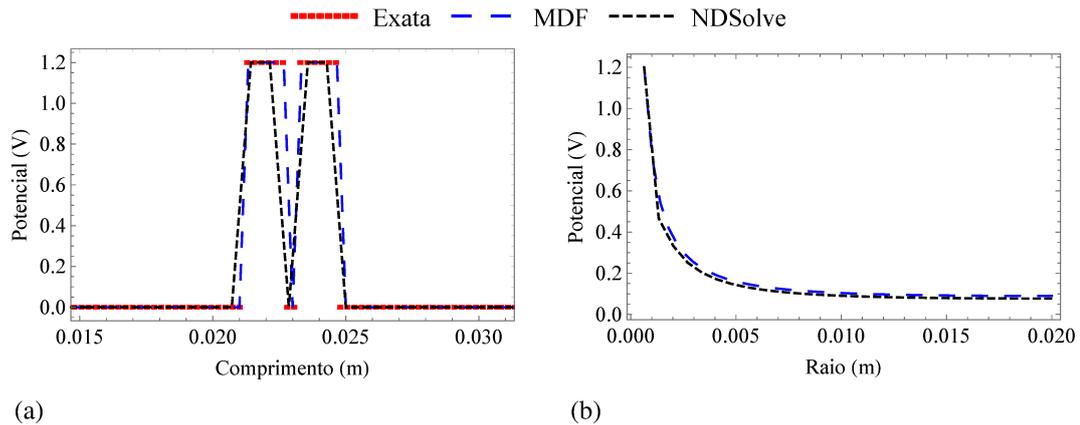
Fonte: A autora, 2023.

### 5.3 Verificação da solução da temperatura em regime transiente

A convergência de malha para o problema em regime transiente foi realizada utilizando a NDSolve e o MDF, conforme descrito nas subseções 3.2.1 e 3.2.3 do Capítulo 3. A solução para o potencial elétrico é a mesma obtida na seção 5.1 e a solução para a temperatura também apresentou o mesmo comportamento do problema em regime permanente, como pode ser visto nas Figuras 19 e 20, onde a solução exata para o potencial elétrico trata-se da condição de contorno  $f(z)$  em  $r = R_1$ . Assim, considerou-se que 1960 elementos para a solução NDSolve e  $N_r = 51$  e  $N_z = 151$  para a solução MDF são suficientes para a convergência. Na Figura 21

estão as curvas para a temperatura ao longo do tempo em  $r = R_1$  com  $z$  na posição do contato 1 e na posição central entre os contatos 1 e 2, ponto onde ocorre o pico de temperatura. Com as figuras é possível notar que as soluções apresentam comportamento semelhante com erro absoluto máximo menor do que  $0,05 \text{ } ^\circ\text{C}$ .

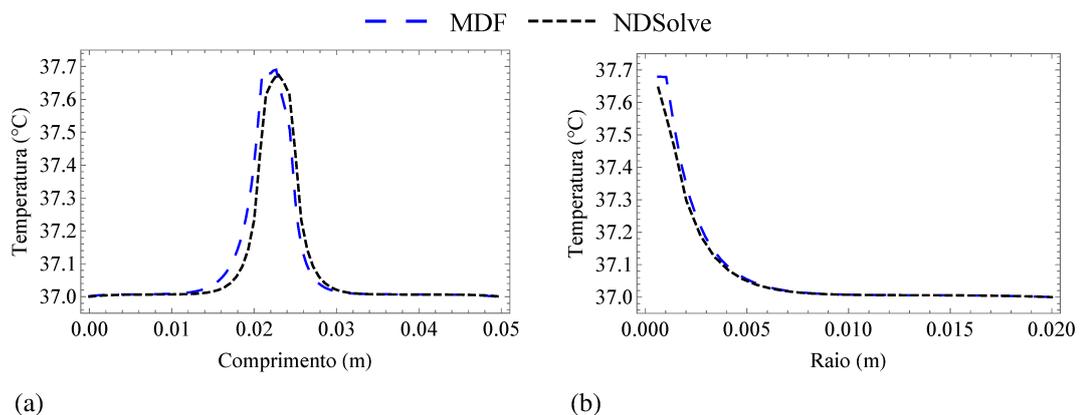
Figura 19 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico do problema em regime transiente.



Legenda: (a) Em  $t = t_f$  e  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $t = t_f$  e  $z = 0,022 \text{ m}$  para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

Fonte: A autora, 2023.

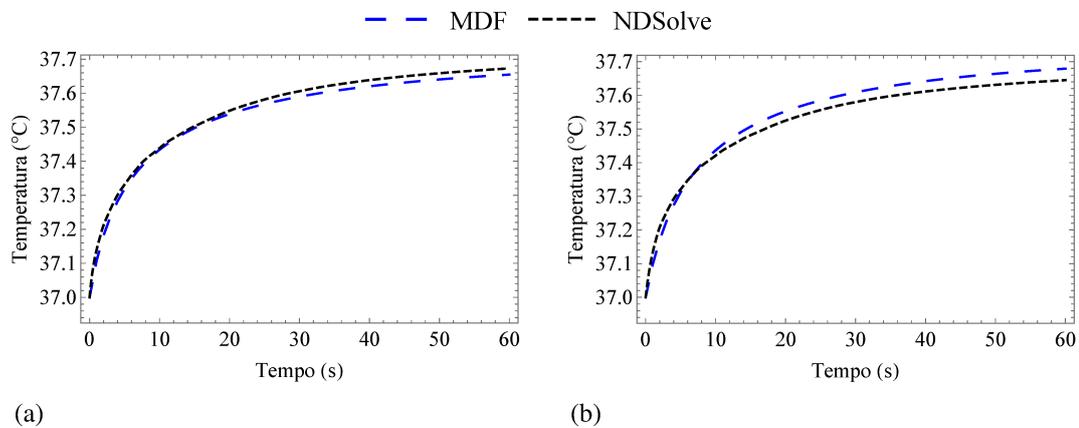
Figura 20 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura do problema em regime transiente.



Legenda: (a) Em  $t = t_f$  e  $r = R_1$  para  $0 \leq z \leq H$ . (b) Em  $t = t_f$  e  $z = 0,022 \text{ m}$  para  $R_1 \leq r \leq R_2$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 21 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para a temperatura no problema em regime transiente ao longo do tempo.

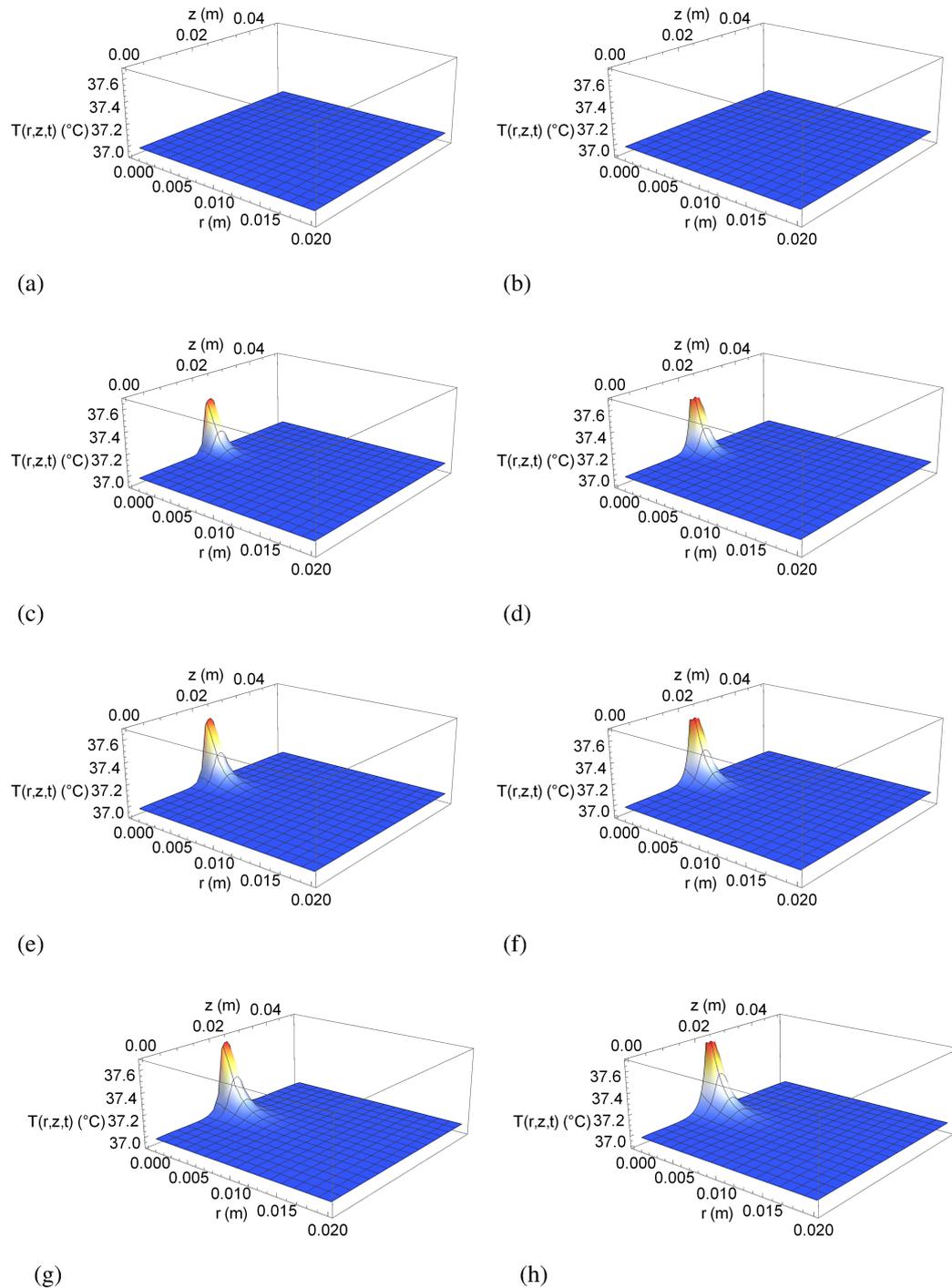


Legenda: (a) Em  $r = R_1$  e  $z = H/2$ . (b) Em  $r = R_1$  e  $z = 0,022$  m.

Fonte: A autora, 2023.

Para analisar o comportamento tridimensional da solução transiente com os contatos 1 e 2 do eletrodo ativos foram gerados os gráficos da Figura 22 onde à esquerda encontram-se os resultados para a solução NDSolve e à direita os resultados da solução MDF, ambas em diferentes instantes de tempo. As Figuras 22a e 22b mostram que as soluções encontram-se com temperatura constante e igual a  $37\text{ °C}$  em  $t = 0$  segundos. Com o passar do tempo, como os contatos 1 e 2 são próximos, começa a se formar um pico de temperatura na região central entre os contatos. Nas Figuras 22c e 22d percebe-se que ambas as soluções conseguem capturar esse pico de temperatura em  $t = 15$  segundos e as Figuras 22e, 22f, 22g e 22h mostram que a semelhança do pico de temperatura continua para os tempos de 30 e 60 segundos. No Apêndice A.2 podem ser encontradas a verificação das soluções levando em consideração outras configurações de eletrodos ativos. Portanto, as duas soluções foram capazes de capturar os picos de temperatura esperados e apresentam resultados semelhantes considerando diferentes combinações de contatos ativos. Além disso, a solução NDSolve do problema em regime transiente foi obtida com um minuto, enquanto a solução MDF levou cerca de oito minutos. Logo, os próximos resultados serão obtidos utilizando a solução NDSolve.

Figura 22 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente.



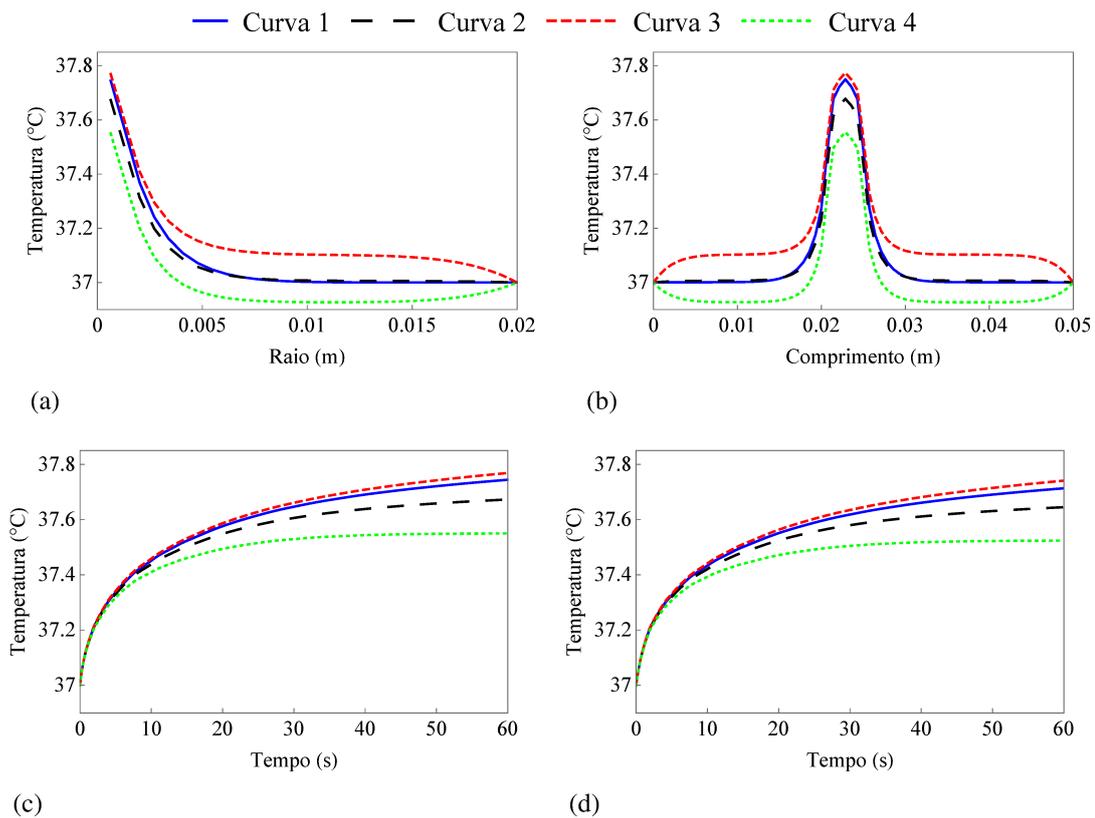
Legenda: (a) NDSolve em  $t = 0$  segundos. (b) MDF em  $t = 0$  segundos. (c) NDSolve em  $t = 15$  segundos. (d) MDF em  $t = 15$  segundos. (e) NDSolve em  $t = 30$  segundos. (f) MDF em  $t = 30$  segundos. (g) NDSolve em  $t = 60$  segundos. (h) MDF em  $t = 60$  segundos.

Fonte: A autora, 2023.

Para investigar a influência dos parâmetros de perfusão sanguínea e da taxa metabólica

de calor foram geradas as curvas disponíveis na Figura 23 utilizando a NDSolve. Na figura estão as curvas obtidas variando  $\omega_b$  e  $Q_m$  de acordo com os casos apresentados na Tabela 8, sendo, respectivamente, os casos 1, 2, 3 e 4 referentes as curvas 1, 2, 3 e 4 da Figura 23. Para os demais parâmetros, considerou-se os mesmos valores utilizados anteriormente. Segundo [Elwassif et al. \(2006\)](#) a taxa metabólica de calor e o fluxo sanguíneo atuam em direções opostas. A taxa metabólica de calor ( $Q_m$ ) tem a tendência de aumentar a temperatura cerebral. Assim, observando as curvas 2 e 3 da Figura 23 percebe-se que ao aumentar o valor de  $Q_m$  o pico de temperatura aumenta. No que diz respeito ao fluxo sanguíneo, representado na Eq. (8) pelo termo  $\omega_b \rho_b c_b (T - T_b)$ , ele tem a tendência de diminuir a temperatura do tecido cerebral, pois a temperatura do sangue na corrente sanguínea geralmente é menor do que a temperatura no interior do cérebro. Observando as curvas 2 e 4 da Figura 23 percebe-se que ao aumentar o valor de  $\omega_b$  o pico de temperatura diminui.

Figura 23 - Comparação entre soluções considerando diferentes valores para os parâmetros  $\omega_b$  e  $Q_m$ .



Legenda: (a) Ao longo do raio com  $z = H/2$  e  $t = t_f$ . (b) Ao longo do comprimento com  $r = R_1$  e  $t = t_f$ . (c) Ao longo do tempo na posição do sensor. (d) Ao longo do tempo na posição central do eletrodo 2.

Fonte: A autora, 2023.

Tabela 8 - Valores de  $\omega_b$  e  $Q_m$  utilizados para investigar suas influências na solução do perfil de temperatura.

Parâmetros	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Perfusão sanguínea ( $\omega_b$ ) em $s^{-1}$	0	0,01	0,01	0,017
Taxa metabólica de calor ( $Q_m$ ) em $W/m^3$	0	11893	20000	11893

Fonte: A autora, 2023.

## 6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A apresentação dos resultados tem o objetivo de mostrar diferentes formas de resolver problemas inversos de biotransferência de calor considerando a estimulação cerebral profunda. As soluções do problema inverso podem auxiliar de forma significativa na melhoria da precisão de resultados obtidos numericamente, sendo úteis para análises preliminares de aumentos de temperatura causados por dispositivos DBS. Nesse sentido, a seção 6.1 mostra a aplicação do algoritmo MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings, apresentado na seção 4.1, em um problema em regime permanente com o intuito de estimar o potencial elétrico aplicado ao dispositivo DBS, considerando que, supostamente, há medidas experimentais de temperatura disponíveis em um ponto do domínio computacional. Em seguida, na seção 6.2, o potencial elétrico anteriormente obtido foi utilizado para realizar a estimativa sequencial do campo de temperatura interna do cérebro utilizando para isso filtros de partículas apresentados nas subseções 4.2.2.2 à 4.2.2.4. Além disso, na seção 6.3, o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas, apresentado na seção 4.1.1, foi aplicado ao problema transiente com o interesse de estimar propriedades do tecido cerebral presentes no modelo matemático. Todas as soluções foram obtidas usando códigos computacionais desenvolvidos no software Wolfram Mathematica e executados em um notebook com processador Intel(R) Core(TM) i7-11390H@3,40 GHz com 16 GB de RAM.

### 6.1 Estimativa do potencial elétrico aplicado utilizando como base os resultados obtidos por [Elwassif et al. \(2006\)](#)

Para estimar o potencial elétrico aplicado utilizando o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings foram consideradas as medidas de temperatura obtidas e disponibilizadas por [Elwassif et al. \(2006\)](#). Portanto, primeiramente os dados de temperatura disponibilizados graficamente foram extraídos utilizando a *WebPlotDigitizer*, conforme descrito na subseção 6.1.1. Em seguida, na subseção 6.1.2, encontra-se a análise de sensibilidade, indicando a possibilidade de se estimar o potencial elétrico na solução inversa. Finalmente, na subseção 6.1.3 o potencial elétrico foi estimado utilizando o método MCMC e levando em consideração diferentes informações sobre os demais parâmetros do modelo matemático.

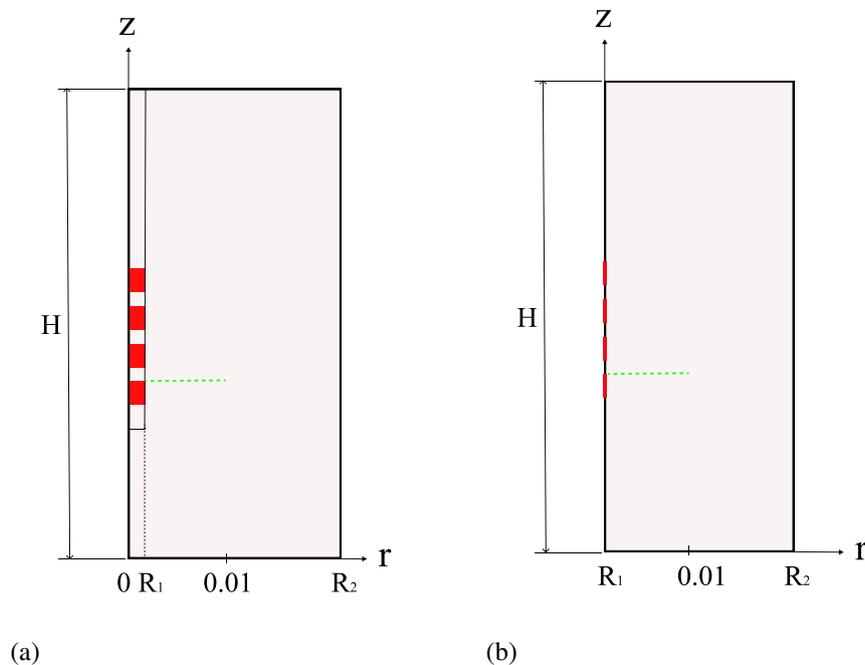
#### 6.1.1 Extração dos dados do artigo de [Elwassif et al. \(2006\)](#)

[Elwassif et al. \(2006\)](#) utilizaram o modelo matemático proposto por [Pennes \(1948\)](#) para analisar o campo de temperatura considerando um problema em regime permanente bidimensi-

onal em coordenadas cilíndricas. O domínio computacional utilizado por [Elwassif et al. \(2006\)](#) leva em consideração a região referente ao eletrodo, ou seja, o domínio é dado por  $0 \leq r \leq R_2$  e  $0 \leq z \leq H$ , conforme pode ser visto na Figura 24a. Na região entre 0 e  $R_1$  os autores consideraram informações referentes ao eletrodo. Portanto, as regiões em vermelho na Figura 24a receberam as informações do eletrodo e as demais regiões foram consideradas com as propriedades do cérebro.

Para simplificar o modelo e diminuir o custo computacional da solução, nesse trabalho será considerado o domínio computacional dado na Figura 24b, ou seja, entre  $R_1 \leq r \leq R_2$  e  $0 \leq z \leq H$ . Essa simplificação retira a parcela do domínio entre 0 e  $R_1$  e considera a influência do eletrodo como uma condição de contorno em  $r = R_1$ . Essa simplificação no modelo despreza a troca de calor que ocorre na direção do interior do eletrodo. Com isso, espera-se que as temperaturas encontradas com esse domínio simplificado sejam ligeiramente mais altas do que as temperaturas obtidas com os modelos que levam em conta a dissipação ao longo do próprio eletrodo. Nesse contexto, serão utilizadas as medidas de temperatura obtidas e disponibilizadas por [Elwassif et al. \(2006\)](#) para encontrar o potencial elétrico aplicado ao domínio da Figura 24b que gere um perfil de temperatura com valores semelhante ao perfil obtido utilizando o domínio da Figura 24a.

Figura 24 - Representação esquemática do domínio computacional.



Legenda: (a) Utilizado por [Elwassif et al. \(2006\)](#). (b) Utilizado nesse trabalho.

Fonte: A autora, 2023.

No primeiro caso apresentado por [Elwassif et al. \(2006\)](#) o foco está em analisar como

a temperatura aumenta em resposta ao calor causado pelo DBS, considerando que as parcelas referentes ao metabolismo e ao fluxo sanguíneo sejam desprezadas, pois  $Q_m - \rho_b c_b \omega_b (T - T_b) \approx 0$ . Portanto, desconsiderando os efeitos da perfusão sanguínea e da taxa metabólica de calor e analisando o problema em regime permanente, pode-se simplificar a Eq. (2) retirando o termo do lado esquerdo da igualdade e os termos  $Q_m$  e  $\rho_b c_b \omega_b (T - T_b)$ , de forma que o termo fonte de calor será dado apenas pela parcela referente a  $Q_{ext}(r, z, V)$ , ou seja,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_{ext}(r, z, V) = 0. \quad \text{em } R_1 < r < R_2 \quad \text{e} \quad 0 < z < H \quad (100)$$

O problema em estudo foi resolvido pelos autores considerando que os contatos 1 e 2 (os dois contatos mais distais no eletrodo DBS) estavam energizados eletricamente com  $V_{rms} = 1,561$  V, nas posições de eletrodos ativos, e  $V_{rms} = 0$  V, nas demais posições. Os outros parâmetros do modelo matemático foram considerados com os valores da Tabela 9. A figura com os dados do perfil de temperatura disponibilizada no trabalho de [Elwassif et al. \(2006\)](#) considera os pontos entre  $R_1 \leq r \leq 0,01$  m em  $z = 0,02275$  m (linha verde da Figura 24a). Com isso, utilizando a *WebPlotDigitizer* foram extraídos 61 pontos da figura de [Elwassif et al. \(2006\)](#), conforme pode ser observado na Figura 25. Os pontos obtidos, posteriormente, serão utilizados como dados para a solução do problema inverso.

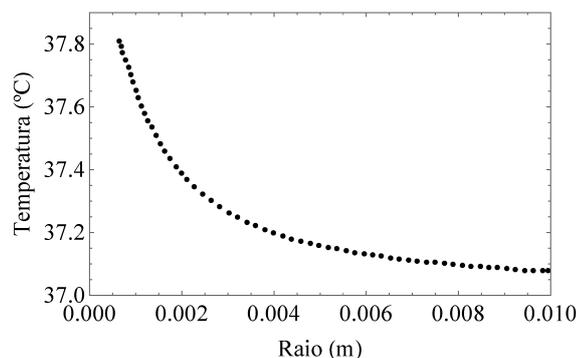
Tabela 9 - Valores dos parâmetros utilizados para obter a estimativa do potencial elétrico.

Parâmetros	Valores
Temperatura ( $T$ )	37,0 °C
Condutividade elétrica ( $\sigma$ )	0,350 S/m
Condutividade térmica ( $k$ )	0,527 W/mK

Legenda: Valores disponibilizados em [Elwassif et al. \(2006\)](#).

Fonte: A autora, 2023.

Figura 25 - Pontos de temperatura de [Elwassif et al. \(2006\)](#) que serão utilizados como dados para o problema inverso do modelo matemático em regime permanente.



Fonte: Adaptado de [Elwassif et al. \(2006\)](#).

### 6.1.2 Análise de sensibilidade

A análise de sensibilidade foi realizada utilizando os coeficientes modificados dos parâmetros ( $P_j$ ), conforme descrito na subseção 4.3. Para resolver o problema, considerou-se os valores da Tabela 10 (Elwassif et al., 2006). Na Figura 26 são apresentadas as curvas para os coeficientes de sensibilidade modificados de cada parâmetro ao longo de  $r$  em  $z = 0,02275$  m, sendo  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  e  $P_4$  os coeficientes relacionados a  $V_{rms}$ ,  $k$ ,  $\sigma$  e  $T_a$ , respectivamente. A Figura 26a mostra os coeficientes para  $V_{rms}$ ,  $\sigma$  e  $k$ , onde é possível perceber que o coeficiente relacionado a  $V_{rms}$ , apresenta alta sensibilidade e, possivelmente, pode ser estimado em uma solução de problema inverso. Porém, os coeficientes modificados relacionados a  $V_{rms}$ ,  $\sigma$  e  $k$  são linearmente correlacionados conforme pode ser observado na Figura 26b, onde nota-se que  $P_1/P_2$  e  $P_1/P_3$  são constantes. Dessa forma, os parâmetros  $V_{rms}$ ,  $\sigma$  e  $k$  não poderão ser estimados simultaneamente. Na Figura 26c encontra-se o coeficiente de sensibilidade modificado para a temperatura  $T_a$  que permanece constante e igual a  $37^\circ\text{C}$  ao longo de todo o raio.

Tabela 10 - Valores dos parâmetros utilizados para a solução do problema direto em regime permanente.

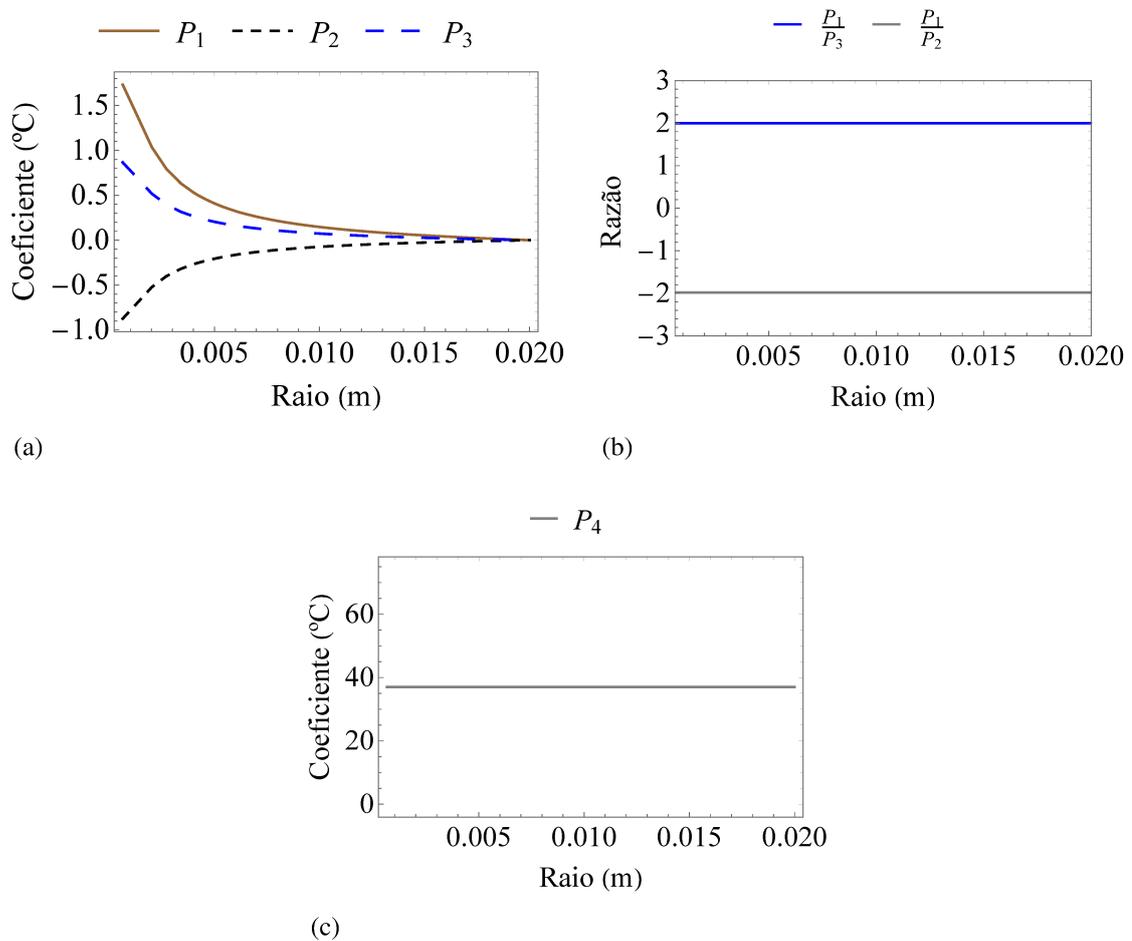
Parâmetros	Valores
Potencial elétrico ( $V_{rms}$ )	1,2 V
Condutividade térmica ( $k$ )	0,527 W/mK
Condutividade elétrica ( $\sigma$ )	0,35 S/m
Temperatura inicial do cérebro ( $T_a$ )	37,0 °C
Raio interno ( $R_1$ )	0,635 mm
Raio externo ( $R_2$ )	20,00 mm
Altura ( $H$ )	50,00 mm

Legenda: Valores disponibilizados por Elwassif et al. (2006).

Fonte: A autora, 2023.

Dessa forma, apenas um dos três parâmetros poderá ser estimado enquanto os outros precisarão ser considerados deterministicamente conhecidos ou com pequenas incertezas associadas e contabilizadas nas informações à priori. Como  $k$  e  $\sigma$  são propriedades do modelo matemático relacionadas a condutividade térmica e elétrica do cérebro, é importante que se considere incertezas associadas a elas, pois se tratando de corpo humano, pode haver pequenas variações de pessoa para pessoa que devem ser levadas em consideração para que o problema seja mais realístico.

Figura 26 - Análise de sensibilidade para o problema em regime permanente.



Legenda: (a) Coeficientes de sensibilidade modificados para  $V_{rms}$ ,  $\sigma$  e  $k$ . (b) Comparação entre os coeficientes modificados. (c) Coeficiente de sensibilidade modificado para  $T_a$ .

Fonte: A autora, 2023.

### 6.1.3 Solução do problema inverso com o método MCMC

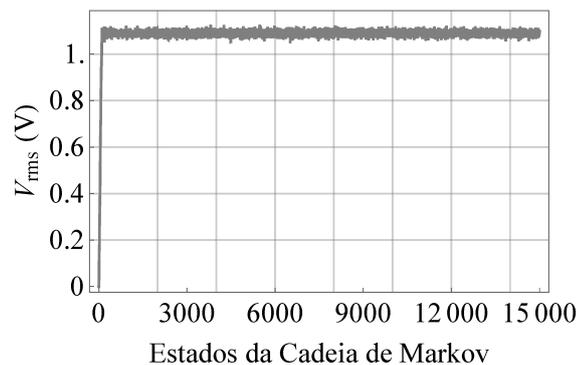
De posse dos dados da Figura 25, e com a análise de sensibilidade indicando a possibilidade de estimar  $V_{rms}$ , será aplicado o MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings para estimar o potencial elétrico. Nesse caso, considerou-se que no contorno em  $r = R_1$  têm-se  $f(z) = V_{rms}$  na posição dos contatos 1 e 2 e  $f(z) = 0$  nas demais posições, com o valor de  $V_{rms}$  podendo variar uniformemente entre 0 e 2. No que diz respeito aos demais parâmetros do modelo matemático, foram considerados três casos: caso 1 - Os parâmetros  $k$ ,  $\sigma$  e  $T_a$  são constantes e deterministicamente conhecidos; caso 2 - Os parâmetros  $k$  e  $\sigma$  possuem incertezas que serão contabilizadas na solução como informações a priori informativas com  $T_a$  constante; e caso 3 - Os parâmetros  $k$ ,  $\sigma$  e  $T_a$  possuem incertezas que serão contabilizadas na solução

como informações a priori informativas. Nos tópicos a seguir estão os resultados obtidos para cada caso.

### 6.1.3.1 Caso 1

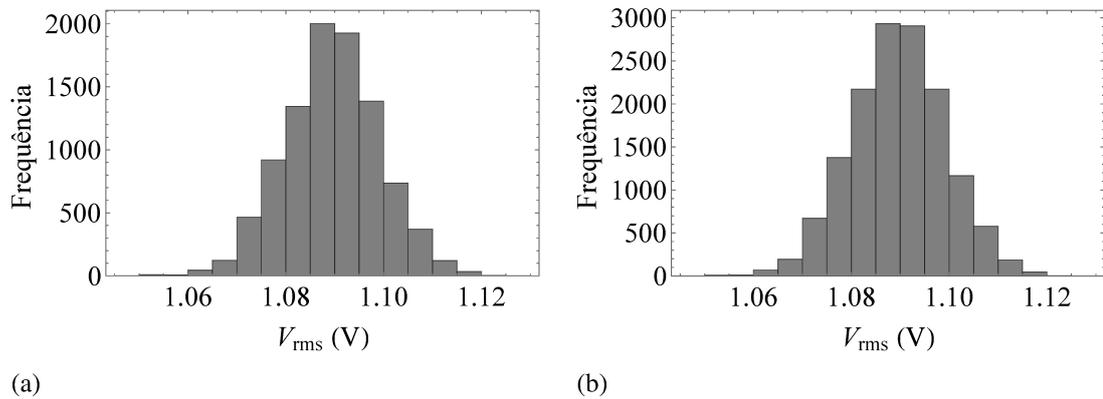
Primeiramente, para incluir as incertezas associadas a extração dos dados da figura disponibilizada por [Elwassif et al. \(2006\)](#), considerou-se que os dados possuem uma pequena variação com distribuição gaussiana sendo a média 0 e o desvio padrão de 0,05 °C, ou seja, o vetor de dados  $\mathbf{z}_{exp}$  terá  $s_{exp} = 0,05$  como desvio padrão. As condutividades térmica e elétrica e a temperatura  $T_a$  foram consideradas constantes e iguais as disponibilizadas na Tabela 10. Além disso, para começar a aplicação do MCMC a cadeia inicializou-se com  $V_{rms, inicial} = 0$  V. Na Figura 27 encontra-se a cadeia de Markov obtida para o parâmetro  $V_{rms}$  em 15000 estados, onde é possível notar que a cadeia passa a ter somente pequenas oscilações a partir de aproximadamente 500 estados. Com isso, desprezando os 500 estados iniciais, na Figura 28a encontra-se o histograma gerado para os valores da cadeia de Markov no intervalo entre os estados 500 e 10000 e na Figura 28b o histograma gerado para os valores entre 500 e 15000. Como os histogramas mantêm as mesmas características, considera-se que houve convergência da cadeia de Markov. Desprezando os 500 estados de *burn-in*, foi encontrada média de  $V_{rms, est} = 1,090$  V e desvio padrão de  $s_{V_{rms, est}} = 0,009$  V. O tempo computacional, neste caso, foi de 30 minutos.

Figura 27 - Estados da Cadeia de Markov para o caso 1.



Fonte: A autora, 2023.

Figura 28 - Histogramas para o caso 1 com diferentes números de estados da cadeia de Markov.



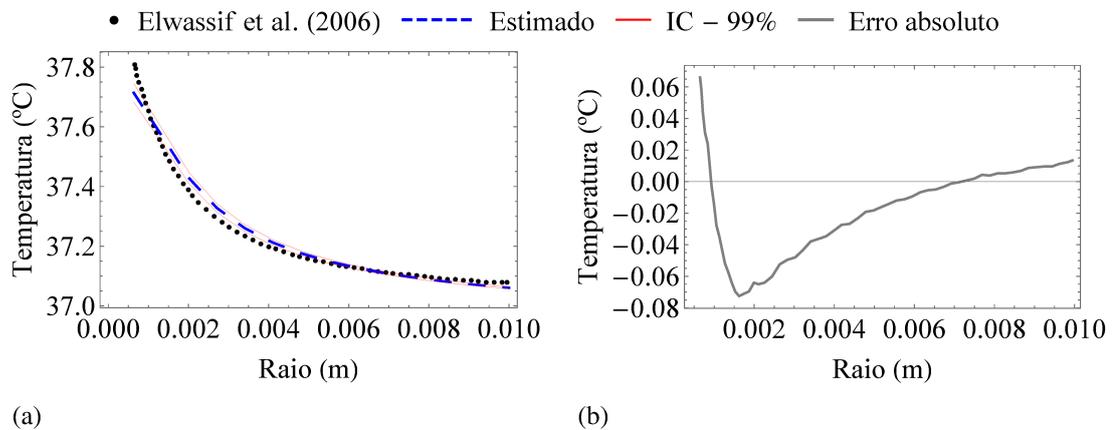
Legenda: (a) Entre os estados 500 e 10000. (b) Entre os estados 500 e 15000.

Fonte: A autora, 2023.

Considerando os valores de  $V_{rms,est}$  e  $s_{V_{rms,est}}$  obtêm-se a curva de temperatura estimada e o intervalo de credibilidade de 99%, conforme ilustrado na Figura 29a. Para calcular esse intervalo de credibilidade, utiliza-se a Eq. (101), onde  $T_c$  representa a variável estimada e  $s_c$  é o desvio padrão das partículas geradas. Além disso, na Figura 29a, é apresentada também a curva extraída dos resultados de [Elwassif et al. \(2006\)](#). Ao comparar as curvas, observa-se que o MCMC foi capaz de estimar o valor do potencial elétrico que resulta em um perfil de temperatura próximo aos dados experimentais utilizados, mesmo considerando diferentes domínios computacionais. Na Figura 29b, é exibido o resíduo ou erro absoluto entre as soluções mostradas na Figura 29a. Percebe-se que o resíduo é maior na região próxima ao eletrodo (próximo a  $r = R_1$ ), onde o modelo de [Elwassif et al. \(2006\)](#) consegue captar um pico maior de temperatura. Além disso, observa-se que o resíduo está correlacionado, possivelmente devido à diferença entre os domínios computacionais utilizados neste trabalho (Figura 24b) e o domínio computacional utilizado por [Elwassif et al. \(2006\)](#) (Figura 24a). Isso ocorre porque o modelo de [Elwassif et al. \(2006\)](#) considera a transferência de calor do tecido para o eletrodo, resultando em uma queda de temperatura mais acentuada próxima ao contorno.

$$I_c = T_c \pm 2,576s_c. \quad (101)$$

Figura 29 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 1.



Legenda: (a) Temperaturas. (b) Resíduo.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.1.3.2 Caso 2

Como mencionado anteriormente, para que o problema fique mais realista é importante contabilizar as incertezas relacionadas a  $k$  e  $\sigma$ . Para isso, foram utilizadas as informações disponibilizadas pela IT'IS *Foundation* (Hasgall et al., 2018). Na Tabela 11 estão os valores de média, desvio padrão, mínimo e máximo disponibilizados por Hasgall et al. (2018) que serão considerados como incertezas das condutividades elétrica e térmica através do uso de priori com distribuição gaussiana truncada na solução do problema inverso.

Tabela 11 - Valores dos parâmetros e suas incertezas para o caso 2.

Parâmetros	Média	Desvio Padrão	Mín	Max
Condutividade térmica ( $k$ ) em W/mK	0,51	0,02	0,49	0,54
Condutividade elétrica ( $\sigma$ ) em S/m	0,375	0,179	0,066	0,717

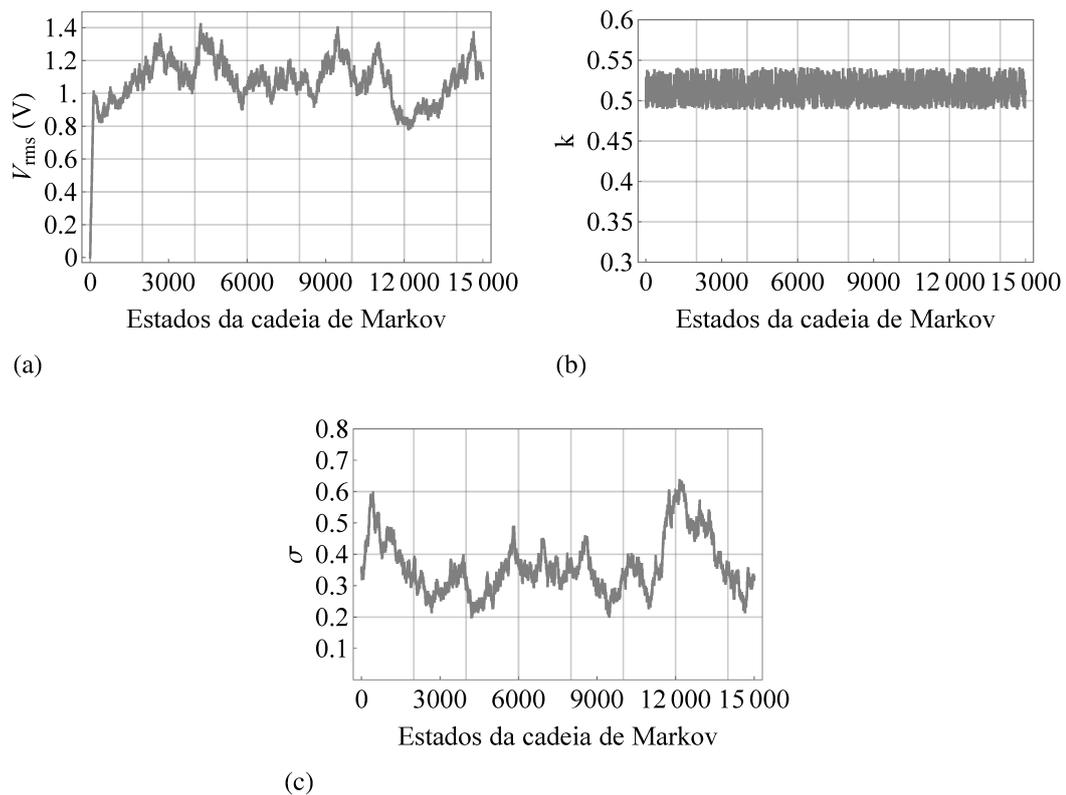
Legenda: Valores disponibilizados por Hasgall et al. (2018).

Fonte: A autora, 2023.

Novamente, o algoritmo de Metropolis-Hastings será aplicado, iniciando a cadeia com  $V_{rms, inicial} = 0$  V. Além disso, as condutividades térmica e elétrica iniciais são mantidas iguais aos valores do caso anterior:  $k_{inicial} = 0,527W/(m^{\circ}C)$  e  $\sigma_{inicial} = 0,35S/m..$  Na Figura 30, são apresentadas as cadeias de Markov obtidas para os parâmetros  $V_{rms}$ ,  $k$  e  $\sigma$ , com 15000

estados considerados. Analisando os resultados das Figuras 31a e 31c, observa-se grandes oscilações inversamente proporcionais nos valores de  $V_{rms}$  e  $\sigma$ . Se as incertezas associadas a  $\sigma$  forem excessivamente amplas, a precisão na estimativa de  $V_{rms}$  será prejudicada. Isso decorre do fato de ambos os parâmetros serem estimados simultaneamente, o que pode levar a múltiplas combinações de parâmetros sendo solução para o problema, como indicado pela dependência linear destacada na análise de sensibilidade (ver Figura 26b).

Figura 30 - Estados da cadeia de Markov considerando as incertezas da Tabela 11 para o caso 2.



Fonte: A autora, 2023.

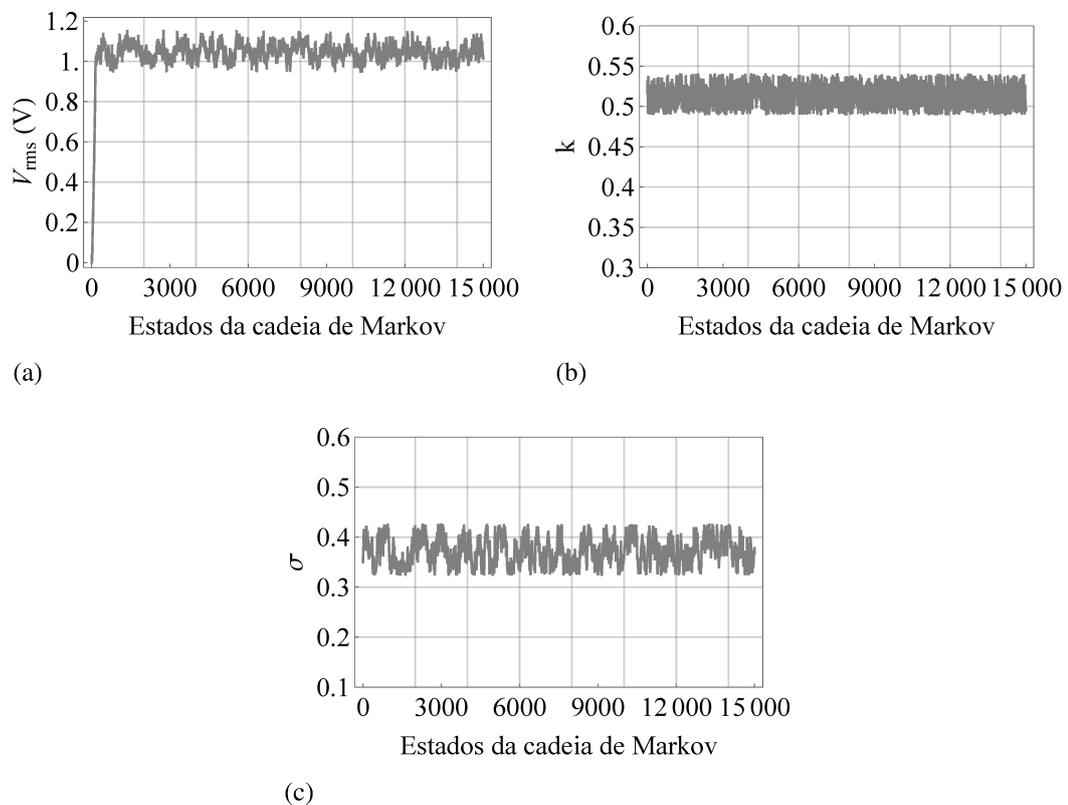
Calculando as oscilações entre os valores de  $\sigma$  mínimo e máximo da Tabela 11 com relação à média, encontram-se variações de 82% e 92%, respectivamente. Logo, para diminuir o intervalo ao qual  $\sigma$  pode oscilar, o MCMC foi novamente empregado utilizando as mesmas considerações feitas anteriormente, porém, dessa vez com  $\sigma = \sigma_{med} \pm 0,05$  que equivale a uma incerteza de 13%. Na Tabela 12 estão os novos valores utilizados. Na Figura 31 encontram-se as cadeias de Markov obtidas para os parâmetros  $V_{rms}$ ,  $k$  e  $\sigma$ , onde se percebe que o valor de  $V_{rms}$  passa a ter pequenas oscilações após alguns estados da cadeia.

Tabela 12 - Valores dos parâmetros e suas incertezas para o caso 2 com priori informativa para as condutividades térmica e elétrica.

Parâmetros	Média	Desvio Padrão	Mín	Max
Condutividade térmica ( $k$ ) em W/mK	0,51	0,02	0,49	0,54
Condutividade elétrica ( $\sigma$ ) em S/m	0,375	0,179	0,325	0,425

Fonte: A autora, 2023.

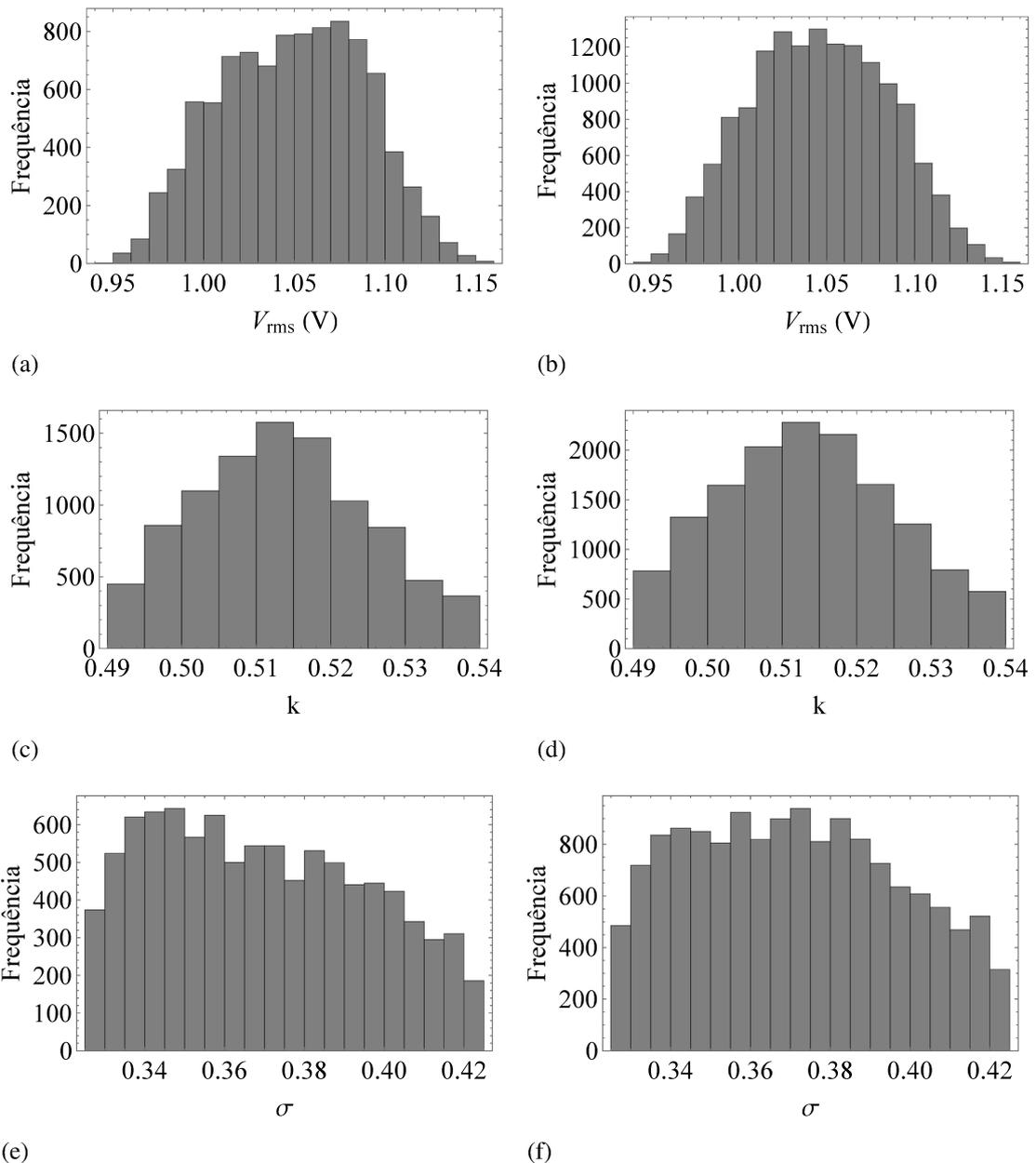
Figura 31 - Estados da cadeia de Markov para o caso 2.



Fonte: A autora, 2023.

Nas Figuras 32a, 32c e 32e, são apresentados os histogramas gerados para os valores da cadeia de Markov no intervalo entre os estados 500 e 10000, enquanto nas Figuras 32b, 32d e 32f, os histogramas para os valores da cadeia entre 500 e 15000. Esses resultados demonstram uma boa convergência das cadeias de Markov, pois os histogramas mantêm as mesmas características. Além disso, é possível observar a característica da distribuição gaussiana truncada para os parâmetros  $k$  e  $\sigma$ , conforme atribuído nas informações à priori. Desprezando os 500 estados de *burn-in*, foi obtida uma média de  $V_{rms,est} = 1,050$  V e um desvio padrão de  $s_{V_{rms,est}} = 0,069$  V, com um tempo computacional de cerca de 40 minutos.

Figura 32 - Histogramas para o caso 2 considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov.



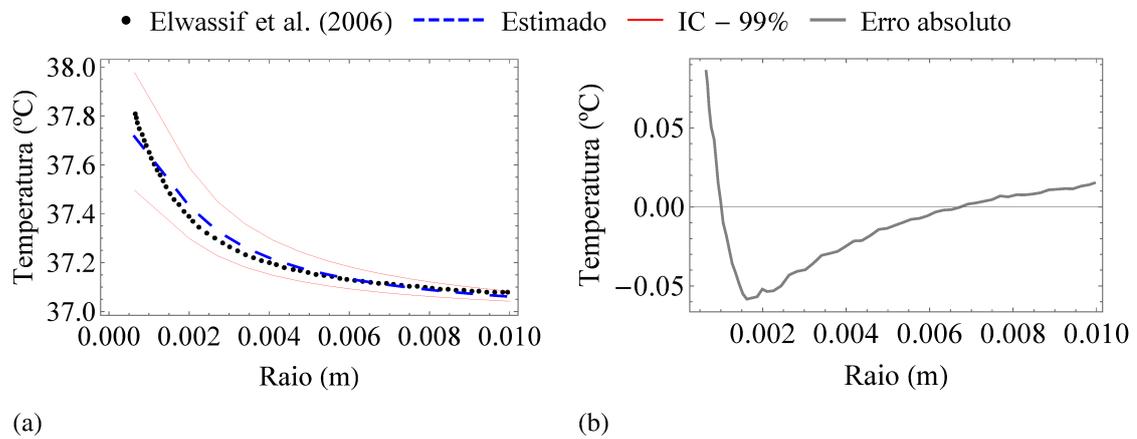
Legenda: (a) Para  $V_{rms}$  entre os estados 500 e 10000. (b) Para  $V_{rms}$  entre os estados 500 e 15000.  
(c) Para  $k$  entre os estados 500 e 10000. (d) Para  $k$  entre os estados 500 e 15000.  
(e) Para  $\sigma$  entre os estados 500 e 10000. (f) Para  $\sigma$  entre os estados 500 e 15000.

Fonte: A autora, 2023.

Levando em conta os valores de  $V_{rms,est}$  e  $sV_{rms,est}$ , a Figura 33a mostra a curva de temperatura estimada, juntamente com o intervalo de credibilidade de 99% e a curva extraída dos resultados de [Elwassif et al. \(2006\)](#). Já na Figura 33b, é apresentado o resíduo entre as soluções mostradas na Figura 33a, destacando-se a correlação no resíduo devido à diferença entre os

domínios computacionais utilizados neste trabalho e o domínio computacional empregado por [Elwassif et al. \(2006\)](#).

Figura 33 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 2.



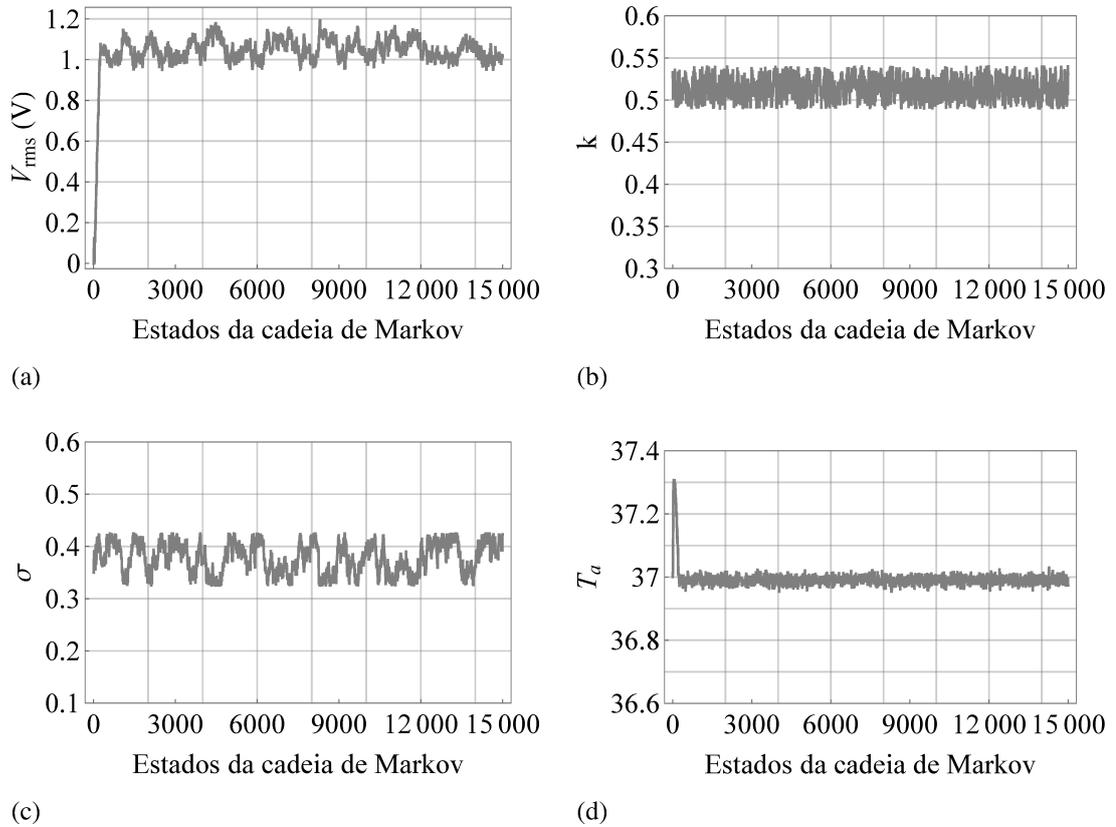
Legenda: (a) Temperaturas. (b) Resíduo.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.1.3.3 Caso 3

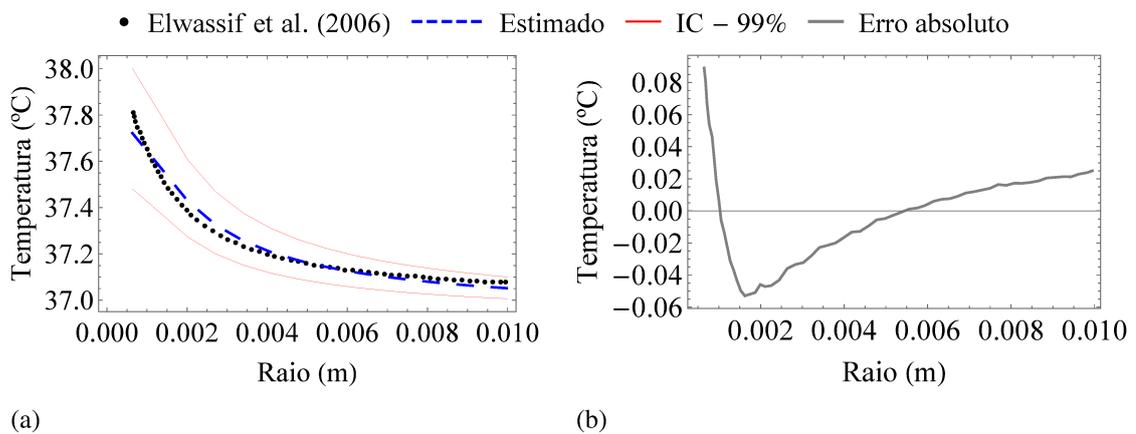
Além de levar em consideração as incertezas relacionadas a propriedades do cérebro, pode ser interessante considerar incertezas associadas a temperatura medida nos contornos ( $T_a$ ), pois dispositivos de medição tem incertezas associadas. Com isso, será considerado que  $T_a$  possui incerteza com distribuição gaussiana, sendo a média  $T_{a,med} = 37$  °C e o desvio padrão 0,05 °C. Além disso, para inicialização da cadeia considerou-se  $T_{a,inicial} = 37$  °C. Os demais parâmetros foram considerados com as mesmas informações utilizadas no caso anterior. Na Figura 34 encontram-se as cadeias de Markov obtidas para os parâmetros  $V_{rms}$ ,  $k$ ,  $\sigma$  e  $T_a$  considerando 15000 estados onde observa-se a convergência das cadeias aproximadamente em 500 estados. Logo, desprezando os 500 estados de *burn-in*, foi encontrada uma média de  $V_{rms,est} = 1,05$  V e um desvio padrão  $s_{V_{rms,est}} = 0,05$  V. A Figura 35a mostra a curva de temperatura obtida com o MCMC considerando os valores de  $V_{rms,est}$ , o intervalo de credibilidade de 99% e a curva extraída dos resultados apresentados por [Elwassif et al. \(2006\)](#). Na Figura 35b observa-se o resíduo entre as soluções que, novamente, encontra-se correlacionado. Na Figura 36 encontram-se os histogramas gerados para 15000 estados na cadeia de Markov, onde nota-se as características das distribuições utilizadas para os parâmetros.

Figura 34 - Estados da cadeia de Markov para o caso 3.



Fonte: A autora, 2023.

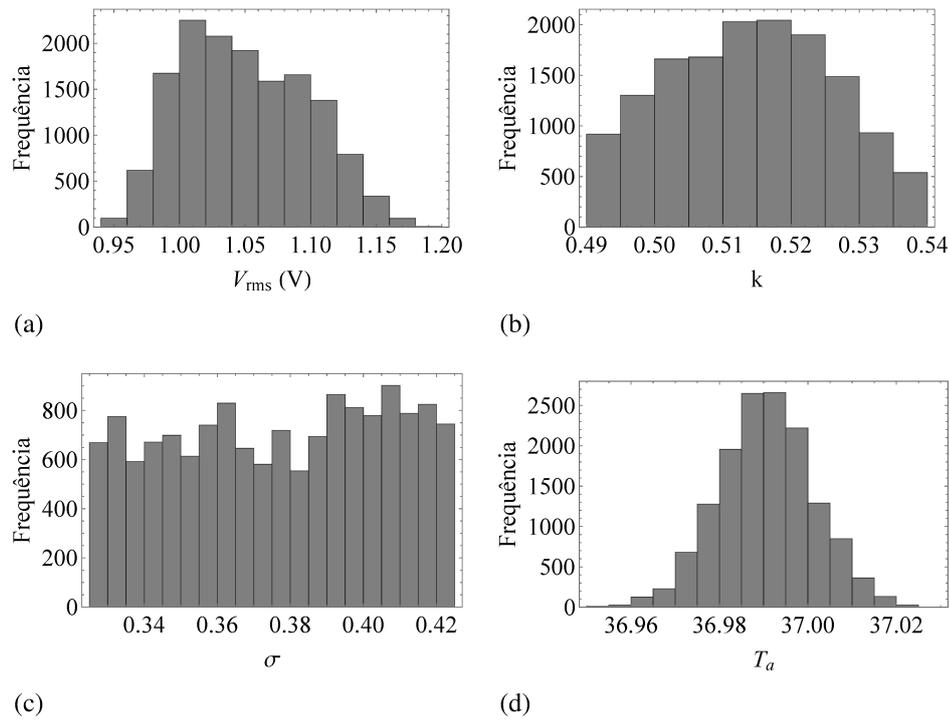
Figura 35 - Campos de temperatura e resíduo entre as soluções do caso 3.



Legenda: (a) Temperaturas. (b) Resíduo.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 36 - Histogramas para o caso 3 considerando 15000 estados na cadeia de Markov.



Fonte: A autora, 2023.

A Tabela 13 mostra os valores estimados para o potencial elétrico em cada um dos casos. Comparando os valores de  $V_{rms,est}$  e  $s_{V_{rms,est}}$  dos casos 2 e 3 percebe-se que a média permaneceu a mesma e o desvio padrão diminuiu ao considerar incertezas em  $T_a$ . Já ao comparar os casos 1 e 3 a média difere cerca de 5%, enquanto o desvio padrão foi maior ao considerar as incertezas de  $k$ ,  $\sigma$  e  $T_a$ . Daqui em diante, os valores obtidos no caso 3 ( $V_{rms,est} = 1,05$  V e  $s_{V_{rms,est}} = 0,05$  V) serão utilizados nas soluções. Portanto, ao aplicar o potencial elétrico  $V_{rms,est} = 1,05$  V ao domínio da Figura 24b, o perfil de temperatura obtido terá valores próximos aos resultados de [Elwassif et al. \(2006\)](#), que aplica o potencial elétrico  $V_{rms} = 1,561$  V ao domínio da Figura 24a. O erro relativo percentual entre os potenciais é de 33%. Nas próximas seções serão apresentadas as soluções dos problemas inversos utilizando o modelo matemático transiente e considerando as informações à priori relacionadas aos seus parâmetros.

Tabela 13 - Valores de potencial elétrico estimado para cada um dos casos analisados.

Casos	$V_{rms,est}$	$s_{V_{rms,est}}$
1	1,09 V	0,009 V
2	1,05 V	0,069 V
3	1,05 V	0,050 V

Fonte: A autora, 2023.

## 6.2 Análise do perfil de temperatura obtido utilizando filtros de partículas

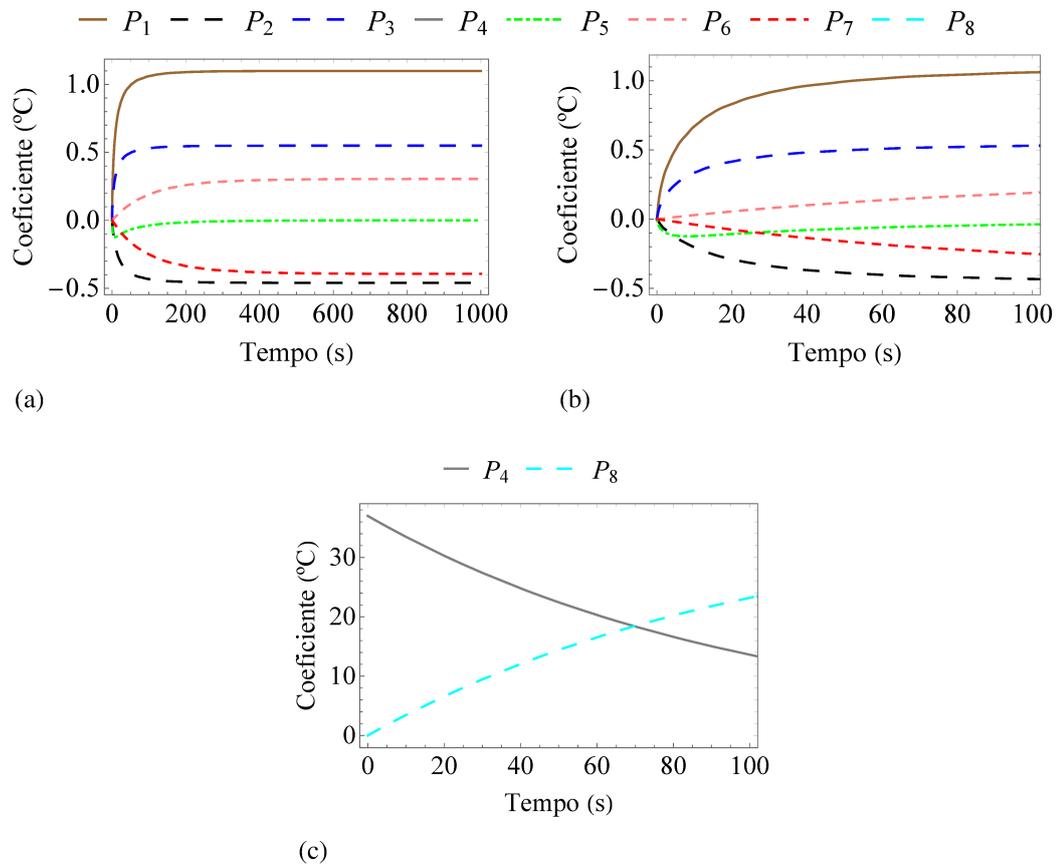
Nessa etapa, o intuito é realizar a estimativa sequencial do campo de temperatura interna do cérebro usando problema de estimação de estado com métodos de filtro de partículas. Primeiramente, na subseção 6.2.1, será realizada a análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo matemático ao longo do tempo para definir quais parâmetros podem ser estimados simultaneamente. Posteriormente, na subseção 6.2.2 será investigada a influência dos parâmetros no comportamento do campo de temperatura através do método de Monte Carlo (MC). Por fim, na subseção 6.2.3, encontram-se os resultados para a estimativa do campo de temperatura obtido utilizando os filtros de partículas SIR, ASIR e de Liu & West.

### 6.2.1 Análise de sensibilidade

Considerando o problema em regime transiente, será realizada a análise de sensibilidade dos parâmetros ao longo do tempo, utilizando os coeficientes de sensibilidade modificados dos parâmetros ( $P_j$ ), conforme descrito na seção 4.3. Como os parâmetros do modelo matemático que aparecem sendo multiplicados são linearmente dependentes, eles devem ser estimados juntos. Portanto, dividiu-se em oito grupos, sendo eles:  $P_1 = V_{rms}$ ,  $P_2 = k$ ,  $P_3 = \sigma$ ,  $P_4 = T_a$ ,  $P_5 = \rho c_p$ ,  $P_6 = Q_m$ ,  $P_7 = \rho_b c_b \omega_b$  e  $P_8 = T_b$ .

Na Figura 37 são apresentadas as curvas ao longo do tempo para os coeficientes de sensibilidade modificados de cada grupo de parâmetros em  $r = R_1$  e  $z = H/2$ , considerando os contatos 2 e 3 ativos. Os coeficientes de sensibilidade de  $P_4$  e  $P_8$  (Figura 37c) foram plotados separadamente, pois atingem maiores valores de  $P_j$  e atrapalhariam a visualização do comportamento dos demais parâmetros. A Figura 37a mostra o comportamento dos coeficientes ao longo de 1000 segundos na posição central do eletrodo ( $R_1, H/2$ ). Nessa caso, percebe-se que os coeficientes atingem o estado estacionário rapidamente e se tornam linearmente dependentes. Então, considerando os 100 segundos iniciais, foi plotada a Figura 37b. Considerando esse grupo de parâmetros, o coeficiente  $P_1$ , relacionado a  $V_{rms}$ , apresenta maior sensibilidade e, possivelmente, pode ser estimado na solução de problema inverso. O coeficiente  $P_3$ , relacionado a  $\sigma$ , apesar de atingir valor menor, tem o mesmo comportamento do coeficiente  $P_1$ , com isso  $\sigma$  e  $V_{rms}$  não poderão ser estimados simultaneamente, pois seus coeficientes possuem dependência linear. Já o coeficiente  $P_5$ , que representam a influência de  $\rho c_p$  tem baixa magnitude em todo tempo analisado, logo, possui menor sensibilidade e provavelmente não será estimado com precisão. Além disso, os coeficientes  $P_6$  e  $P_7$  relacionados, respectivamente, a taxa metabólica de calor e ao fluxo sanguíneo são linearmente dependentes e não podem ser estimados simultaneamente. Observando a Figura 37c percebe-se que os coeficientes  $P_4$  e  $P_8$  relacionados, respectivamente, a  $T_a$  e  $T_b$  alcançam maiores valores de  $P_j$  e, portanto, possuem maior sensibilidade quando comparado aos demais.

Figura 37 - Coeficientes de sensibilidade modificados ao longo do tempo.



Legenda: (a) e (b) Parâmetros  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$ ,  $P_5$  e  $P_6$  ao longo do tempo em  $r = R_1$  e  $z = H/2 = 0,025$  m. (c) Parâmetros  $P_4$  e  $P_8$  ao longo do tempo.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.2.2 Análise sob incertezas com o método de Monte Carlo

Para verificar a influência dos parâmetros na obtenção do perfil de temperaturas ao longo do tempo foram realizadas simulações sob incerteza conforme os passos descritos na seção 4.4. As propriedades físicas do modelo matemático foram consideradas com incertezas a partir de valores de máximo, mínimo, média e desvio padrão conforme dados da Tabela 14. As primeiras oito linhas mostram os dados obtidos por [Hasgall et al. \(2018\)](#). A segunda coluna, nomeada n° de trabs., refere-se ao número de trabalhos encontrados por [Hasgall et al. \(2018\)](#) para obter os valores de média, desvio padrão, máximo e mínimo disponibilizados. Os valores de média para  $T_b$  e  $T_a$  foram extraídos de [Elwassif et al. \(2006\)](#) e assumindo que um termopar com 0, 10 °C de precisão foi utilizado na medição, o desvio padrão de 0, 1 °C foi considerado. Os valores de  $V_{rms}$  vieram da seção 6.1. Ademais, considera-se  $Q_{ext}(r, z, V)$  com distribuição gaussiana com

média obtida a partir da Eq. (9) e desvio padrão de 1 % da média (Pereira et al., 2023).

Tabela 14 - Informações estatísticas sobre os parâmetros utilizados na análise sob incerteza.

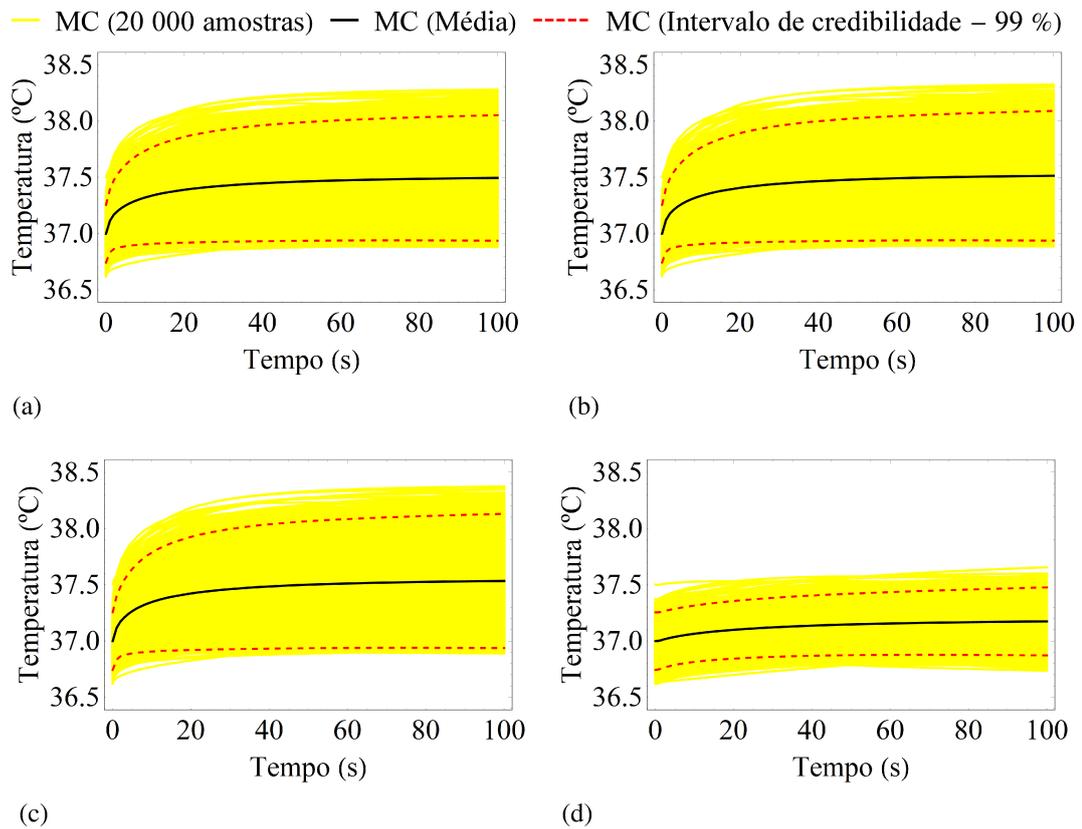
Parâmetros	$n^\circ$ de trabs.	Média	Desvio Padrão	Mín	Max	Referências
$\sigma$ (S/m)	91	0,375	0,179	0,066	0,717	(Hasgall et al., 2018)
$k$ (W/mK)	4	0,51	0,02	0,49	0,54	(Hasgall et al., 2018)
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2	1046	6	1041	1050	(Hasgall et al., 2018)
$c_p$ (J/kgK)	2	3630	74	3578	3682	(Hasgall et al., 2018)
$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )	4	1050	17	1025	1060	(Hasgall et al., 2018)
$c_b$ (J/kgK)	3	3617	301	3300	3900	(Hasgall et al., 2018)
$\omega_b$ (1/s)	43	0,010	0,002	0,007	0,017	(Hasgall et al., 2018)
$Q_m$ (W/m <sup>3</sup> )	43	11893	209,2	8755	20784	(Hasgall et al., 2018)
$T_b$ (°C)	-	36,7	0,10	-	-	(Elwassif et al., 2006, 2012)
$T_a$ (°C)	-	37,0	0,10	-	-	(Elwassif et al., 2006, 2012)
$V_{rms}$ (V)	-	1,05	0,05	-	-	Obtido na seção 6.1

Fonte: A autora, 2023.

Nas Figuras 38 e 39 estão os resultados das simulações sob incerteza para 20 000 amostras com os contatos 2 e 3 ativos. As curvas em amarelo são as curvas para cada uma das amostras, a curva em preto representa a média das soluções e as curvas em vermelho são os intervalos de 99% de credibilidade. A Figura 38 mostra a variação ao longo do tempo em diferentes posições de  $z$  considerando  $r = R_1$ . As Figuras 38a e 38b mostram soluções na região de aplicação do potencial, sendo a 38a na posição central do contato 2 e a 38b na posição central do contato 3. A Figura 38c representa a posição do sensor na região central entre os contatos 2 e 3. Já a Figura 38d considera a posição do contato 4, distante da região onde o potencial está sendo aplicado. O comportamento da solução para diferentes posições em  $r$ , no contato 2 pode

ser observado na Figura 39, sendo a Figura 39a próxima da aplicação do potencial e a 39d a mais distante. Com isso, percebe-se que a variação das curvas é mais significativa nas regiões próximas à aplicação do potencial, pois é onde há maior variação no perfil de temperatura.

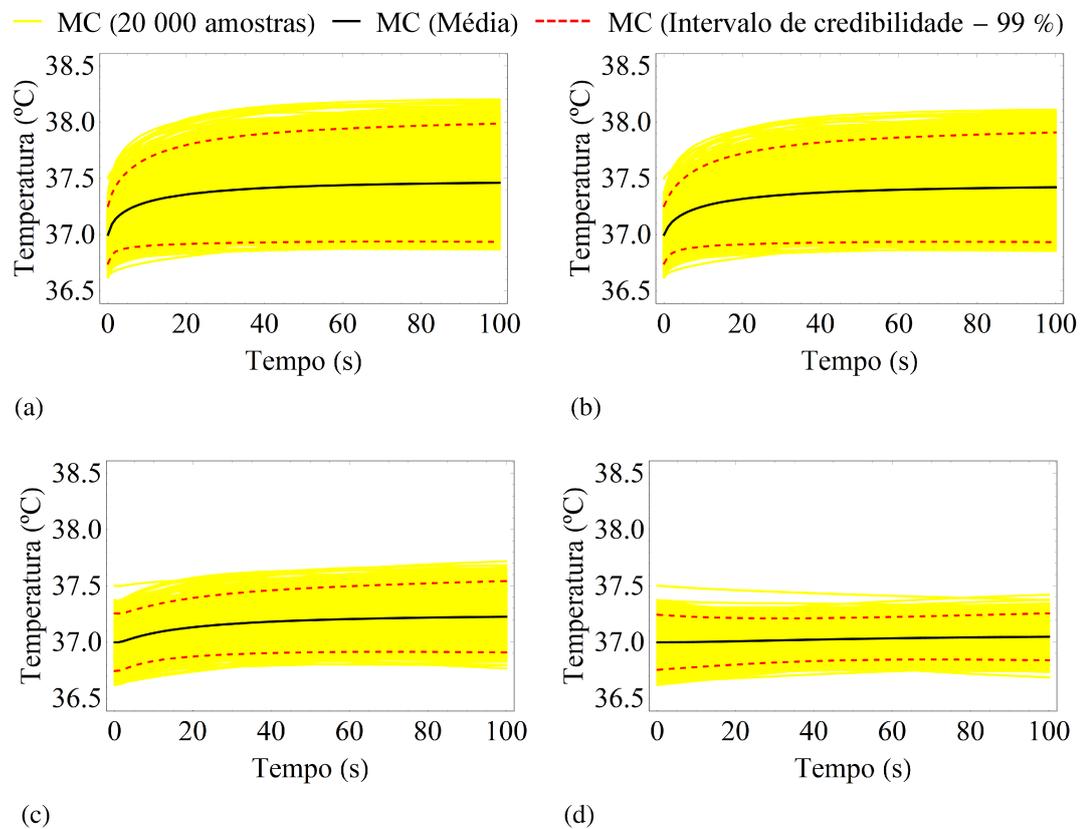
Figura 38 - Curvas de temperatura considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para  $r = R_1 = 0,635$  mm.



Legenda: (a) Em  $z = 24$  mm (posição central no contato 2 que está ativo no eletrodo). (b) Em  $z = 26$  mm (posição central no contato 3 que está ativo no eletrodo). (c) Em  $z = 25$  mm (posição do sensor em  $H/2$ ). (d) Em  $z = 28$  mm (posição central no contato 4 que está inativo no eletrodo).

Fonte: A autora, 2023.

Figura 39 - Curvas de temperatura considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para  $z = 24$  mm.

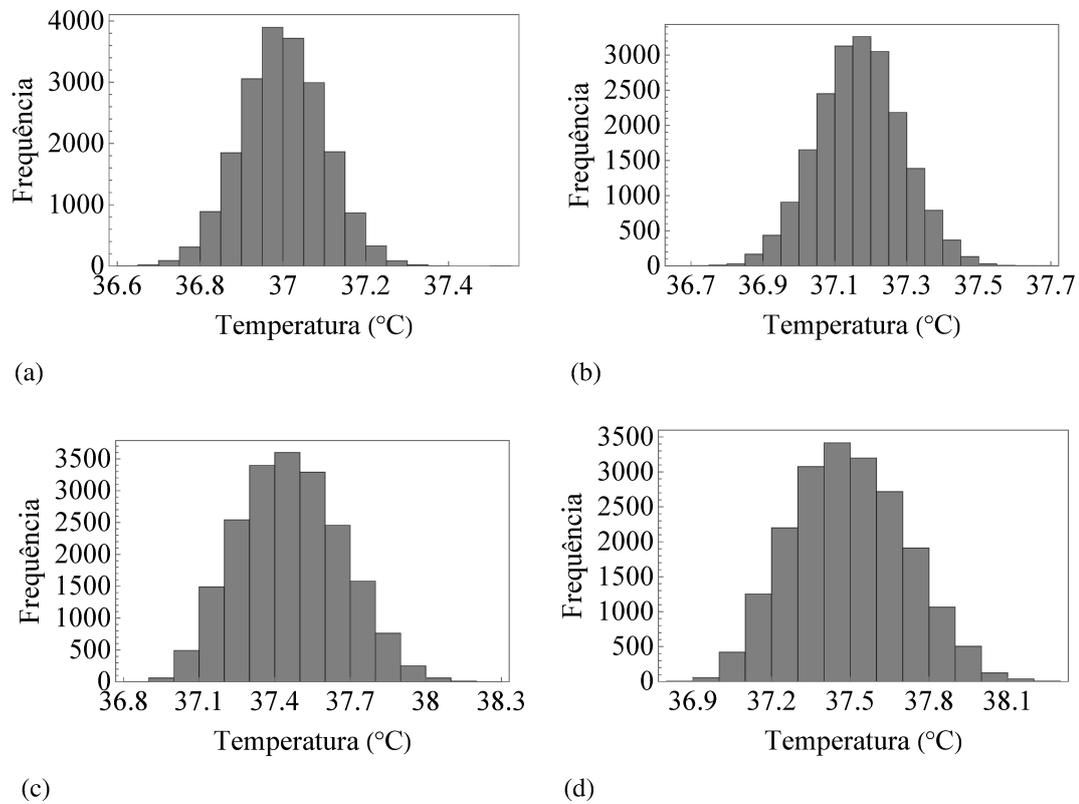


Legenda: (a) Em  $r = 0,8$  mm. (b) Em  $r = 1$  mm. (c) Em  $r = 2$  mm. (d) Em  $r = 5$  mm.

Fonte: A autora, 2023.

De acordo com os dados disponibilizados na Tabela 14 os parâmetros  $\sigma$ ,  $k$ ,  $\rho$ ,  $c_p$ ,  $\rho_b$ ,  $c_b$ ,  $\omega_b$  e  $Q_m$  possuem distribuição gaussiana truncada entre os valor de máximo e mínimo da tabela e os parâmetros  $T_b$ ,  $T_a$  e  $V_{rms}$  possuem distribuição gaussiana. Com isso, considerando a posição do eletrodo 2 ( $r = R_1$ ,  $z = 24$  mm) foram plotados os histogramas da Figura 40 para a temperatura em diferentes instantes de tempo, onde se identifica a característica gaussiana em todos os pontos analisados. Ao investigar outros pontos do domínio computacional, a mesma característica gaussiana foi encontrada para a temperatura ao longo do tempo.

Figura 40 - Histogramas considerando as simulações diretas de Monte Carlo com 20000 amostras para  $r = R_1 = 0,635$  mm  $z = 24$  mm.



Legenda: (a) Em  $t = 0,0$  s. (b) Em  $t = 2,0$  s. (c) Em  $t = 50$  s. (d) Em  $t = 100$  s.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.2.3 Solução com filtros de partículas

Nesta seção, visando simular a solução do problema inverso de estimativa de estado, considerou-se medidas simuladas de temperatura. Para tal propósito, 61 medidas foram obtidas a cada segundo na posição do sensor, em  $(r = R_1, z = H/2)$  e, em seguida, acrescentou-se a essas medidas ruídos aleatórios para simular as medidas experimentais de temperatura, usando uma distribuição normal com média zero e desvio padrão constante,  $s_{exp}$ . Com o intuito de diminuir a possibilidade de crime inverso, as medidas utilizadas para os dados experimentais com ruído foram obtidas com o MDF e, na solução do problema inverso, utilizou-se a rotina NDSolve. A partir dessas temperaturas, os problemas de estimativa de estado foram resolvidos usando um único ponto de medição dentro do domínio. A escolha das incertezas nos modelos de evolução e observação foram, por simplicidade, arbitrariamente assumidas como aditivas, gaussianas, não correlacionadas e com média zero. Para melhor compreensão da influência dos ruídos, foram analisados três diferentes desvios padrão no modelo de observação ( $s_{exp} =$

0,05 °C,  $s_{exp} = 0,1$  °C e  $s_{exp} = 0,2$  °C) e no modelo de evolução ( $s_T = 0,025$  °C e  $s_T = 0,1$  °C). Os valores de desvio padrão foram escolhidos de forma a analisar casos com pequenas variações e casos mais realistas com desvio padrão de acordo com a incerteza encontrada em aparelhos precisos de medição de temperatura. Porém, esses desvios não devem ser elevados pois a diferença máxima de temperatura durante o estudo é de aproximadamente 1 °C, logo o desvio de  $s_{exp} = 0,2$  °C representa 20% de incerteza. Além disso, considerou-se o termo fonte de calor resultante do aquecimento com ruído gaussiano aditivo e seu modelo de evolução é dado por (Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien et al., 2017):

$$Q_{ext,k}^i(r, z) = Q_{ext,k-1}^i(r, z) + \epsilon_k^i(r, z), \quad (102)$$

onde  $\epsilon_k^i(r, z)$  tem média zero e desvio padrão 1% de  $Q_{ext,k-1}^i(r, z)$ . Para os algoritmos SIR e ASIR, assume-se que as incertezas relacionadas aos parâmetros são contabilizadas nos vetores de ruído  $\mathbf{v}_k$  e  $\mathbf{n}_k$ . No algoritmo de Liu & West, por outro lado, supõe-se que os parâmetros possuem incertezas gaussianas com média e desvio padrão listados na Tabela 14.

Para verificar o efeito do número de partículas utilizadas nos algoritmos foi feito o cálculo do erro quadrático médio entre as temperaturas estimada e experimental, dado por (Varon; Orlande; Eliçabe, 2016; Lamien et al., 2017):

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_{p=1}^P (T_{estimada,p} - T_{exata,p})^2}{N_p}}, \quad (103)$$

sendo que  $T_{estimada,p}$  e  $T_{exata,p}$  denotam, respectivamente, as temperaturas estimadas no problema inverso e as temperaturas obtidas com a solução MDF, e  $N_p = 61$  é o número total de passos de tempo em que as temperaturas foram comparadas. Os erros RMS serão relatados em seus valores de média e desvio padrão, obtidos com 10 execuções de cada algoritmo, para evitar qualquer viés resultante das medidas simuladas. Em contrapartida, os tempos computacionais mostrados referem-se a uma única execução dos algoritmos.

Nos tópicos a seguir estão os resultados obtidos considerando os diferentes filtros de partículas.

### 6.2.3.1 Filtro SIR

A solução com o filtro SIR foi obtida conforme os passos descritos no tópico 4.2.2.2. A Tabela 15 mostra os passos do algoritmo SIR aplicado ao problema DBS. Para iniciar o procedimento, considerou-se que  $T_1^i = T_a$ . Em seguida, calculou-se os pesos das partículas utilizando as informações referentes as medidas experimentais. Posteriormente, a reamostragem ou seleção das partículas foi realizada. No passo 4 calculou-se a média e o desvio padrão da solução. No passo 5 considera-se a média obtida como condição de contorno para resolver o problema

direto e se obter a temperatura no tempo seguinte levando em consideração as informações sobre o ruído do modelo de evolução. O processo se repete até o tempo final estipulado.

Tabela 15 - Algoritmo SIR aplicado ao problema com DBS.

---

**Passo 1 - Inicialização:**

Faça  $k=1$ ;  
 Para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial  $T_1^i = T_a$ .

---

**Passo 2 - Avaliação dos pesos:**

Calcule os pesos:  $w_k^i = (2\pi)^{-I/2} |s_{exp}^2|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - T_k^i)^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - T_k^i) \right]$ ;  
 Calcule o peso total:  $T_w = \sum_{i=1}^N w_k^i$ ;  
 Normalize os pesos:  $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 3 - Reamostragem ou Seleção:**

Construa a soma dos pesos acumulativos  $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$  com  $c_0 = 0$ ;  
 Tome  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;  
 Para  $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:  
     Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ ;  
     Enquanto  $u_j > c_i$ , faça  $i = i + 1$ ;  
     Designe as partículas  $T_k^j = T_k^i$ ;  
     Designe os pesos para  $w_k^j = N^{-1}$ .

---

**Passo 4 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:**

$$\bar{T}_k = \sum_{i=0}^N T_k^i \hat{w}_k^i; \quad s_k = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=0}^N \hat{w}_k^i (T_k^i - \bar{T}_k)^2}.$$


---

**Passo 5 - Evolução do Modelo:**

Faça  $k = k + 1$ ;  
 Se  $k > k_{final} + 1$ , então pare;  
 Se não, resolva o problema direto utilizando a NDSolve para  $i = 1, 2, \dots, N$  com condição inicial  $\bar{T}_{k-1}$  e faça  $T_k^i = T(r_k, z_k, t_k) + N[0, s_T]$ .

---

**Passo 6 - Retorne para o Passo 2.**

---

Fonte: Adaptado de [Arulampalam et al. \(2002\)](#).

Na Tabela 16 estão os resultados obtidos com diferentes quantidades de partículas, eletrodos 2 e 3 ativos e três níveis de ruído diferentes,  $s_{exp} = 0,05$  °C  $s_{exp} = 0,1$  °C e  $s_{exp} = 0,2$  °C com  $s_T = 0,025$  °C e  $s_T = 0,1$  °C. Com os primeiros quatro casos da Tabela 16, para os resultados com  $N = 50, 100, 200$  e  $300$  partículas,  $s_T = 0,025$  °C e  $s_{exp} = 0,05$  °C, percebe-se que ao aumentar o número de partículas, o tempo de CPU aumenta e o erro RMS não apresenta muitas variações. Na Figura 41 estão os campos de temperatura obtidos considerando os diferentes valores de  $N$  em  $t = 60$  segundos, onde nota-se que ao aumentar o número de partículas os contornos de temperatura estão mais regulares. A variação é maior de  $N = 50$

para  $N = 100$ , então, escolhendo  $N = 100$ , foram obtidos novos resultados com diferentes desvios padrão para os modelos de evolução e observação, como pode ser visto nos casos 5 à 9 da Tabela 16. Na Figura 42 encontram-se as curvas obtidas com os problemas diretos NDSolve e MDF, as medidas experimentais, as temperaturas estimas e os intervalos de credibilidade de 99% para os casos com diferentes números de partículas, onde nota-se que não há grande variação na temperatura estimadas com as diferentes quantidades de partículas. Além disso, a tabela mostra que ao aumentar o ruído do modelo de evolução (casos 7, 8 e 9), o erro RMS aumenta, pois há maior variação na curva de temperatura estimada, conforme pode ser melhor observado na Figura 43 que mostra a comparação entre as temperaturas estimadas para os diferentes casos com  $N = 100$  partículas.

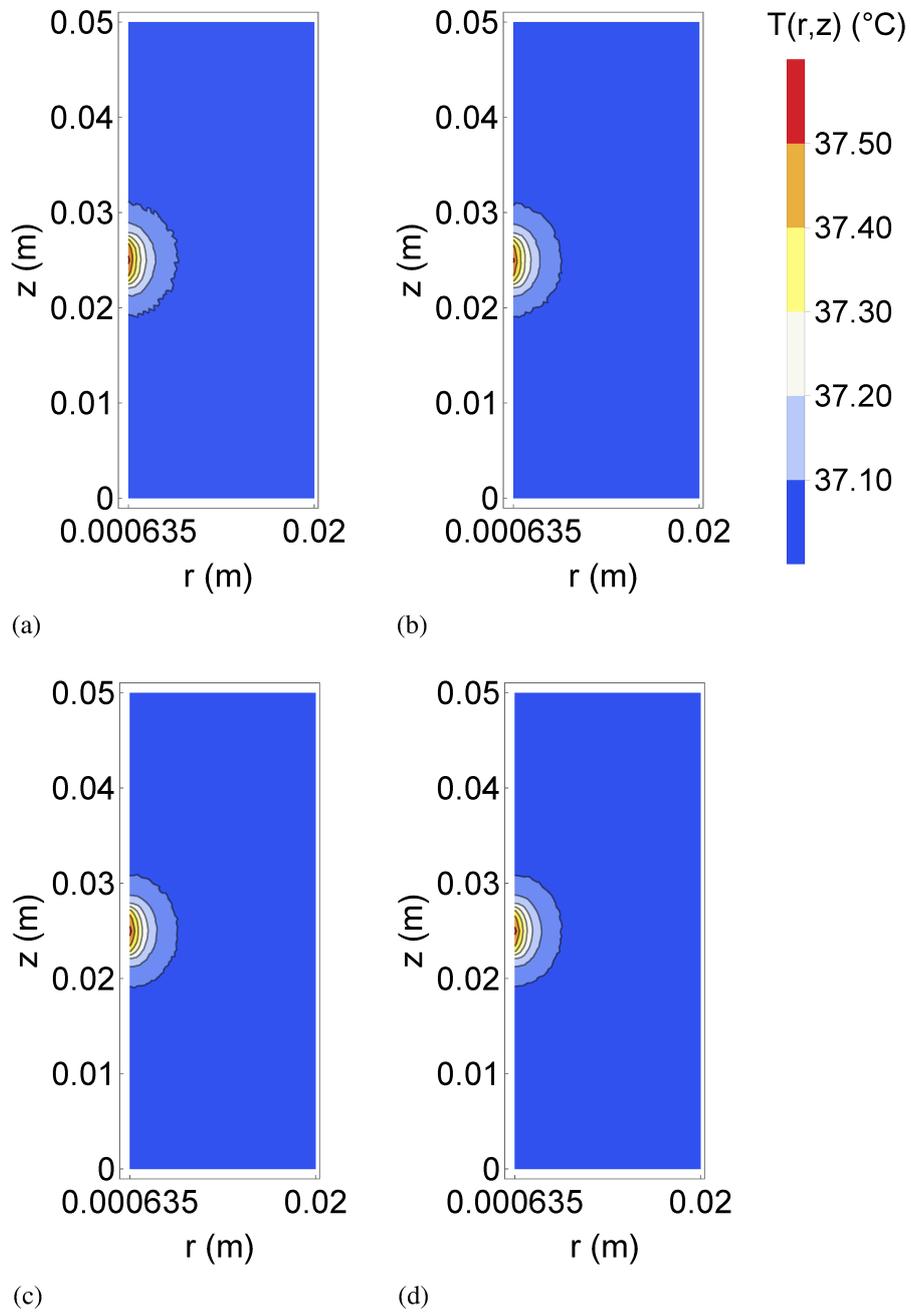
Tabela 16 - Erros RMS e tempo de CPU para o algoritmo SIR.

Casos	$s_T$ (°C)	$s_{exp}$ (°C)	N	Média do erro RMS ( $\times 10^{-2}$ °C)	Desvio padrão do erro RMS ( $\times 10^{-3}$ °C)	Tempo de CPU (min) <sup>1</sup>
1	0,025	0,05	50	2,116	1,905	12
2	0,025	0,05	100	1,897	1,560	25
3	0,025	0,05	200	1,873	1,486	55
4	0,025	0,05	300	1,922	1,445	80
5	0,025	0,10	100	1,617	1,643	25
6	0,025	0,20	100	1,236	2,651	25
7	0,10	0,05	100	4,572	7,577	25
8	0,10	0,10	100	7,198	6,665	25
9	0,10	0,20	100	7,342	4,226	25

Legenda: <sup>1</sup> Intel(R) Core(TM) i7-11390H@3,40 GHz com 16 GB de RAM.

Fonte: A autora, 2023.

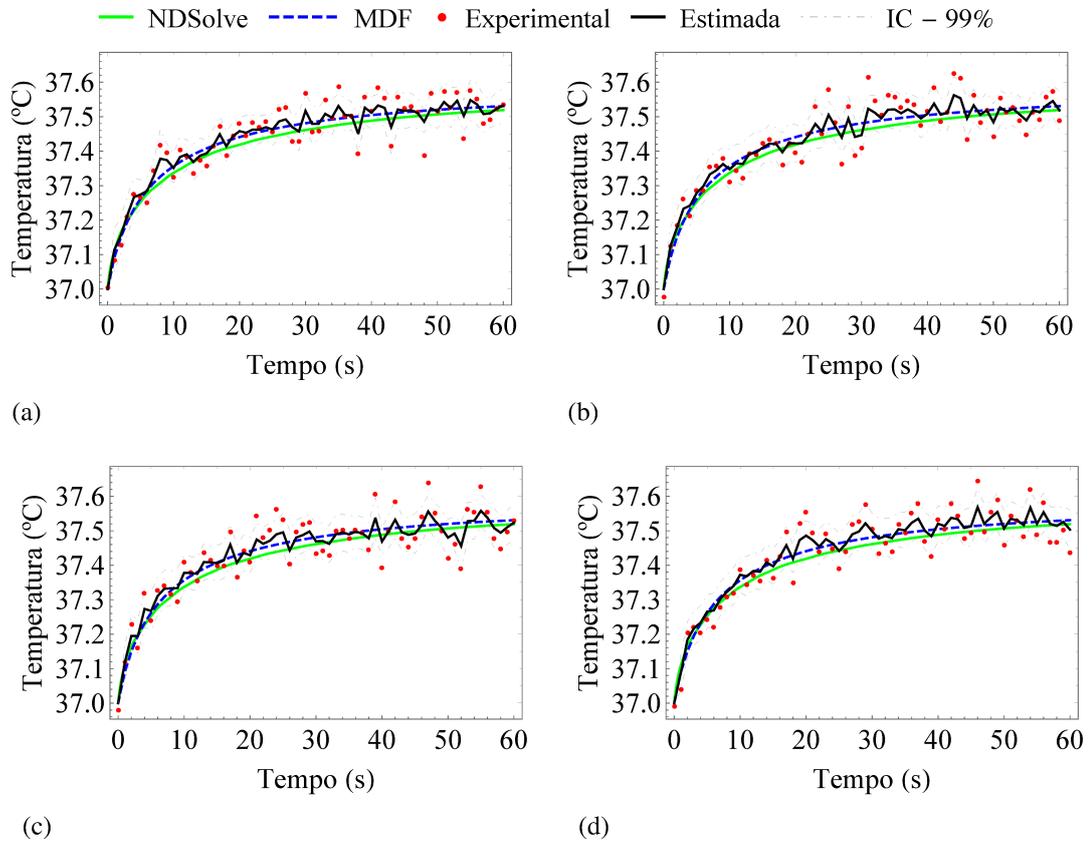
Figura 41 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro SIR com diferentes quantidades de partículas.



Legenda: (a)  $N=50$ . (b)  $N=100$ . (c)  $N=200$ . (d)  $N=300$ .

Fonte: A autora, 2023.

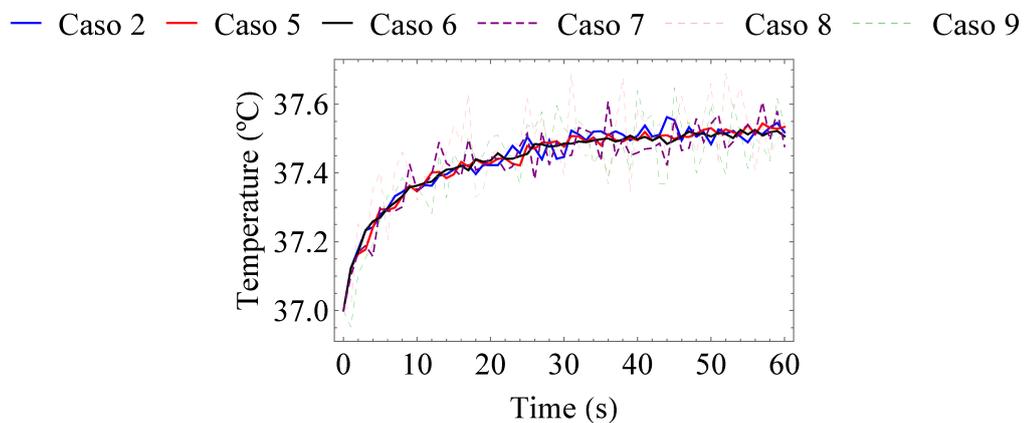
Figura 42 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com  $s_T = 0,025 \text{ }^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05 \text{ }^\circ\text{C}$ .



Legenda: (a)  $N = 50$ . (b)  $N = 100$ . (c)  $N = 200$ . (d)  $N = 300$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 43 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro SIR para os casos com  $N = 100$  partículas.



Fonte: A autora, 2023.

Os valores máximos de temperatura obtidos com cada um dos casos do algoritmo SIR podem ser vistos na Tabela 17. Percebe-se que os casos de 1 a 6, que possuem desvio padrão de  $s_T = 0,025$  °C para o modelo de evolução, obtêm valores máximos praticamente iguais, enquanto os casos 7, 8 e 9 que possuem  $0,1$  °C alcançam maiores valores de temperatura máxima, pois quanto maior o desvio padrão do modelo de evolução, maior será o intervalo em que a temperatura varia, logo valores mais altos podem ser alcançados.

Tabela 17 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo SIR.

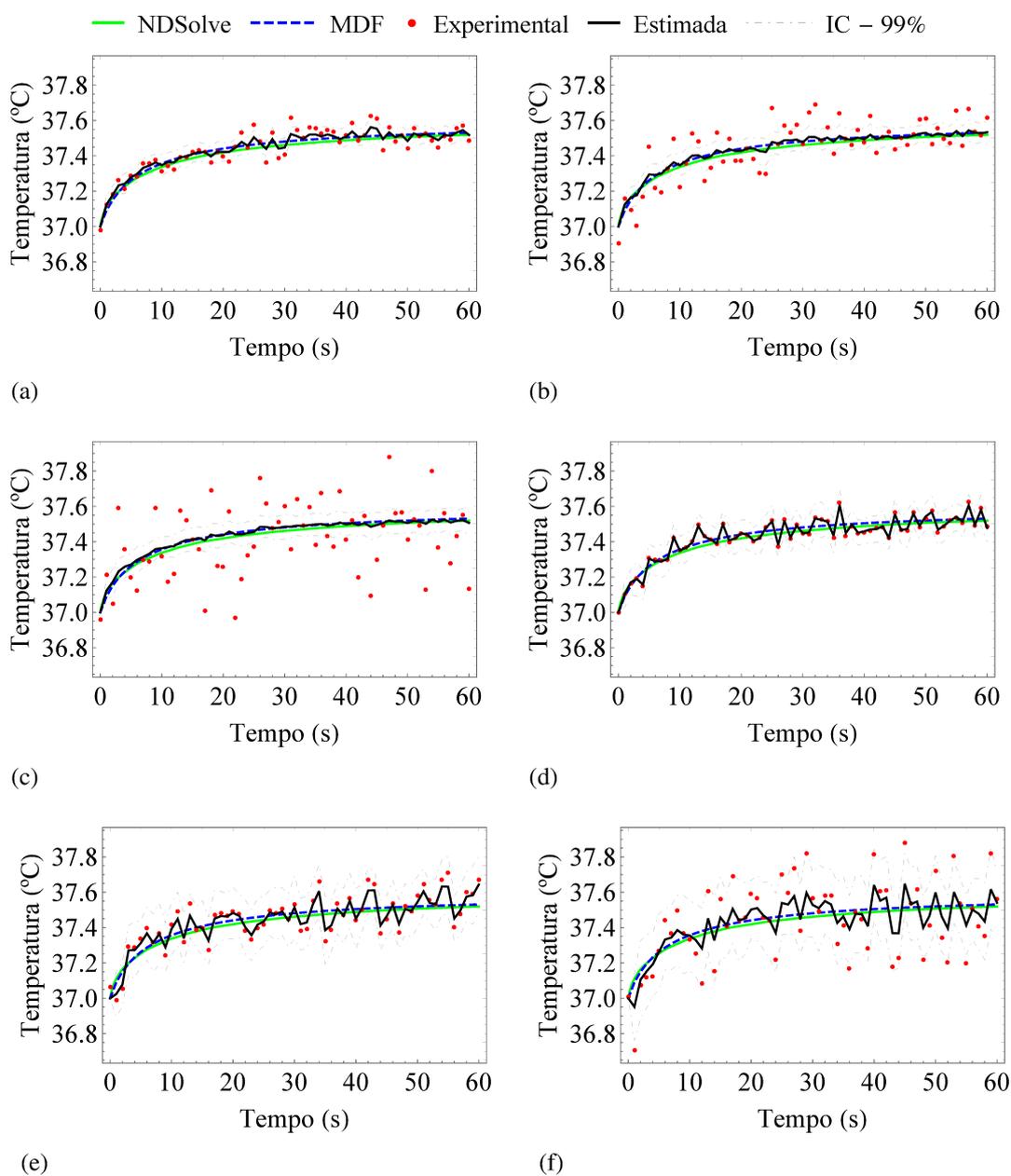
Casos	Temperatura máxima (°C)
1	37,55
2	37,56
3	37,56
4	37,57
5	37,54
6	37,52
7	37,61
8	37,64
9	37,65

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 44 estão as temperaturas obtidas com NDSolve e MDF, as medidas experimentais, os perfis de temperatura estimados ao longo do tempo e os intervalos de credibilidade de 99%, considerando os diferentes desvios padrão para os modelos de evolução e observação nos casos com  $N = 100$  partículas. Observa-se que, apesar das incertezas nos modelos de evolução e observação, o campo de temperatura foi estimado com precisão. As Figuras 44a e 44f mostram a solução quando o desvio padrão do modelo de observação ( $s_{exp}$ ) é duas vezes maior do que o desvio padrão do modelo de evolução ( $s_T$ ). Nesses casos, as medidas de temperatura encontram-se, em sua maioria, dentro do intervalo de credibilidade 99%. Na Figura 44b  $s_{exp}$  é quatro vezes maior do que  $s_T$  onde percebe-se que uma parte das medidas de temperatura se encontram fora do intervalo de credibilidade. Na Figura 44c têm-se o caso onde o desvio padrão do modelo de observação é oito vezes maior do que o desvio padrão do modelo de evolução. Por essa razão, as medidas experimentais de temperatura estão, em sua maioria, fora do intervalo de credibilidade de 99%. Por outro lado, na Figura 44d  $s_{exp}$  é duas vezes  $s_T$  e na Figura 44e  $s_{exp} = s_T$ . Assim, observa-se que quando as incertezas no modelo de evolução são maiores que os ruídos experimentais (incertezas do modelo de observação), a solução tende a se aproximar dos resultados experimentais, mas ao diminuir as incertezas no modelo de evolução, obtêm-se melhor precisão para o campo de temperatura. Porém, se a diferença entre as incertezas for relativamente grande (como na Figura 44c) os resultados tendem a acompanhar a

solução computacional sem levar em consideração as medidas experimentais.

Figura 44 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do sensor para  $N=100$ .



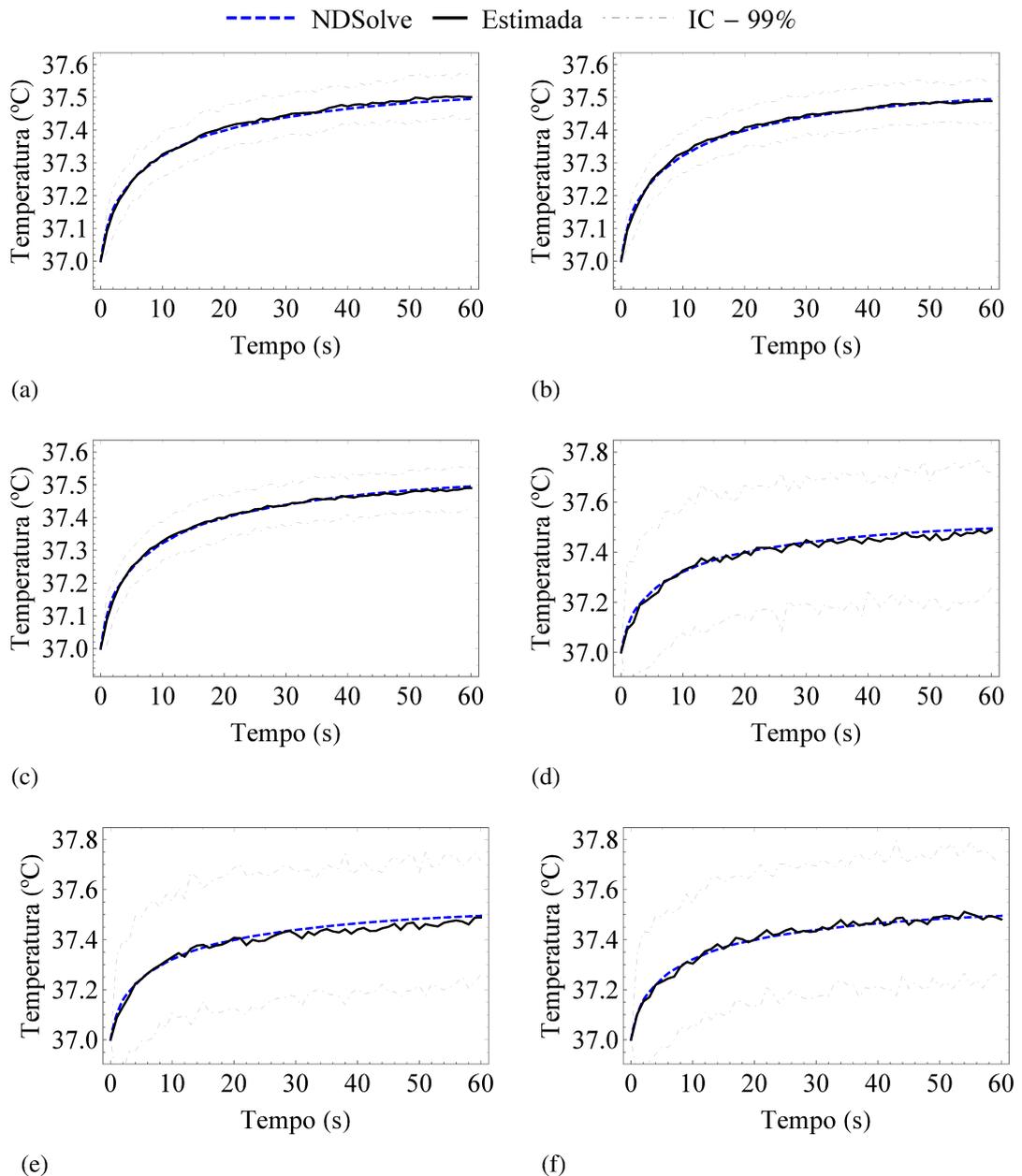
Legenda: (a) caso 2. (b) Caso 5. (c) Caso 6. (d) Caso 7. (e) Caso 8. (f) Caso 9.

Fonte: A autora, 2023.

Ademais, o problema inverso com filtros de partículas permite obter informações sobre o comportamento da solução em regiões onde não há medidas experimentais disponíveis. Na Figura 45 estão as soluções, na posição do contato ativo 2, para o problema direto NDSolve, os resultados para o campo de temperatura estimado com o filtro SIR e o intervalo de credibilidade

de 99%. Nas figuras nota-se que, mesmo considerando as incertezas no modelo de evolução, bons resultados são encontrados nas regiões em que não há medidas experimentais disponíveis. O intervalo de credibilidade para os casos 2 5 e 6 são menores do que os intervalos para os casos 7, 8 e 9 devido ao valor utilizado como ruído para o modelo de evolução.

Figura 45 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro SIR na posição do eletrodo 2 para  $N=100$ .



Legenda: (a) Caso 2. (b) Caso 5. (c) Caso 6. (d) Caso 7. (e) Caso 8. (f) Caso 9.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.2.3.2 Filtro ASIR

Posteriormente, os mesmos testes realizados com o algoritmo SIR foram executados com o algoritmo ASIR, seguindo os passos da Tabela 18.

Tabela 18 - Algoritmo ASIR aplicado ao problema com DBS.

<b>Passo 1 - Inicialização:</b>
Faça $k = 1$ ;
Para $i = 1, \dots, N$ , onde $N$ é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial $T_1^i = T_a$ .
<b>Passo 2 - Cálculo da amostra para a Variável Auxiliar:</b>
Calcule a caracterização $\mu_k^i = T_k^i$ .
<b>Passo 3 - Avaliação dos pesos:</b>
Calcule: $w_k^i = w_{k-1}^i (2\pi)^{-I/2}  s_{exp}^2 ^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - \mu_k^i)^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - \mu_k^i) \right]$ ;
Calcule o peso total $T_w = \sum_{i=1}^N w_k^i$ e normalize os pesos $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{T_w}$ .
<b>Passo 4 - Reamostragem ou Seleção:</b>
Construa a soma dos pesos acumulativos $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$ com $c_0 = 0$ ;
Tome $i = 1$ e gere $u_1$ de uma distribuição uniforme $U[0, N^{-1}]$ ;
Para $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:
Calcule $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$ e enquanto $u_j > c_i$ , faça $i = i + 1$ ;
Designe as partículas $\mu_k^{ij} = T_k^i$ e os índices $i^j = i$ .
<b>Passo 5 - Amostragem:</b>
Para $j = 1, \dots, N$ gere as partículas $T_k^j = \mu_k^{ij} + N[0, s_T]$ , calcule
$\pi(z_k   T_k^i) = (2\pi)^{-I/2}  s_{exp}^2 ^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - T_k^j)^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - T_k^j) \right]$ e
$\pi(z_k   \mu_k^{ij}) = (2\pi)^{-I/2}  s_{exp}^2 ^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - \mu_k^{ij})^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - \mu_k^{ij}) \right]$ ,
em seguida, calcule os novos pesos $w_k^j = \frac{\pi(z_k   T_k^j)}{\pi(z_k   \mu_k^{ij})}$ .
<b>Passo 6 - Avaliação dos pesos:</b>
Calcule o peso total $T_w = \sum_{i=1}^N w_k^i$ e normalize os pesos $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{T_w}$ .
<b>Passo 7 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:</b>
$\bar{T}_k = \sum_{i=0}^N T_k^i \hat{w}_k^i$ ; $s_k = \sqrt{\left(\frac{N}{N-1}\right) \sum_{i=0}^N \hat{w}_k^i (T_k^i - \bar{T}_k)^2}$ .
<b>Passo 8 - Evolução do Modelo:</b>
Faça $k = k + 1$ . Se $k > k_{final} + 1$ , então pare;
Se não, resolva o problema direto utilizando a NDSolve para $i = 1, 2, \dots, N$ com condição inicial $\bar{T}_{k-1}$ e faça $T_k^i = T(r_k, z_k, t_k) + N[0, s_T]$ .
<b>Passo 9 - Retorne para o Passo 2.</b>

Fonte: Adaptado de [Arulampalam et al. \(2002\)](#).

Os resultados obtidos com o algoritmo ASIR, para diferentes quantidades de partículas,

podem ser observados na Tabela 19, onde nota-se que, da mesma forma como ocorre com o algoritmo SIR, nos resultados com o algoritmo ASIR, ao aumentar o número de partículas o tempo de CPU aumenta e o erro RMS não apresenta muitas variações. Com relação ao custo computacional, ambos os algoritmos SIR e ASIR precisam resolver a cada passo de tempo somente as equações referentes a temperatura, pois a solução para o potencial elétrico permanece a mesma ao longo de toda a simulação, porém o algoritmo ASIR resolve o problema duas vezes a cada passo de tempo. Dessa forma, o algoritmo ASIR apresenta custo computacional entre 3 e 10 minutos maior do que o filtro SIR, dependendo do número de partículas, devido a necessidade de resolver novamente as equações da temperatura.

Tabela 19 - Erros RMS e tempo de CPU para algoritmo ASIR.

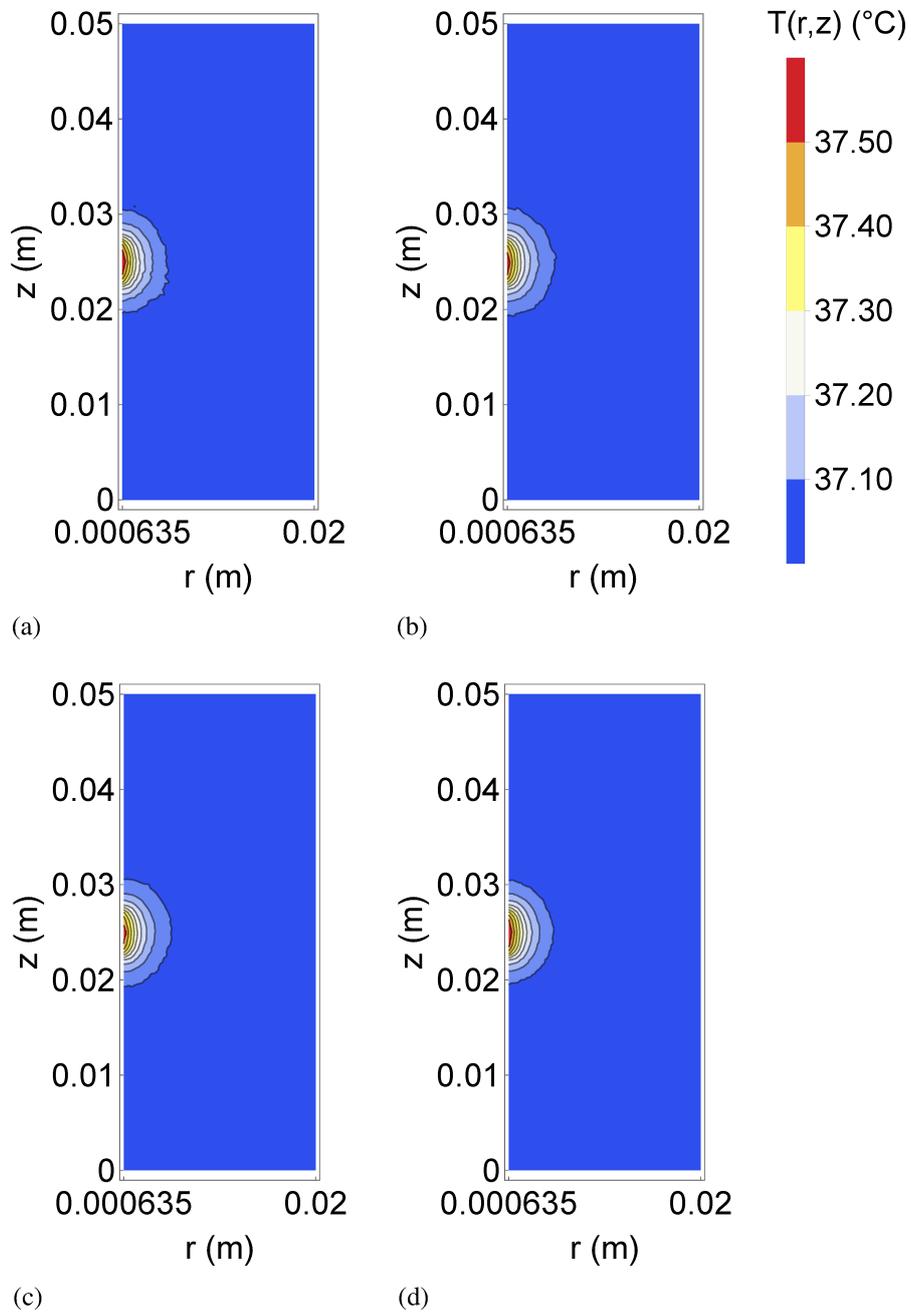
Casos	$s_T$ (°C)	$s_{exp}$ (°C)	N	Média do erro RMS ( $\times 10^{-2}$ °C)	Desvio padrão do RMS ( $\times 10^{-3}$ °C)	Tempo de CPU (min) <sup>1</sup>
10	0,025	0,05	50	2,417	1,942	15
11	0,025	0,05	100	2,376	2,007	30
12	0,025	0,05	200	2,343	2,836	60
13	0,025	0,05	300	2,392	2,184	90
14	0,025	0,10	100	2,685	3,543	30
15	0,025	0,20	100	2,827	2,904	30
16	0,10	0,05	100	4,445	3,278	30
17	0,10	0,10	100	6,968	6,552	30
18	0,10	0,20	100	9,119	7,237	30

Legenda: <sup>1</sup> Intel(R) Core(TM) i7-11390H@3,40 GHz com 16 GB de RAM.

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 46 os campos de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtidos considerando  $N = 50, 100, 200$  e  $300$  partículas com  $s_T = 0,025$  °C e  $s_{exp} = 0,05$  °C mostram que a maior variação ocorre para  $N = 50$ . A Figura 47 mostra o perfil de temperatura ao longo do tempo na posição do sensor para os mesmos casos da figura anterior, onde é possível observar que o campo de temperatura estimado e os intervalos de credibilidade de 99% permanecem semelhantes. Assim, escolhendo  $N = 100$  partículas foram gerados os casos 14 à 18 que mostram a solução considerando diferentes desvios padrão. Nesses casos observa-se maior variação na temperatura estimada, visto que o desvio padrão do modelo de evolução é maior, conforme pode ser observado na Figura 48.

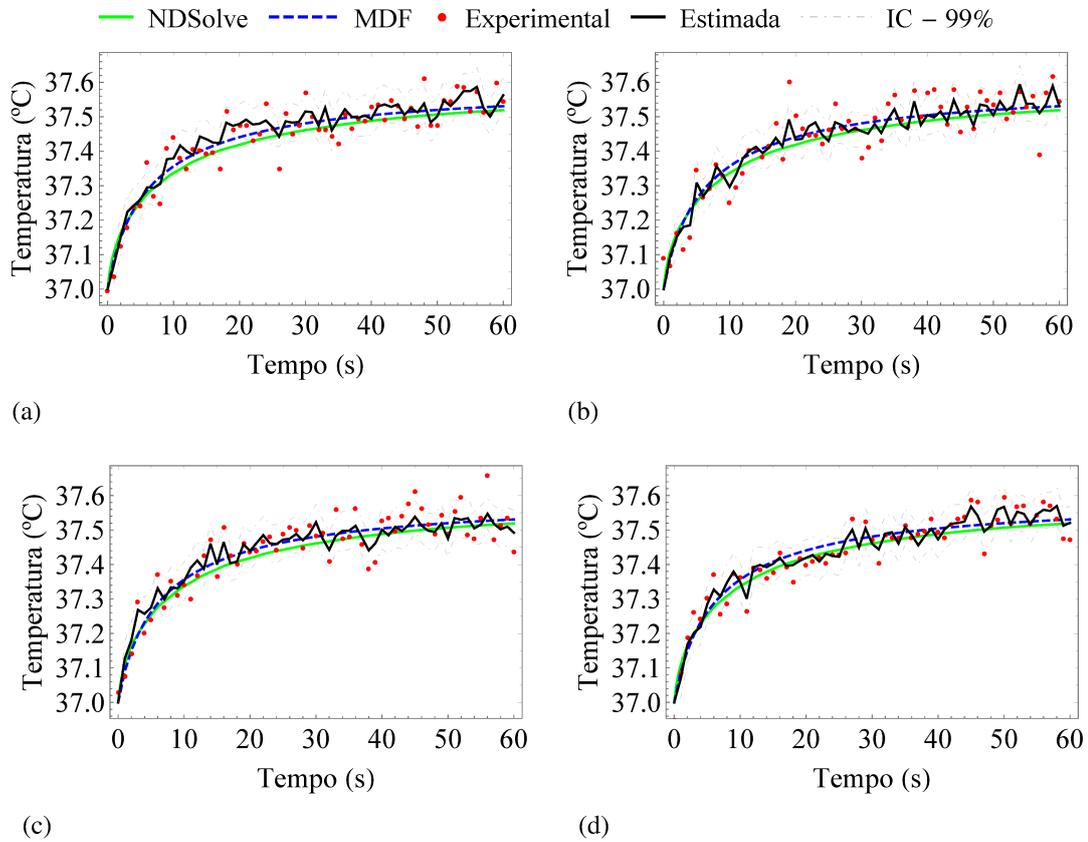
Figura 46 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro ASIR com diferentes quantidades de partículas.



Legenda: (a)  $N=50$ . (b)  $N=100$ . (c)  $N=200$ . (d)  $N=300$ .

Fonte: A autora, 2023.

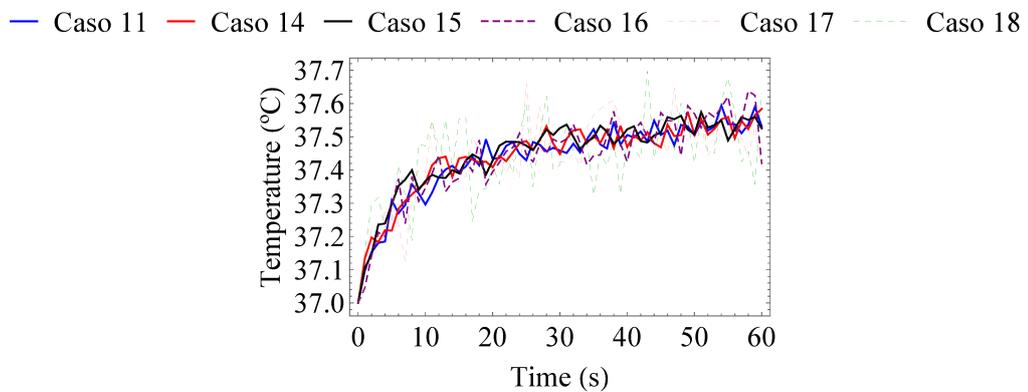
Figura 47 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com  $s_T = 0,025 \text{ }^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05 \text{ }^\circ\text{C}$ .



Legenda: (a)  $N = 50$ . (b)  $N = 100$ . (c)  $N = 200$ . (d)  $N = 300$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 48 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro ASIR para os casos com  $N = 100$  partículas.



Fonte: A autora, 2023.

Ademais, foram obtidos os valores máximos de temperatura para cada caso da Tabela

19, conforme pode ser visto na Tabela 20. Observa-se que, como esperado, os valores máximos são maiores para os casos com maior desvio padrão do modelo de evolução. Além disso, as temperaturas máximas são semelhantes as obtidas com o filtro SIR.

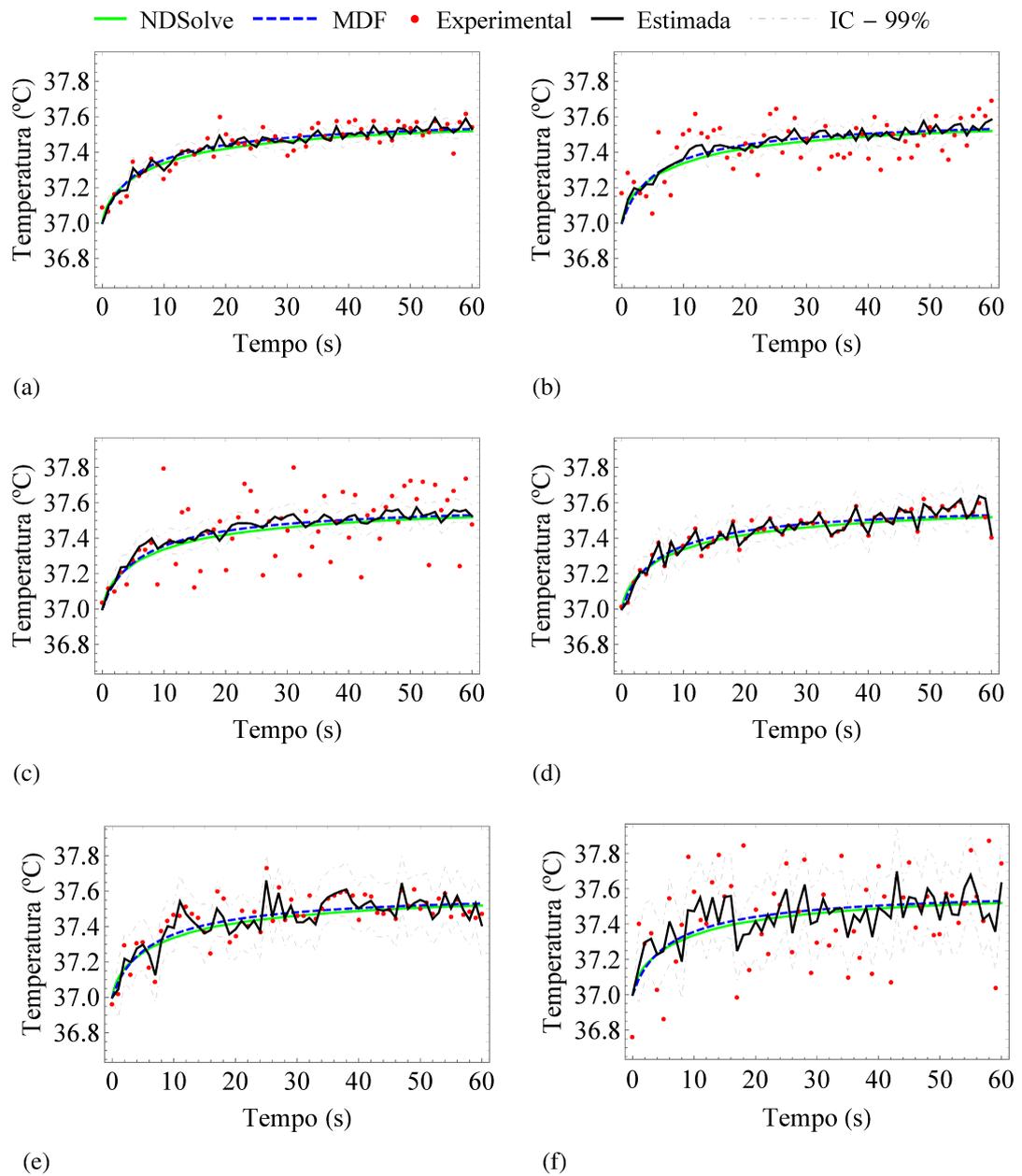
Tabela 20 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo ASIR.

Casos	Temperatura máxima (°C)
10	37,59
11	37,59
12	37,55
13	37,57
14	37,58
15	37,57
16	37,64
17	37,66
18	37,69

Fonte: A autora, 2023.

As curvas de temperatura obtidas com as soluções NDSolve e MDF, as medidas experimentais utilizadas, as curvas de temperatura estimada e o intervalo de credibilidade de 99% para os casos obtidos com filtro ASIR considerando  $N = 100$  partículas podem ser encontrados na Figura 49. Além disso, na Figura 50 estão os perfis de temperatura estimados ao longo do tempo para os mesmos casos na posição do contato ativo 2. Com relação aos desvios padrão utilizados para os modelos de evolução e observação, as mesmas considerações feitas para os resultados do filtro SIR são válidas para o filtro ASIR, pois o comportamento das soluções é semelhante. Ou seja, quando as incertezas do modelo de evolução são maiores do que os desvios utilizados para os dados experimentais, a solução tende a se aproximar dos resultados experimentais. Em contrapartida, ao diminuir as incertezas do modelo de evolução, melhora-se a precisão para o campo de temperatura estimado. Entretanto, se a diferença entre os valores utilizados para os desvios padrão for elevada, os resultados tendem a acompanhar a solução computacional e desconsiderar as medidas experimentais disponíveis.

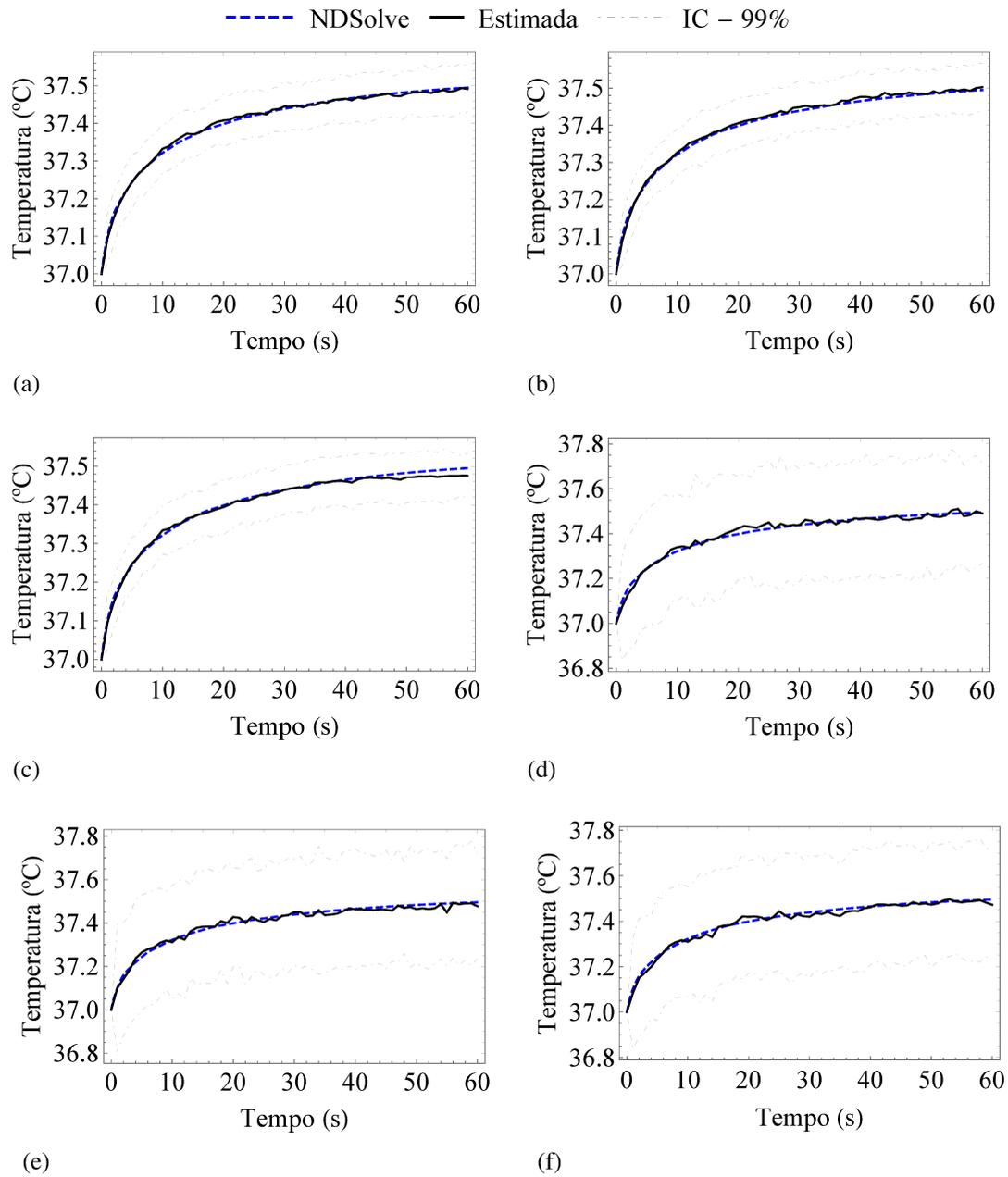
Figura 49 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do sensor para  $N=100$ .



Legenda: (a) Caso 11. (b) Caso 14. (c) Caso 15. (d) Caso 16. (e) Caso 17. (f) Caso 18.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 50 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro ASIR na posição do eletrodo 2 para N=100.



Legenda: (a) Caso 11. (b) Caso 14. (c) Caso 15. (d) Caso 16. (e) Caso 17. (f) Caso 18.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.2.3.3 Filtro de Liu & West

Os passos da solução do problema DBS com o filtro de Liu & West estão na Tabela 21.

Tabela 21 - Algoritmo de Liu &amp; West aplicado ao problema com DBS.

---

**Passo 1 - Inicialização:**

Faça  $\delta \in [0, 95; 0, 99]$  e calcule  $a$  com a Eq.(94) e  $\zeta$  com a Eq. (95);  
 Faça  $k = 1$ , para  $i = 1, \dots, N$ , onde  $N$  é o número de partículas, gere um conjunto de partículas da distribuição inicial  $T_1^i = T_a$ .

---

**Passo 2 - Cálculo da amostra para a Variável Auxiliar e das médias:**

Encontre a média dos parâmetros fazendo  $\bar{\theta}_{k-1} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_{k-1}^i$ ;  
 Calcule  $\mathbf{m}_{k-1}^i$  com a Eq. (93);  
 Calcule a caracterização  $\mu_k^i = T_k^i$ .

---

**Passo 3 - Avaliação dos pesos:**

Calcule:  $w_k^i = w_{k-1}^i (2\pi)^{-I/2} |s_{exp}^2|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - \mu_k^i)^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - \mu_k^i) \right]$ ;  
 Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N w_k^i$  e normalize os pesos  $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 4 - Reamostragem ou Seleção:**

Construa a soma dos pesos acumulativos  $c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i$  com  $c_0 = 0$ ;  
 Tome  $i = 1$  e gere  $u_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ ;  
 Para  $j = 1, 2, \dots, N$ , faça:  
     Calcule  $u_j = u_1 + N^{-1}(j - 1)$  e enquanto  $u_j > c_i$ , faça  $i = i + 1$ ;  
     Designe as partículas  $\mu_k^{ij} = T_k^i$  e os índices  $i^j = i$ .

---

**Passo 5 - Amostragem:**

Para  $j = 1, \dots, N$  gere  $\theta_k^j$  a partir da Eq. (92), gere as partículas  $T_k^j = \mu_k^{ij} + N[0, s_T]$ ,  
 calcule  $\pi(z_k | T_k^i) = (2\pi)^{-I/2} |s_{exp}^2|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - T_k^j)^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - T_k^j) \right]$   
 e  $\pi(z_k | \mu_k^{ij}) = (2\pi)^{-I/2} |s_{exp}^2|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (T_{exp,k} - \mu_k^{ij})^T (s_{exp}^2)^{-1} (T_{exp,k} - \mu_k^{ij}) \right]$ ,  
 em seguida, calcule os novos pesos  $w_k^i = \frac{\pi(z_k | T_k^i)}{\pi(z_k | \mu_k^{ij})}$ .

---

**Passo 6 - Avaliação dos pesos:**

Calcule o peso total  $T_w = \sum_{i=1}^N w_k^i$  e normalize os pesos  $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{T_w}$ .

---

**Passo 7 - Cálculo da Média a Posteriori e do Desvio Padrão:**

$$\bar{T}_k = \sum_{i=0}^N T_k^i \hat{w}_k^i; \quad s_k = \sqrt{\left( \frac{N}{N-1} \right) \sum_{i=0}^N \hat{w}_k^i (T_k^i - \bar{T}_k)^2}.$$


---

**Passo 8 - Evolução do Modelo:**

Faça  $k = k + 1$ . Se  $k > k_{final} + 1$ , então pare;  
 Se não, resolva o problema direto utilizando a NDSolve para  $i = 1, 2, \dots, N$  com condição inicial  $\bar{T}_{k-1}$  e faça  $T_k^i = T(r_k, z_k, t_k) + N[0, s_T]$ .

---

**Passo 9 - Retorne para o Passo 2.**

---

Fonte: Adaptado de Liu e West (2001).

Na Tabela 22 estão os resultados do filtro de Liu & West considerando diferentes combinações de desvios padrão. Nos casos 19 à 22 estão os resultados para os desvios padrão de  $s_{exp} = 0,05$  °C e  $s_T = 0,025$  °C com  $N = 50, 100, 200$  e  $300$  partículas. O campo de

temperatura desses casos, em  $t = 60$  segundos, pode ser visualizado na Figura 51 e as curvas de temperatura estimadas juntamente com seus intervalos de credibilidade de 99% estão na Figura 52. Comparando o custo computacional do filtro de Liu & West com os custos dos filtros anteriores percebe-se que há um considerável aumento, principalmente para o caso com 300 partículas, onde para os filtros SIR e ASIR é de, respectivamente, 80 e 90 minutos, enquanto para o algoritmo de Liu & West é de 140 minutos. Esse aumento do custo computacional ocorre porque ao considerar incertezas nos parâmetros do modelo matemático, há a necessidade de se resolver novamente, a cada passo de tempo, as soluções computacionais para o potencial elétrico e para a temperatura, enquanto que nos casos anteriores somente a solução da temperatura era recalculada a cada passo de tempo. Nos casos 24 à 27 da Tabela 22 estão as soluções para os demais desvios padrão com  $N = 100$  partículas e na Figura 53 estão as curvas estimadas de temperatura obtidas para cada caso da tabela com 100 partículas mostrando que a variação de temperatura é maior nos casos onde o desvio padrão do modelo de evolução é maior.

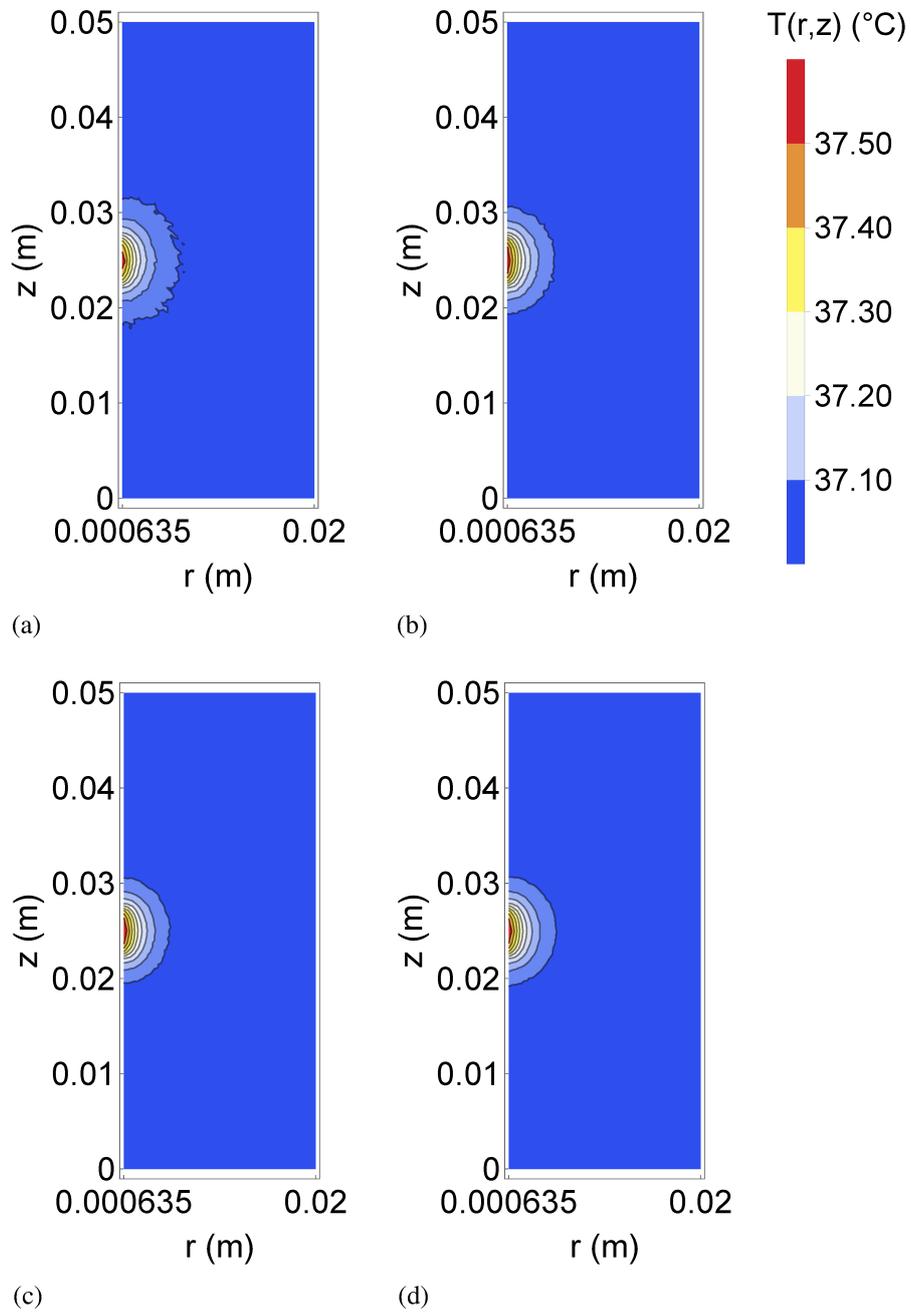
Tabela 22 - Erros RMS e tempo de CPU para algoritmo de Liu & West.

Casos	$s_T$ (°C)	$s_{exp}$ (°C)	N	Média do erro RMS ( $\times 10^{-2}$ °C)	Desvio padrão do RMS ( $\times 10^{-3}$ °C)	Tempo de CPU (min) <sup>1</sup>
19	0,025	0,05	50	1,965	3,886	16
20	0,025	0,05	100	1,513	2,689	35
21	0,025	0,05	200	1,540	4,097	80
22	0,025	0,05	300	1,182	3,204	140
23	0,025	0,10	100	1,204	5,438	35
24	0,025	0,20	100	1,089	2,765	35
25	0,10	0,05	100	5,031	6,148	35
26	0,10	0,10	100	6,193	6,613	35
27	0,10	0,20	100	5,175	6,956	35

Legenda: <sup>1</sup> Intel(R) Core(TM) i7-11390H@3,40 GHz com 16 GB de RAM.

Fonte: A autora, 2023.

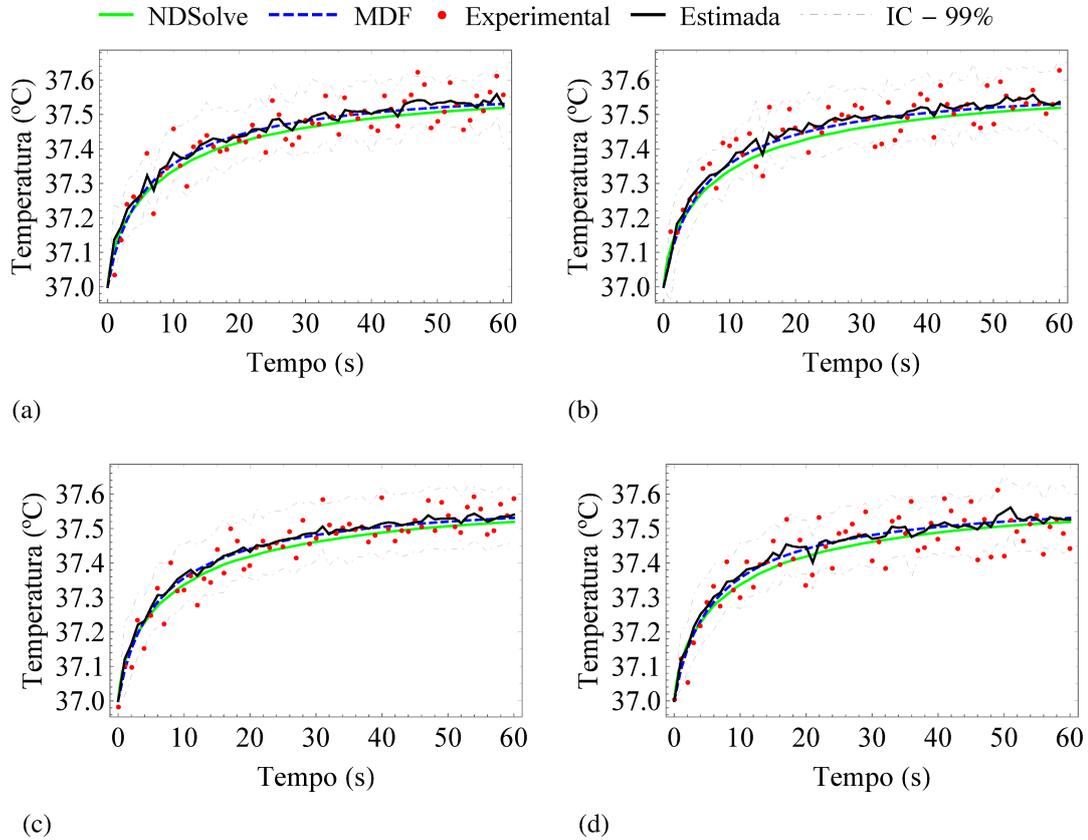
Figura 51 - Campo de temperatura obtido com o problema de estimativa de estado utilizando o filtro de Liu & West com diferentes quantidades de partículas.



Legenda: (a)  $N=50$ . (b)  $N=100$ . (c)  $N=200$ . (d)  $N=300$ .

Fonte: A autora, 2023.

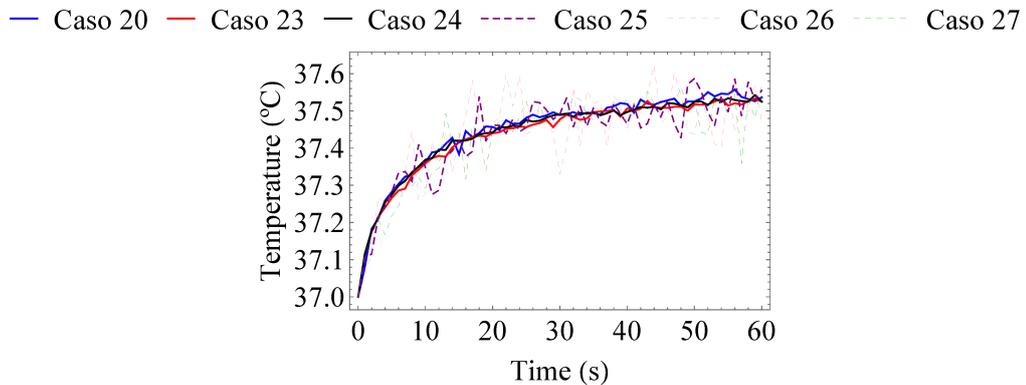
Figura 52 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do sensor para diferentes quantidades de partículas com  $s_T = 0,025 \text{ }^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05 \text{ }^\circ\text{C}$ .



Legenda: (a)  $N = 50$ . (b)  $N = 100$ . (c)  $N = 200$ . (d)  $N = 300$ .

Fonte: A autora, 2023.

Figura 53 - Comparação das temperaturas estimadas com o filtro de Liu & West para os casos com  $N = 100$  partículas.



Fonte: A autora, 2023.

Além disso, na Tabela 23 estão as temperaturas máximas encontradas em cada um dos casos analisados que ficam próximas as temperaturas obtidas nos casos com os filtros SIR e ASIR.

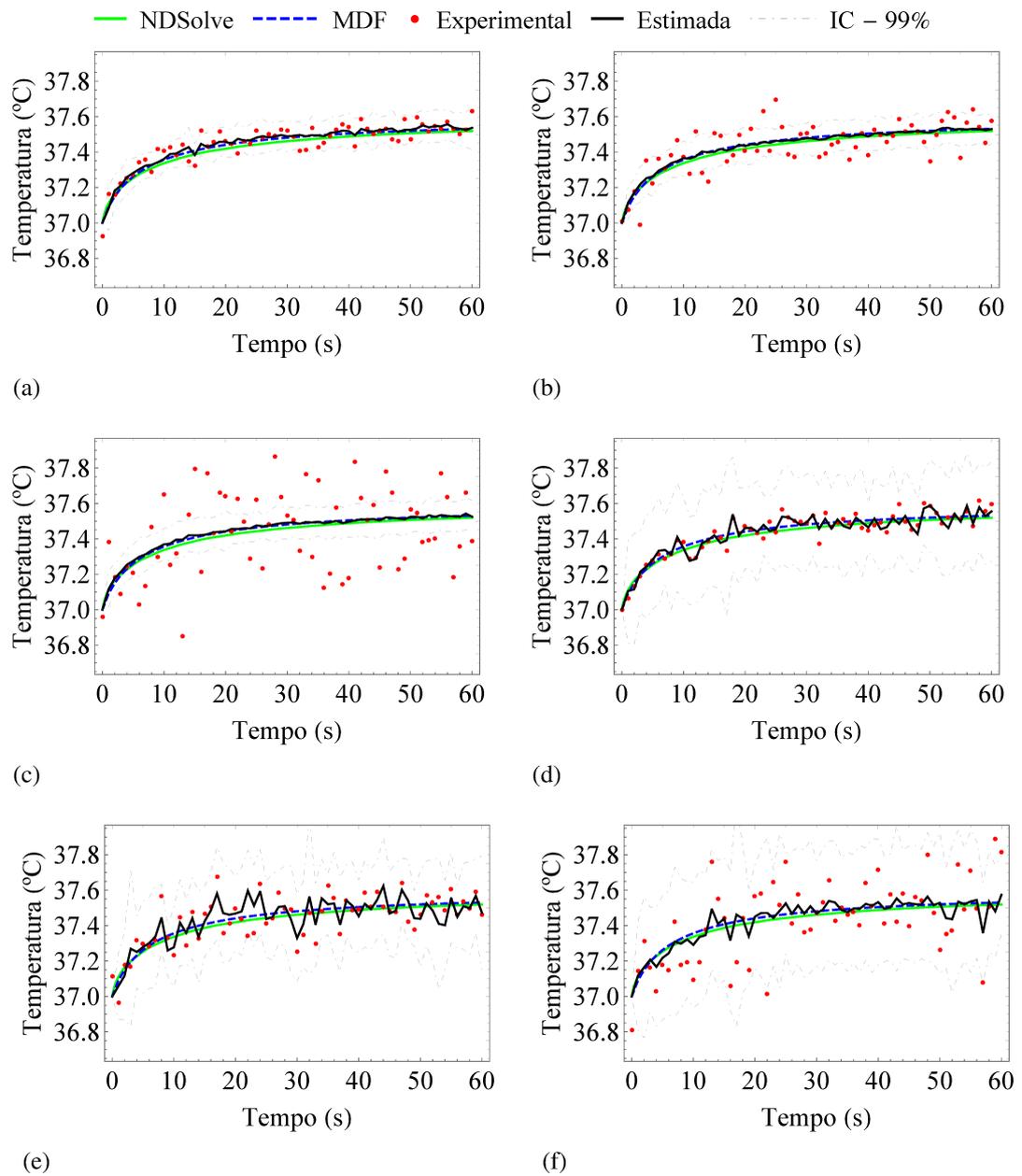
Tabela 23 - Temperatura máxima obtida para os diferentes casos do algoritmo de Liu & West.

Casos	Temperatura máxima (°C)
10	37,58
11	37,56
12	37,54
13	37,56
14	37,53
15	37,54
16	37,59
17	37,62
18	37,57

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 54 encontram-se as solução NDSolve e MDF, as medidas experimentais, as curvas estimadas e os intervalos de credibilidade para os casos do filtro de Liu & West com 100 partículas. Novamente, no que diz respeito aos desvios padrão utilizados para os modelos de evolução e observação, observa-se as mesmas considerações feitas para os resultados do filtro SIR. Ou seja, ao considerar desvios padrões muito diferentes a solução computacional tende a levar em consideração de forma mais significativa o maior desvio padrão, como ocorre na Figura 54c, onde o desvio do modelo de observação é oito vezes maior do que o do modelo de evolução. Outra informação importante é que se o desvio padrão do modelo de evolução for maior do que o desvio padrão do modelo de observação, a solução tende a acompanhar os dados experimentais e não há melhora na precisão dos resultados. Além disso, na Figura 55 estão os perfis de temperatura estimados e seus intervalos de credibilidade de 99% na posição do contato 2, onde nota-se maior intervalo de credibilidade nas soluções que apresentam maior ruído no modelo de evolução (casos 25 à 27). Ademais, com as figuras, observa-se que mesmo o algoritmo de Liu & West levando em conta as incertezas nos parâmetros, o campo de temperatura foi estimado com precisão.

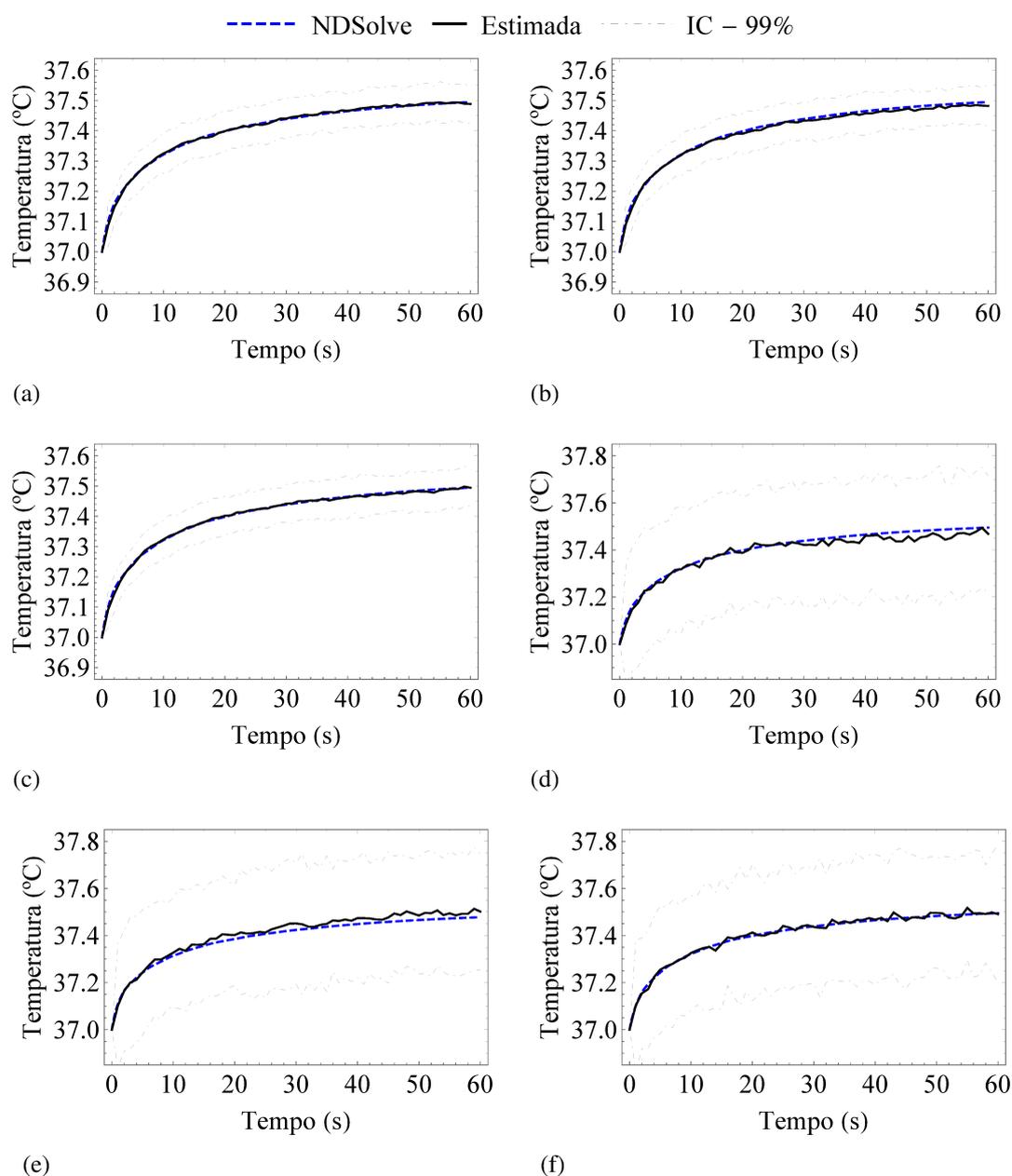
Figura 54 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do sensor para  $N=100$ .



Legenda: (a) Caso 20. (b) Caso 23. (c) Caso 24. (d) Caso 25. (e) Caso 26. (f) Caso 27.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 55 - Solução do problema de estimativa de estado com o filtro de Liu & West na posição do eletrodo 2 para  $N=100$ .



Legenda: (a) Caso 20. (b) Caso 23. (c) Caso 24. (d) Caso 25. (e) Caso 26. (f) Caso 27.

Fonte: A autora, 2023.

#### 6.2.3.4 Comparação dos resultados com os diferentes filtros

A partir dos resultados apresentados nas Tabelas 16 e 19 percebe-se que o filtro SIR tem tempo de CPU um pouco menor do que o filtro ASIR, pois a necessidade de se resolver

as equações para a temperatura duas vezes a cada passo de tempo aumentam o tempo de CPU de 10% à 20%. Com as Tabelas 16 e 22 pode-se concluir que o tempo de CPU com o filtro de Liu & West fica em torno 25% à 43% maior do que o filtro SIR, dependendo do número de partículas utilizado. Essa variação no tempo de simulação era esperada, pois como o filtro de Liu & West leva em conta as incertezas associadas aos parâmetros, há a necessidade de resolver os problemas diretos associados ao potencial elétrico e a temperatura a cada passo do código. Nesse sentido, a grande vantagem do filtro de Liu & West é a capacidade de estimar com precisão a temperatura mesmo adicionando incertezas aos parâmetros, uma vez que abre possibilidade para estimar algumas propriedades cerebrais e levar em consideração as diferenças nas propriedades que ocorrem entre pacientes, caso não haja informações precisas sobre o valor exato dos parâmetros.

Com relação a temperatura máxima obtida em cada algoritmo, com a Tabela 24 percebe-se que todos os casos apresentam valor máximo entre 37,5 °C e 37,7 °C, sendo os casos com desvio padrão do modelo de evolução de  $s_T = 0,025$  °C com temperaturas máximas entre 37,5 °C e 37,6 °C e os casos com  $s_T = 0,1$  °C com temperaturas máximas chegando próximo a 37,7 °C. Era esperado que a temperatura máxima não apresentasse grandes variações, pois elas ocorrem no ponto de aplicação do potencial elétrico, ou seja em  $f(z) = V_{rms}$ , logo, como o potencial elétrico aplicado é igual, a temperatura máxima deve permanecer igual. As pequenas variações se devem as incertezas inseridas que são importantes para que o problema represente de forma mais realista os resultados experimentais esperados.

Tabela 24 - Comparação entre as temperaturas máximas obtidas com os algoritmos SIR, ASIR e de Liu & West.

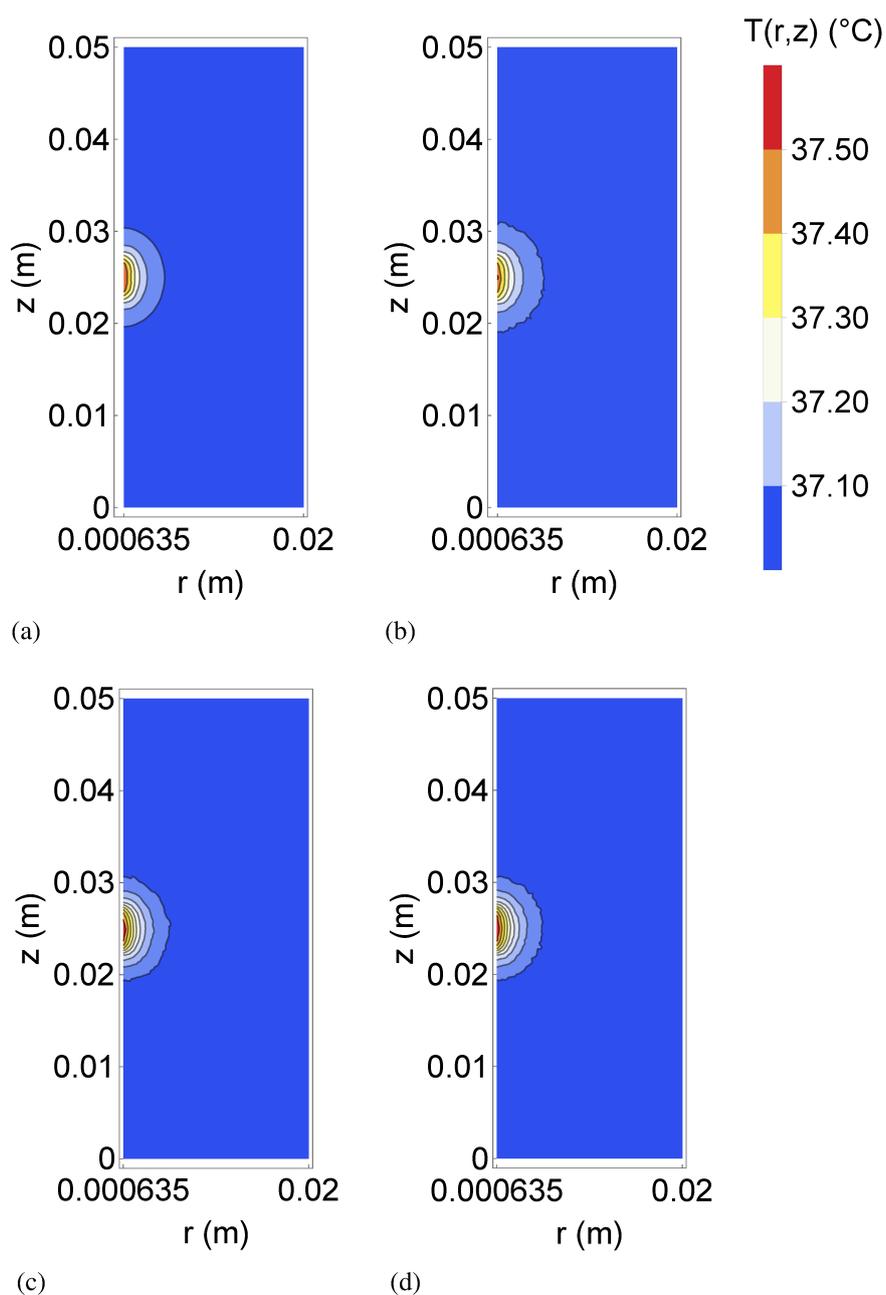
$s_T$ (°C)	$s_{exp}$ (°C)	N	Temperatura máxima (°C)		
			SIR	ASIR	Liu & West
0,025	0,05	50	37,55	37,59	37,58
0,025	0,05	100	37,56	37,59	37,56
0,025	0,05	200	37,56	37,55	37,54
0,025	0,05	300	37,57	37,57	37,56
0,025	0,10	100	37,54	37,58	37,53
0,025	0,20	100	37,52	37,57	37,54
0,10	0,05	100	37,61	37,64	37,59
0,10	0,10	100	37,64	37,66	37,62
0,10	0,20	100	37,65	37,69	37,57

Fonte: A autora, 2023.

A Figura 56 mostra a distribuição de temperatura em  $t = 60$  segundos, obtida com o problema direto NDSolve, e com os três diferentes filtros, considerando  $N = 100$  partículas para

$s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05^\circ\text{C}$ , onde observa-se que os três filtros conseguem capturar com precisão o campo de temperatura esperado. A temperatura máxima encontrada com a NDSolve foi de  $37,52^\circ\text{C}$ , enquanto com os filtros SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de  $37,56^\circ\text{C}$ ,  $37,59^\circ\text{C}$  e  $37,56^\circ\text{C}$ , ou seja, com erro relativo percentual entre 0,1% e 0,2%.

Figura 56 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05^\circ\text{C}$ .



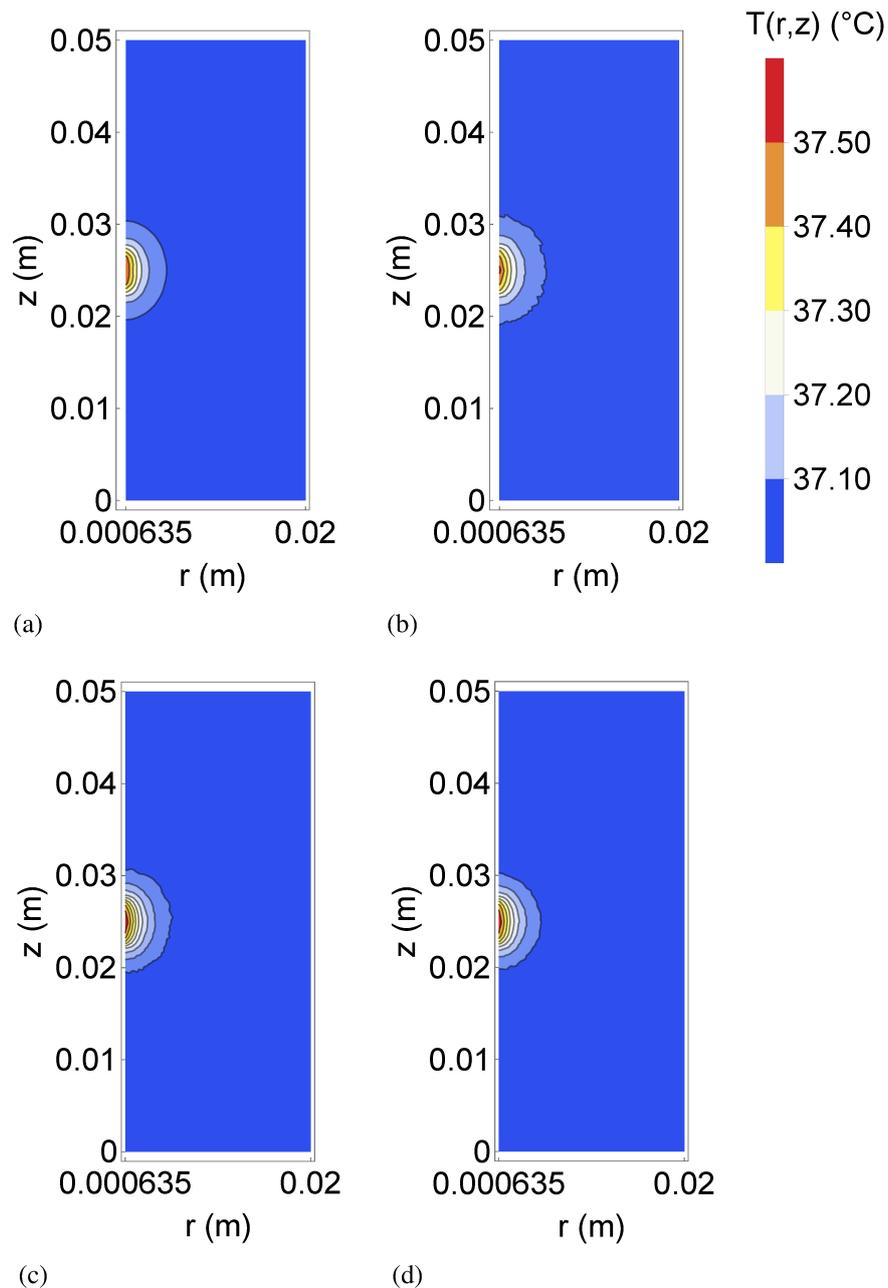
Legenda: (a) NDSolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 57 encontra-se as distribuições de temperatura com os três diferentes filtros

para  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,1^\circ\text{C}$ . Nesse caso, as temperaturas máximas encontradas com os filtros SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de  $37,54^\circ\text{C}$ ,  $37,58^\circ\text{C}$  e  $37,53^\circ\text{C}$ , ou seja, com erro relativo percentual entre  $0,02\%$  e  $0,2\%$  quando comparados à  $37,52^\circ\text{C}$ , obtida com a solução NDSolve.

Figura 57 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,1^\circ\text{C}$ .



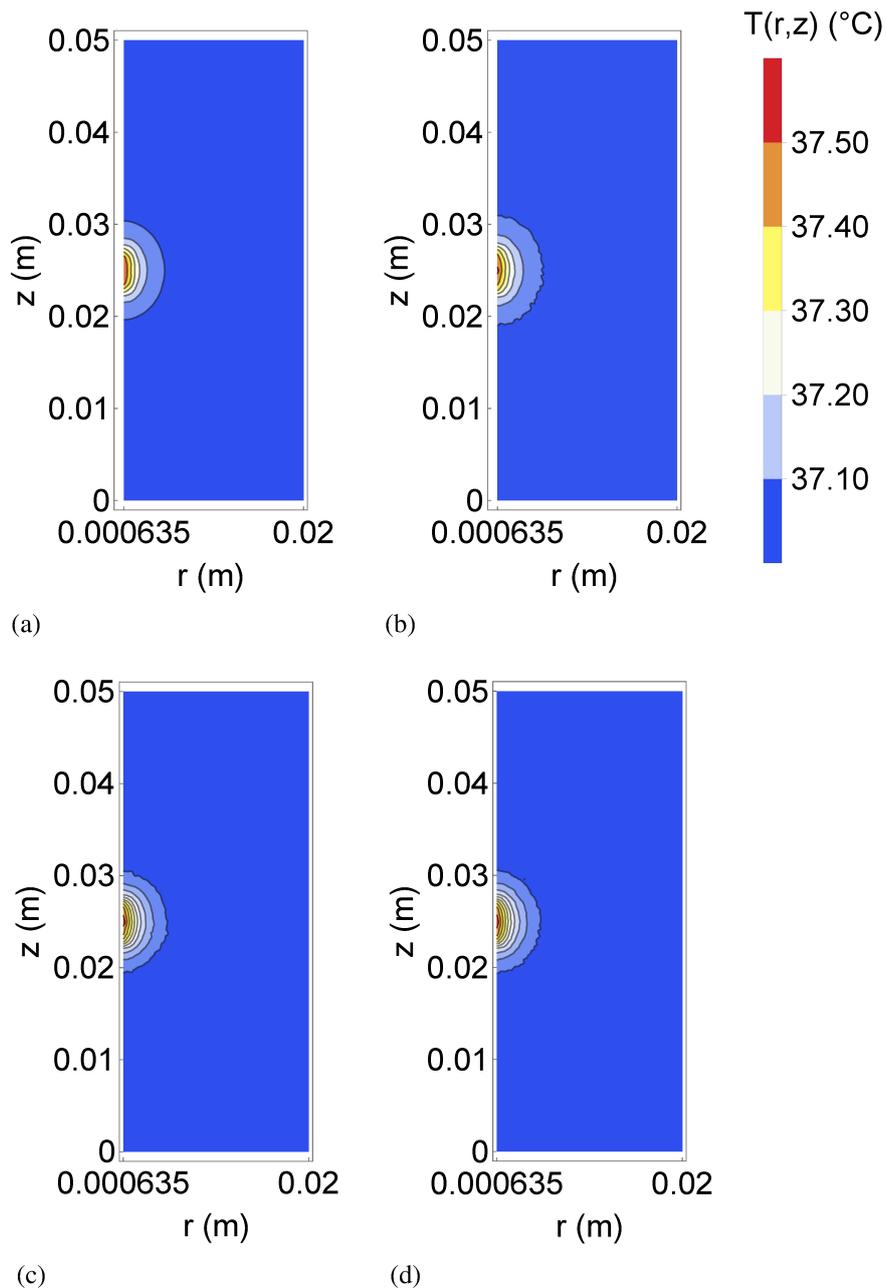
Legenda: (a) NDSolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

As distribuições de temperatura com os três diferentes filtros para  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e

$s_{exp} = 0,2^\circ\text{C}$  estão na Figura 58. Nesse caso os SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de  $37,52^\circ\text{C}$ ,  $37,57^\circ\text{C}$  e  $37,54^\circ\text{C}$ , com erro relativo percentual menor do que  $0,15\%$ . Assim, as Figuras 56, 57 e 58 mostram que as soluções obtidas com desvio padrão do modelo de evolução de  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  conseguem capturar precisão o resultado esperado.

Figura 58 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0,025^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,2^\circ\text{C}$ .



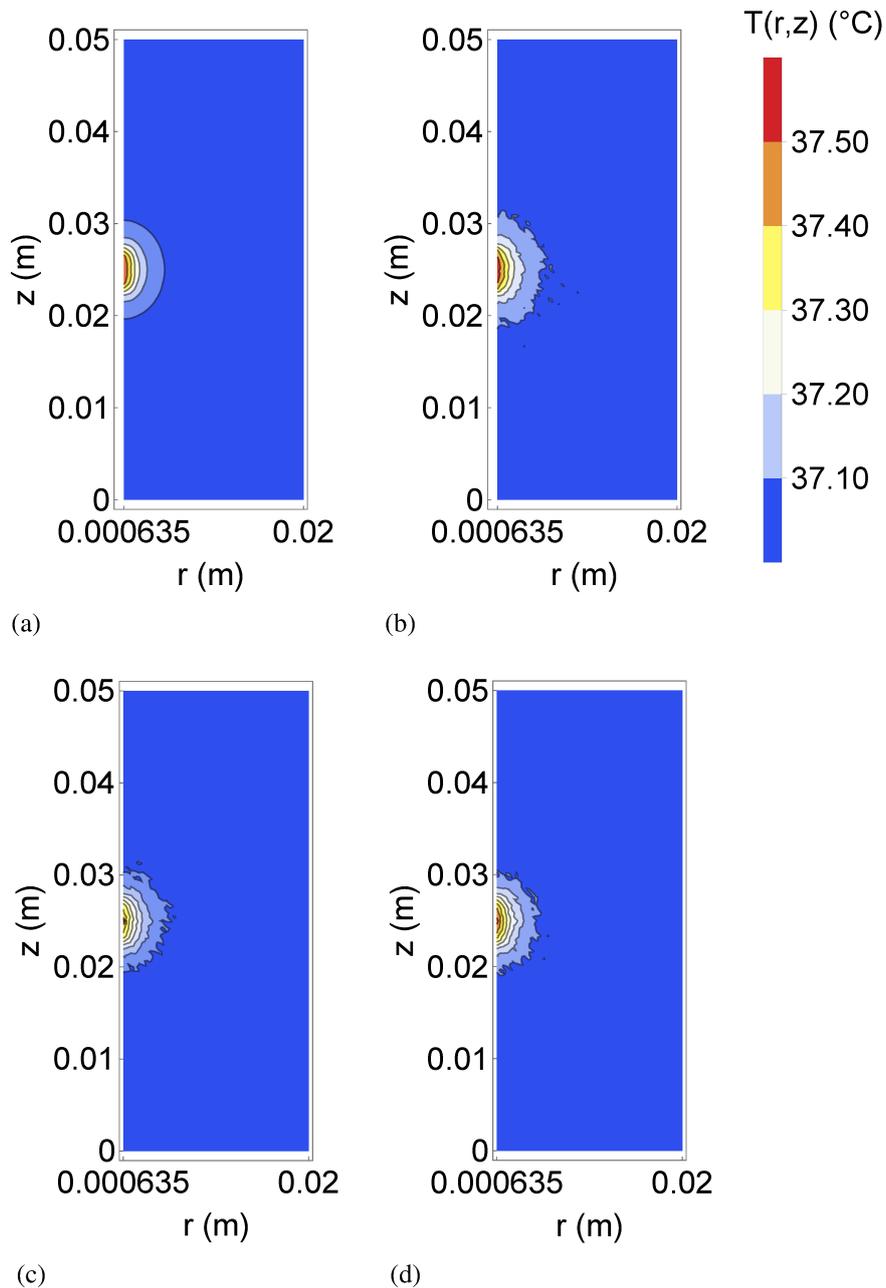
Legenda: (a) NDSolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

Já nas Figuras 59 à 61 estão as soluções obtidas com mais incerteza no modelo de

evolução, ou seja,  $s_T = 0,1^\circ\text{C}$ . A Figura 59 mostra a solução com  $s_{exp} = 0,05^\circ\text{C}$ . Nesse caso, a temperatura máxima obtida para os filtros SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de  $37,61^\circ\text{C}$ ,  $37,64^\circ\text{C}$  e  $37,59^\circ\text{C}$  com erro relativo percentual entre  $0,2\%$  e  $0,3\%$ .

Figura 59 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0,1^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,05^\circ\text{C}$ .



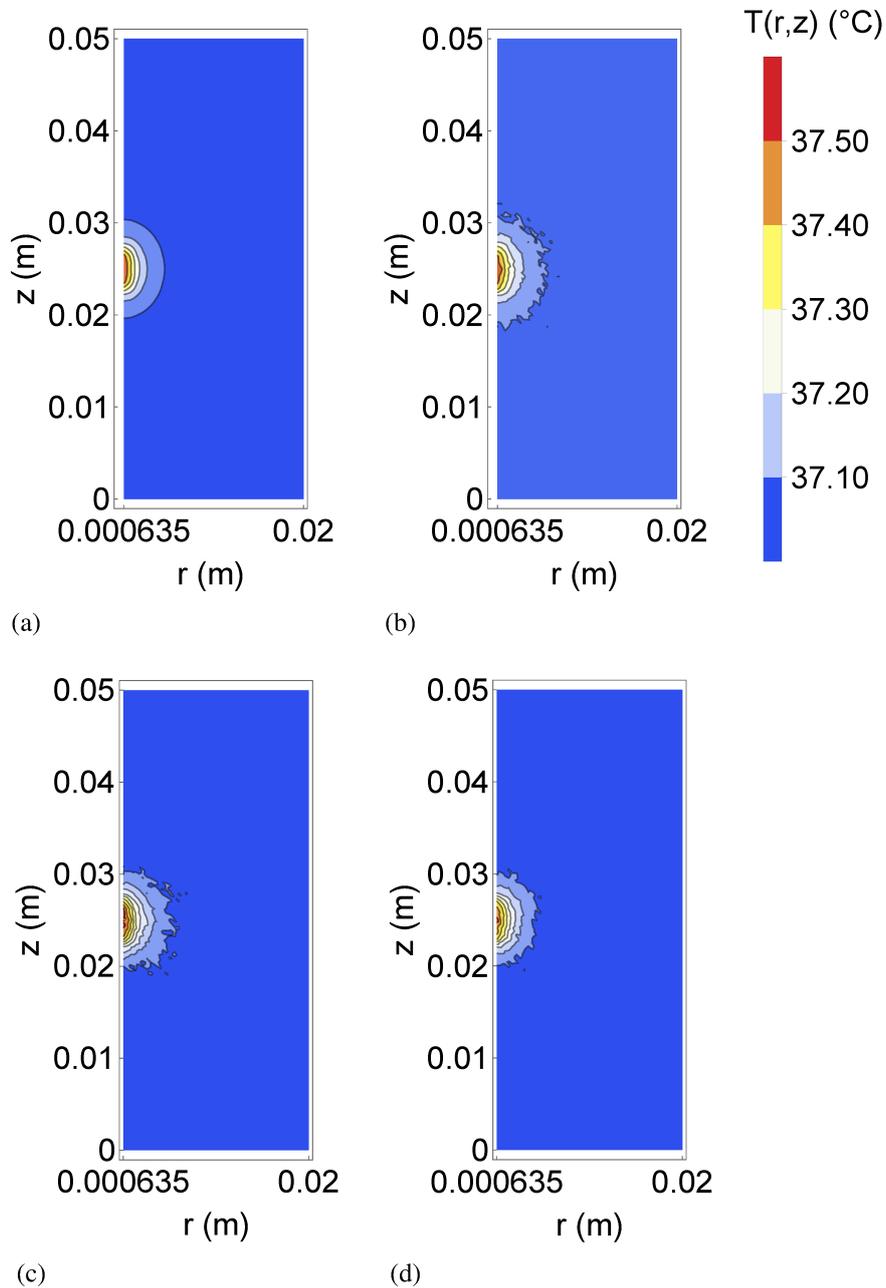
Legenda: (a) NDsolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

A Figura 60 mostra a solução com os devios do modelo de evolução e observação iguais, ou seja,  $s_T = 0,1^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,1^\circ\text{C}$ . Nesse caso, a temperatura máxima obtida para os filtros

SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de 37,64°C, 37,66°C e 37,62°C que possuem erro relativo percentual entre 0,3% e 0,4%.

Figura 60 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0,1^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,1^\circ\text{C}$ .



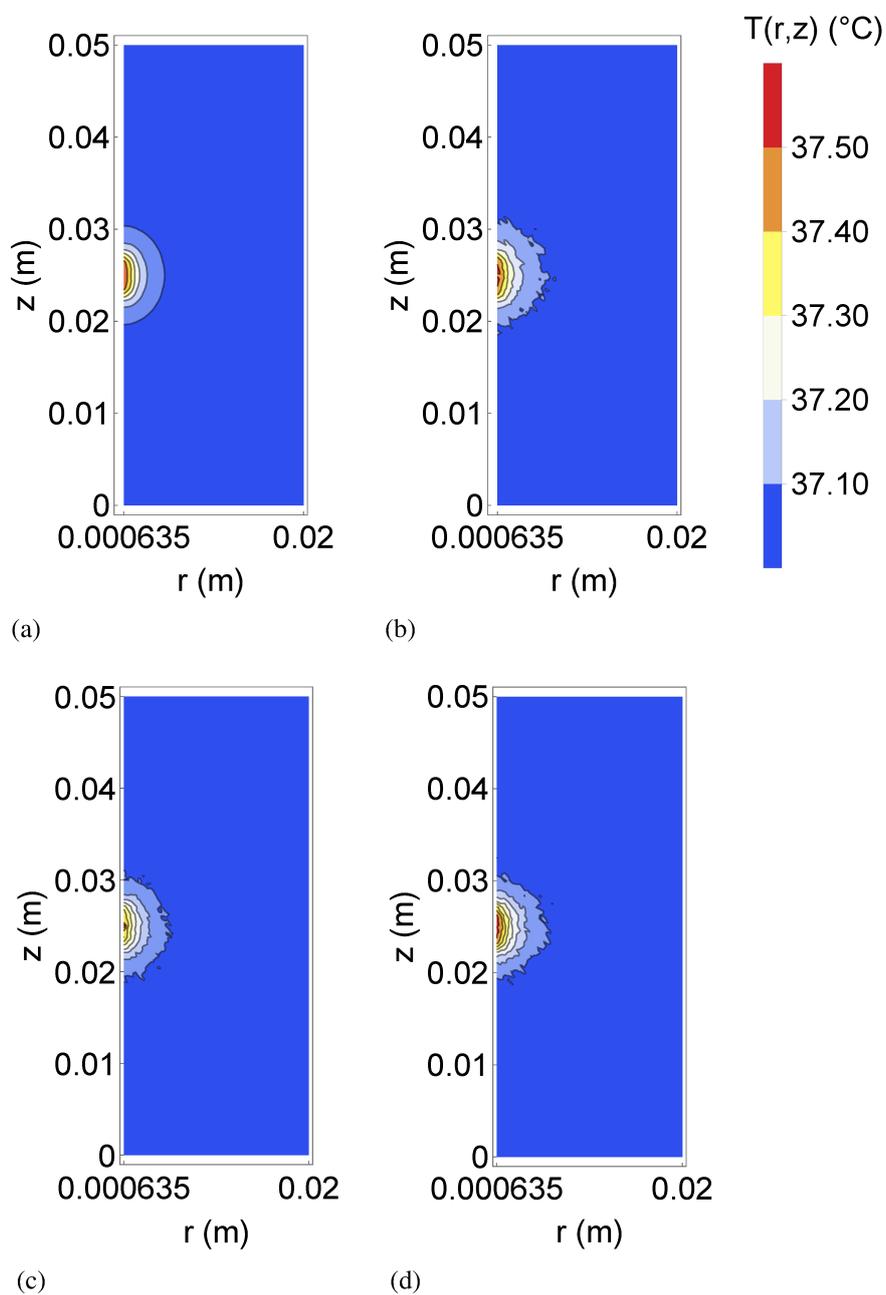
Legenda: (a) NDSolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

Por fim, a Figura 61 mostra a solução com  $s_T = 0,1^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0,2^\circ\text{C}$ , onde a temperatura máxima obtida para os filtros SIR, ASIR e de Liu & West foram, respectivamente, de 37,65°C, 37,69°C e 37,57°C que possuem erro relativo percentual entre 0,1% e 0,5%. Com as

Figuras 59, 60 e 61, percebe-se maior incerteza no campo de temperatura, o que era esperado já que a incerteza considerada para o modelo de observação é maior.

Figura 61 - Campo de temperatura, em  $t = 60$  segundos, obtido com o problema direto NDSolve e com os filtros para  $s_T = 0, 1^\circ\text{C}$  e  $s_{exp} = 0, 2^\circ\text{C}$ .



Legenda: (a) NDSolve. (b) SIR. (c) ASIR. (d) Liu & West.

Fonte: A autora, 2023.

### 6.3 Estimativa de parâmetros utilizando o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas

Outro método bayesiano que pode ser utilizado neste estudo é o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas, conforme descrito na subseção 4.1.1. Considerando que todos os parâmetros do modelo matemático possuem incertezas, pode-se definir dois grupos de parâmetros, sendo  $\theta_1$  para os parâmetros que possuem prioris informativas e  $\theta_2$  para os parâmetros que se deseja estimar. Como mostrado na subseção 6.2.1 alguns parâmetros possuem dependência linear e, conseqüentemente, não podem ser estimados simultaneamente. Com a Tabela 25 pode-se perceber que a condutividade elétrica é o parâmetro do modelo matemático que possui maior variação percentual entre os valores de máximo e mínimo e, portanto, foi escolhida para ser estimada na solução MCMC. Nesse caso,  $\theta_1 = (k, \rho, c_p, \rho_b, c_b, \omega_b, Q_m, T_b, T_a, V_{rms})$  e  $\theta_2 = (\sigma)$ . Os valores que serão utilizados na solução MCMC estão na Tabela 25. A segunda coluna, nomeada n° de trabs., refere-se ao número de trabalhos encontrados por [Hasgall et al. \(2018\)](#) para obter os valores de média, desvio padrão, máximo e mínimo disponibilizados. Conforme pode ser na tabela, os valores obtidos para  $k, \rho, c_p, \rho_b$  e  $c_b$  consideram poucos trabalhos e, portanto, para esses parâmetros, optou-se por utilizar a distribuição uniforme com variação entre os valores de mínimo e máximo. Para os parâmetros  $\sigma, \omega_b$  e  $Q_m$  será utilizada a distribuição gaussiana truncada e para  $T_b, T_a$  e  $V_{rms}$  a distribuição gaussiana. Além disso, considerou-se as mesmas informações da seção anterior, onde os contatos 2 e 3 estavam ativos no eletrodo e as medidas experimentais simuladas foram obtidas a cada 1 segundo na posição do sensor.

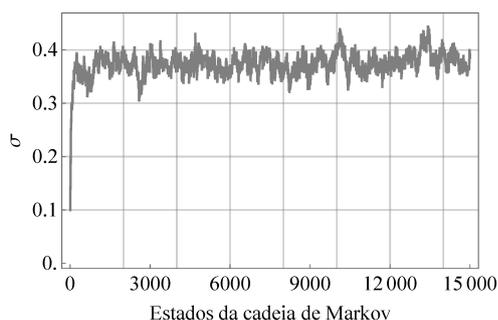
No primeiro momento, a cadeia de Markov foi inicializada com os parâmetros assumindo os valores de média da Tabela 25, exceto  $\sigma$  que inicializou-se com 0,1 S/m. Na Figura 62 encontra-se a cadeia de Markov obtida para o parâmetro  $\sigma$  considerando 15000 estados com 32% de aceitação. Desprezando os 500 estados de *burn-in*, foi encontrada média de  $\sigma_{est} = 0,375$  S/m e desvio padrão  $s_{\sigma_{est}} = 0,019$  S/m. Nas Figuras 63a e 63b encontram-se, respectivamente, os histogramas gerados para os valores da cadeia de Markov no intervalo entre os estados 500 à 10000 e 500 à 15000. As Figuras mantêm as mesmas características gaussianas em ambos os histogramas, mostrando boa convergência das cadeias de Markov. O tempo computacional, neste caso, foi de 4 horas.

Tabela 25 - Informações estatísticas sobre desvio padrão, média e valores de máximo e mínimo dos parâmetros utilizados na solução MCMC com Metropolis-Hastings em duas etapas.

Parâmetros	$n^\circ$ de trabs.	Média	Desvio Padrão	Mín	Max	Referências
$\sigma$ (S/m)	91	0,375	0,179	0,066	0,717	(Hasgall et al., 2018)
$k$ (W/mK)	4	0,51	0,02	0,49	0,54	(Hasgall et al., 2018)
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	2	1046	6	1041	1050	(Hasgall et al., 2018)
$c_p$ (J/kgK)	2	3630	74	3578	3682	(Hasgall et al., 2018)
$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )	4	1050	17	1025	1060	(Hasgall et al., 2018)
$c_b$ (J/kgK)	3	3617	301	3300	3900	(Hasgall et al., 2018)
$\omega_b$ (1/s)	43	0,010	0,002	0,007	0,017	(Hasgall et al., 2018)
$Q_m$ (W/m <sup>3</sup> )	43	11893	209,2	8755	20784	(Hasgall et al., 2018)
$T_b$ (°C)	-	36,7	0,05	-	-	(Elwassif et al., 2006, 2012)
$T_a$ (°C)	-	37,0	0,05	-	-	(Elwassif et al., 2006, 2012)
$V_{rms}$ (V)	-	1,05	0,05	-	-	Obtido na seção 6.1

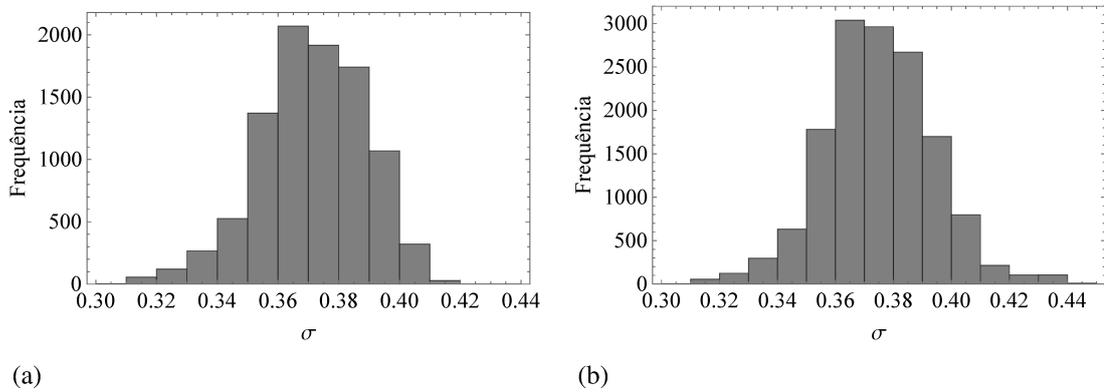
Fonte: A autora, 2023.

Figura 62 - Estados da Cadeia de Markov para  $\sigma$ .



Fonte: A autora, 2023.

Figura 63 - Histogramas para o caso com  $\sigma_{est}$  considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov.



Legenda: (a) Entre os estados 500 e 10000. (b) Entre os estados 500 e 15000.

Fonte: A autora, 2023.

Na Tabela 26 estão os valores de média e desvio padrão obtidos para os parâmetros que foram considerados com prioris informativas, onde observa-se que os valores médios ficam próximos aos valores exatos, pois as incertezas consideradas são pequenas.

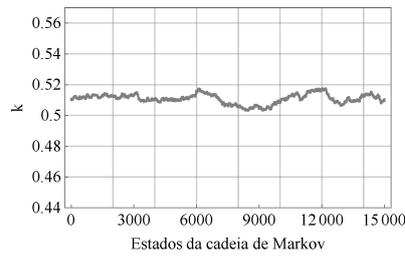
Tabela 26 - Valor exato, média e desvio padrão obtidos na solução MCMC com Metropolis-Hastings em duas etapas.

Parâmetros	Valor exato	Média	Desvio Padrão
$k$ (W/mK)	0,510	0,511	0,003
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1046	1044	2,340
$c_p$ (J/kgK)	3630	3623	30,78
$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )	1050	1047	8,824
$c_b$ (J/kgK)	3617	3585	31,68
$\omega_b$ (1/s)	0,0100	0,0103	0,0002
$Q_m$ (W/m <sup>3</sup> )	11893	11854	145,26
$T_b$ (°C)	36,70	36,67	0,043
$T_a$ (°C)	37,00	36,99	0,020
$V_{rms}$ (V)	1,050	1,087	0,026

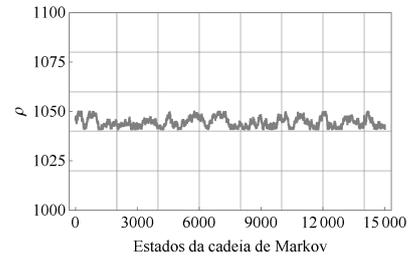
Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 64 estão as cadeias de Markov para os parâmetros que foram considerados com prioris informativas. Como esperado, os seus valores variam dentro dos intervalos especificados anteriormente na Tabela 25.

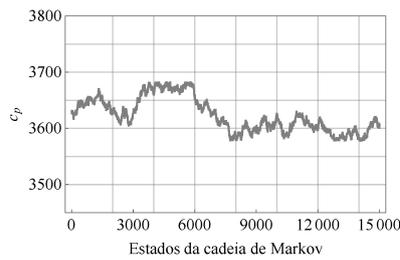
Figura 64 - Estados da Cadeia de Markov para os parâmetros do vetor  $\theta_1$ .



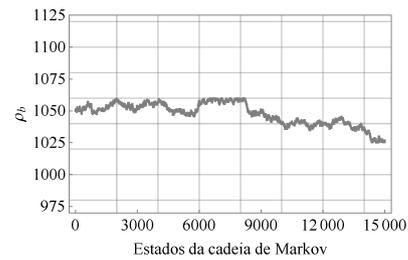
(a)



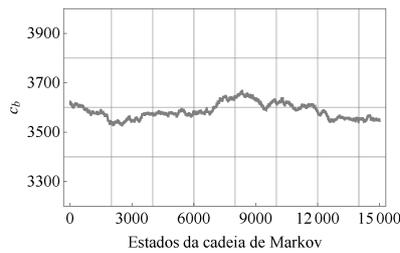
(b)



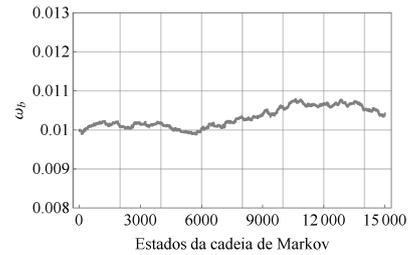
(c)



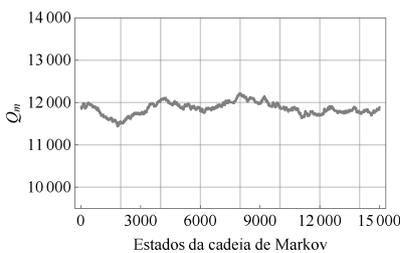
(d)



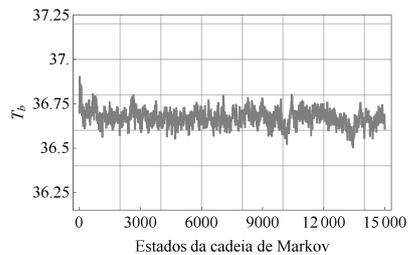
(e)



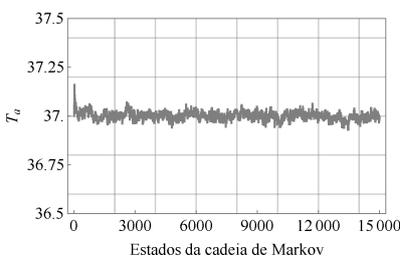
(f)



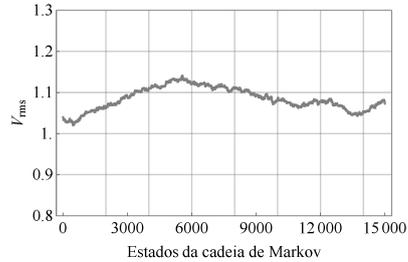
(g)



(h)



(i)

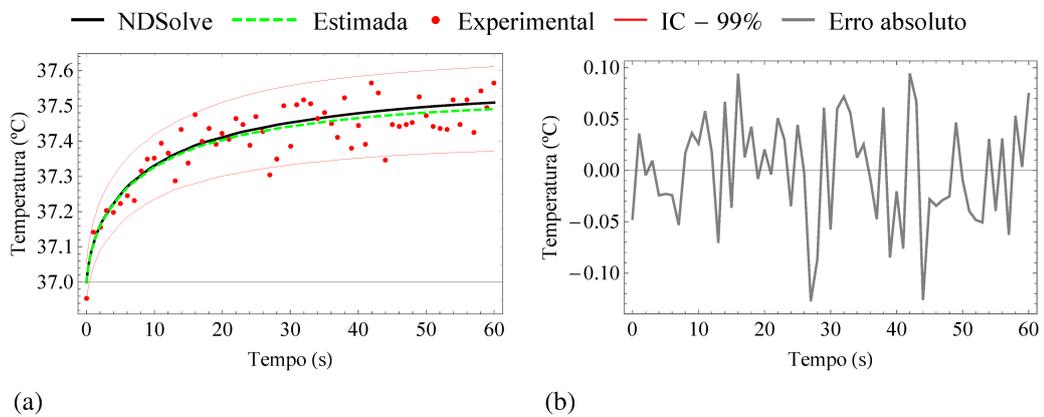


(j)

Fonte: A autora, 2023.

A Figura 65a apresenta as curvas do problema direto via NDSolve (levando em conta os valores da Tabela 25), das medidas experimentais, do problema estimado e o intervalo de credibilidade de 99%. Na Figura 65b encontra-se o resíduo entre a solução estimada e as medidas experimentais, que possui um erro absoluto da ordem de  $0, 1^{\circ}\text{C}$ . A Figura 66 mostra as soluções obtidas com a NDSolve e estimadas em outros pontos do domínio computacional. Portanto, As figuras mostram que o valor de  $\sigma$  estimado consegue representar a solução esperada levando em consideração as medidas experimentais e suas incertezas.

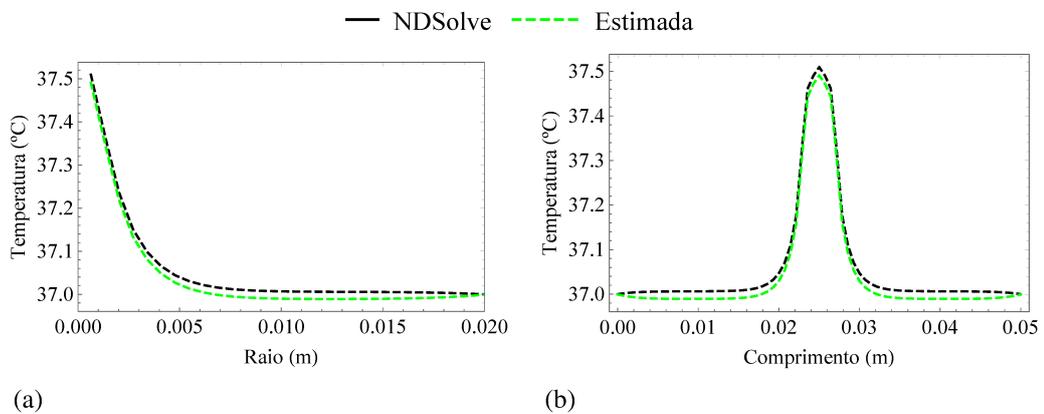
Figura 65 - Campos de temperatura obtido com a solução do problema direto NDSolve, estimado, experimental e resíduo entre as soluções.



Legenda: (a) Temperaturas. (b) Resíduo.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 66 - Campos de temperatura obtidos com a solução do problema direto NDSolve e estimados em diferentes posições de  $r$  e  $z$  e  $t = tf$ .



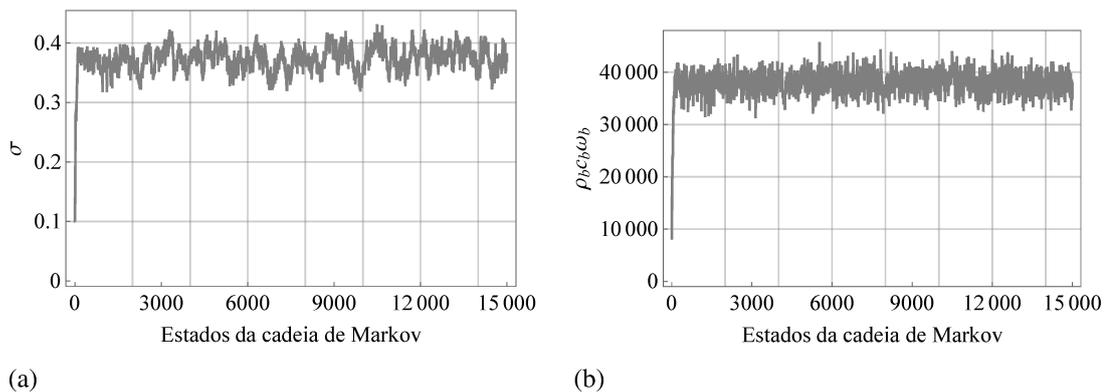
Legenda: (a) Ao longo do raio em  $z = H/2$ . (b) Ao longo do comprimento em  $r = R_1$ .

Fonte: A autora, 2023.

A análise de sensibilidade apresentada na seção 6.2.1 mostra que há dependência linear entre os parâmetros  $P_1 = V_{rms}$  e  $P_3 = \sigma$ , e entre os parâmetros  $P_6 = Q_m$  e  $P_7 = \rho_b c_b \omega_b$ . Além disso,  $P_5 = \rho c_p$  possui pouca sensibilidade, enquanto  $P_4 = T_a$  e  $P_8 = T_b$  são os mais sensíveis. Nesse contexto, um novo teste de estimativa de parâmetros foi realizado, dessa vez escolhendo estimar  $\sigma$  e  $\rho_b c_b \omega_b$ . Nesse caso,  $\theta_1 = (k, \rho, c_p, Q_m, T_b, T_a, V_{rms})$  e  $\theta_2 = (P_3, P_7)$ , sendo  $P_3 = \sigma$  e  $P_7 = \rho_b c_b \omega_b$ . Como  $T_b$  e  $T_a$  são mais sensíveis foi necessário limitar a região em que as temperaturas podem transitar. Dessa forma, considerou-se para as temperaturas uma distribuição à priori gaussiana truncada onde os valores de  $T_b$  e  $T_a$  podem variar de acordo com:  $T_b = T_{b,med} \pm 0,1$  e  $T_a = T_{a,med} \pm 0,1$  sendo  $T_{med}$  o valor médio disponibilizado na Tabela 25. Para o parâmetro  $P_7$  considerou-se distribuição à priori gaussiana com  $P_{7,med} = \rho_{b,med} * c_{b,med} * \omega_{b,med} = 1050 * 3617 * 0,01 = 37978,5$  e desvio padrão de 5% de  $P_{7,med}$ . Os demais parâmetros foram considerados com as mesmas distribuições utilizadas no caso anterior.

Para a inicialização da cadeia de Markov os parâmetros do vetor  $\theta_1$  foram assumidos com os valores de média da Tabela 25, enquanto para os parâmetros de  $\theta_2$  utilizou-se  $P_{3,ini} = 0,1$  e  $P_{7,ini} = 10000$ . Na Figura 67 encontram-se as cadeias de Markov obtidas para os parâmetros  $P_3$  e  $P_7$  considerando 15000 estados com 25% de aceitação. Desprezando os 500 estados de *burn-in*, foram encontradas médias de  $P_{3,est} = 0,376$  e  $P_{7,est} = 38203$ , cujos os valores apresentam, respectivamente, erro relativo percentual de 0,4% e 0,6% quando comparados aos valores de média disponibilizados na Tabela 25. Além disso, os desvios padrão foram  $s_{P_{3,est}} = 0,019$  e  $s_{P_{7,est}} = 1900$ .

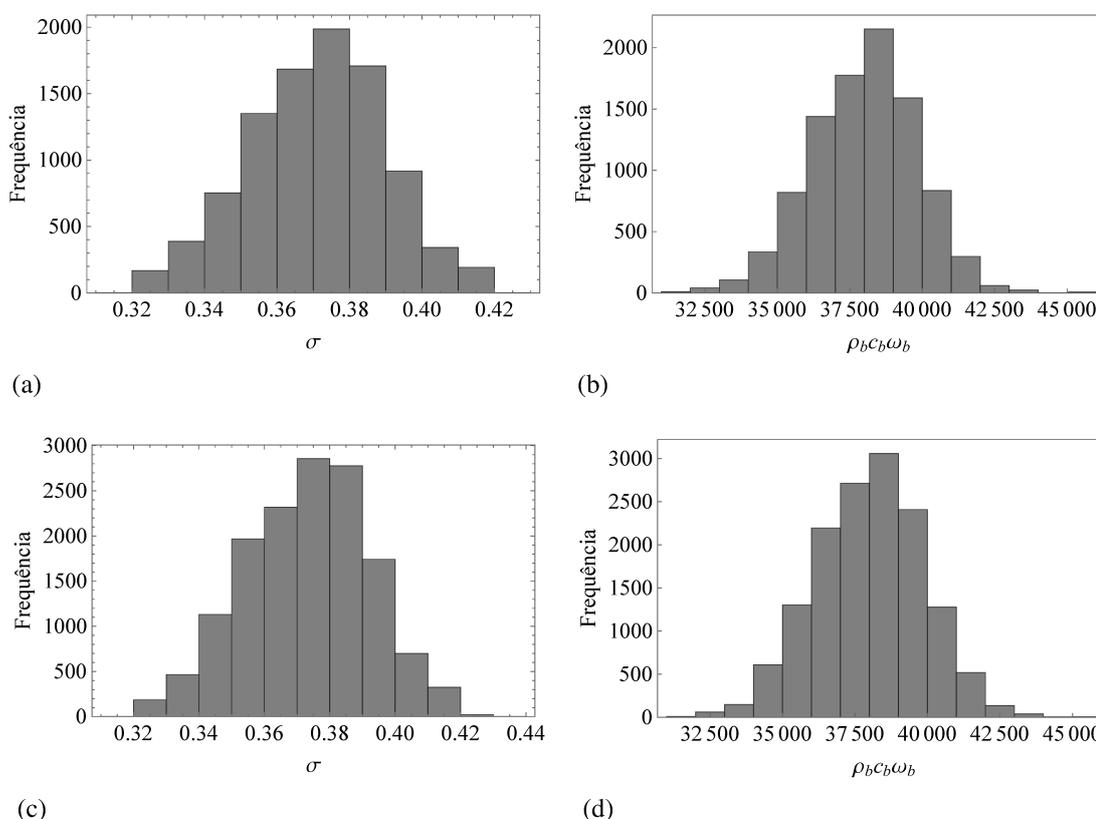
Figura 67 - Estados da Cadeia de Markov para  $P_3 = \sigma$  e  $P_7 = \rho_b c_b \omega_b$ .



Fonte: A autora, 2023.

Com o intuito de verificar a convergência da cadeia de Markov, foram gerados os histogramas da Figura 68. Nas Figuras 68a e 68b encontram-se os histogramas gerados no intervalo entre os estados 500 à 10000 para  $P_3$  e  $P_7$ . Já nas Figuras 68c e 68d encontram-se os histogramas entre os estados 500 à 15000. Como os histogramas permanecem com a mesma característica gaussiana em ambos os casos, considera-se que as cadeias encontram-se convergidas.

Figura 68 - Histogramas para o caso com  $P_{3,est}$  e  $P_{7,est}$  considerando diferentes números de estados da cadeia de Markov.

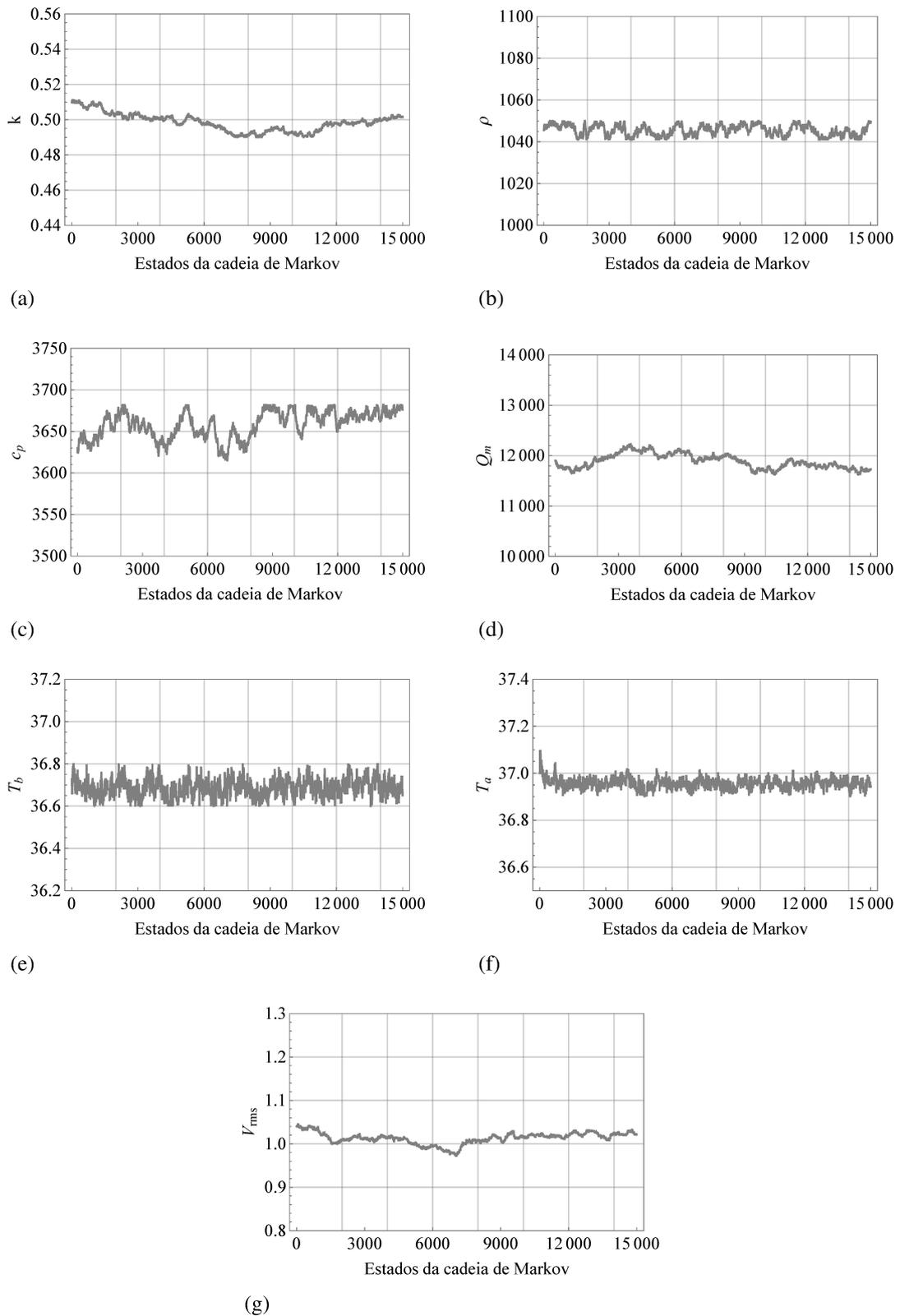


Legenda: (a) Para  $P_3$  entre os estados 500 e 10000. (b) Para  $P_5$  entre os estados 500 e 10000.  
(c) Para  $P_3$  entre os estados 500 e 15000. (d) Para  $P_5$  entre os estados 500 e 15000.

Fonte: A autora, 2023.

Na Figura 69 estão as cadeias de Markov para os demais parâmetros que foram considerados com priori informativa, onde observa-se o pequeno intervalo de variação dos parâmetros. A Figura 70a mostra a curva obtida com o problema direto via NDSolve considerando os valores médios da Tabela 25, os 61 valores de temperatura experimental, a curva de temperatura considerando os valores médios dos parâmetros obtidos com o MCMC e o intervalo de credibilidade de 99%. Na Figura 70b encontra-se o resíduo entre a solução MCMC e as medidas experimentais simuladas onde é possível notar que o erro absoluto é da ordem de  $0,1\text{ }^\circ\text{C}$ .

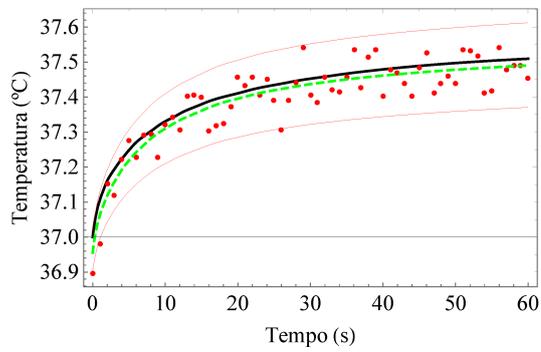
Figura 69 - Estados da Cadeia de Markov para os parâmetros do vetor  $\theta_1$  no caso com  $P_{3,est}$  e  $P_{7,est}$ .



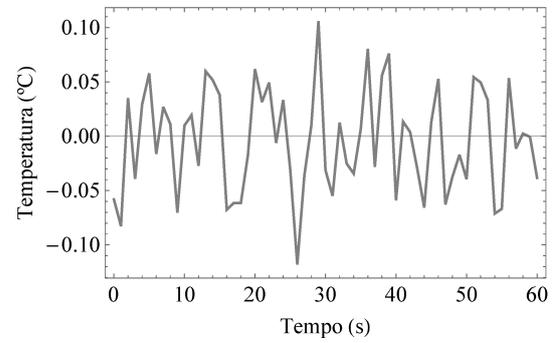
Fonte: A autora, 2023.

Figura 70 - Campos de temperatura obtidos com a solução do problema direto NDSolve, estimado, experimental e resíduo entre as soluções para o caso com  $P_{3,est}$  e  $P_{7,est}$ .

— NDSolve    - - - Estimada    • Experimental    - - - IC - 99%    — Erro absoluto



(a)



(b)

Legenda: (a) Temperaturas. (b) Resíduo.

Fonte: A autora, 2023.

## CONCLUSÕES

Este trabalho abordou a solução de problemas de estimativa de variáveis de estado e parâmetros relacionados à atividade elétrica do DBS no cérebro com o intuito de aprimorar a precisão da análise térmica e prevenir danos e/ou aquecimento excessivo decorrente do uso do eletrodo. Primeiramente, o problema direto associado foi resolvido com o MEF implementado usando a função `NDSolve`, intrínseca ao software de computação simbólica Wolfram Mathematica, e verificado com o MDF. O problema inverso foi resolvido utilizando abordagens de solução por inferência bayesiana, sendo elas o MCMC e os filtros de partículas. Nesse sentido, utilizou-se o método MCMC para estimar o potencial elétrico aplicado no eletrodo considerando um problema permanente. Além disso, utilizou-se os filtros de partículas SIR, ASIR e de Liu & West para melhorar a precisão do campo de temperatura estimado levando em consideração um maior número de incertezas no problema em regime transiente. Por fim, com o intuito de estimar parâmetros presentes no modelo matemático transiente, utilizou-se o método MCMC com o algoritmo de Metropolis-Hastings em duas etapas.

Considerando os resultados para o perfil de temperatura obtidos por [Elwassif et al. \(2006\)](#) como medidas experimentais simuladas foi possível obter o potencial elétrico aplicado ao problema permanente utilizando o método MCMC. Nesse estudo, inicialmente, foram realizadas simulações com o objetivo de estimar o potencial elétrico e considerando os demais parâmetros do modelo matemático como constantes. Considerou-se o potencial elétrico com uma informação a priori do tipo uniforme. Em seguida, considerou-se que os parâmetros possuíam incertezas com o intuito de tornar o problema mais realista, pois se tratando de tecido humano, os parâmetros podem ter pequenas variações de pessoa para pessoa. Nesse caso, foram utilizadas informações a priori informativas do tipo gaussiana truncada para as condutividades térmicas e elétricas e do tipo gaussiana para a temperatura nos contornos. Todos os casos analisados obtiveram boas estimativas com baixo custo computacional (menos de 40 minutos). A média e o desvio padrão do potencial elétrico obtido foram utilizados como parâmetros para as soluções do modelo transiente.

Os resultados com os filtros de partículas mostram que as temperaturas estimadas estavam em excelente concordância com as temperaturas exatas para os três algoritmos, considerando diferentes desvios padrão para os modelos de evolução e observação. Os algoritmos SIR e ASIR consideram os parâmetros do problema deterministicamente conhecido enquanto o algoritmo de Liu & West permite incertezas nos parâmetros. No entanto, a inclusão de incertezas faz com que todo o problema direto precise ser executado novamente a cada passo de tempo, o que aumenta o custo computacional, como pode ser visto nas Tabelas 16, 19 e 22, mas tem a vantagem de poder estimar algum parâmetro desconhecido. As temperaturas máximas estimadas com os filtros ficaram entre  $37,52^{\circ}\text{C}$  e  $37,69^{\circ}\text{C}$ , enquanto a temperatura máxima obtida com a solução `NDSolve` foi de  $37,52^{\circ}\text{C}$ , ou seja, as soluções possuem erro relativo percentual

menor do que 0,5%.

Por fim, os resultados obtidos utilizando o método MCMC com o algoritmo Metropolis-Hastings em duas etapas mostram que é possível estimar alguns parâmetros do modelo matemático mesmo levando em consideração as incertezas associadas aos demais parâmetros. O processo em duas etapas divide o problema em dois blocos, onde os parâmetros que possuem incertezas são contabilizados no bloco um com prioris muito informativas e as variáveis de projeto são contabilizadas no bloco dois com prioris menos informativas que permitem maior variação no parâmetro que se deseja estimar. Dividir o método MCMC em duas etapas aumenta o custo computacional, mas facilita a estimativa dos parâmetros desejados, pois o procedimento de amostragem e o teste de aceitação/rejeição são realizados separadamente para cada bloco de parâmetros. Nesse caso, foram utilizadas prioris do tipo uniforme, gaussiana e gaussiana truncada, a depender das informações disponíveis sobre cada parâmetro. Utilizando os valores médios estimados dos parâmetros a temperatura máxima alcançada foi de 37,50°C, ou seja, com erro relativo percentual menor do que 0,1% quando comparada a temperatura máxima obtida com a solução NDSolve.

Portanto, as soluções apresentadas mostram abordagens promissora para reduzir o risco de lesões relacionadas à técnica de estimulação cerebral profunda e abrem a possibilidade de estimar propriedades desconhecidas que podem facilitar na decisão feita para calibrar os parâmetros do procedimento DBS.

## **Trabalhos futuros**

Como sugestões para trabalhos futuros pode-se citar:

- O aumento da complexidade do modelo, por exemplo, incluindo uma camada de tecido ao redor do eletrodo que pode apresentar propriedades diferentes devido a danos mecânicos causados durante a implantação da sonda;
- Caso o aumento da complexidade do modelo gere grande aumento do custo computacional das soluções, utilizar modelos de erro de aproximação para diminuir esse custo;
- Resolver o problema inverso considerando que as propriedades a serem estimadas variam com o tempo;
- Incluir a disponibilidade de temperatura experimental em outros pontos do eletrodo.

## REFERÊNCIAS

- ABRAHAM, J. P.; SPARROW, E. M. A thermal-ablation bioheat model including liquid-to-vapor phase change, pressure-and necrosis-dependent perfusion, and moisture-dependent properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 50, n. 13-14, p. 2537–2544, 2007.
- AHSAN, F. et al. EMvelop stimulation: minimally invasive deep brain stimulation using temporally interfering electromagnetic waves. *Journal of Neural Engineering*, IOP Publishing, v. 19, n. 4, p. 046005, 2022.
- ALAEIAN, M.; ORLANDE, H. R. B.; LAMIEN, B. Application of the photoacoustic technique for temperature measurements during hyperthermia. *Inverse Problems in Science and Engineering*, Taylor & Francis, v. 27, n. 12, p. 1651–1671, 2018.
- ALAMOUTI, A. K. et al. Numerical study on the effects of blood perfusion and tumor metabolism on tumor temperature for targeted hyperthermia considering a realistic geometrical model of head layers using the finite element method. *SN Applied Sciences*, Springer, v. 3, n. 4, p. 1–17, 2021.
- ALIFANOV, O. M. Solution of an inverse problem of heat conduction by iteration methods. *Journal of Engineering Physics*, Springer, v. 26, n. 4, p. 471–476, 1974.
- ANDREOZZI, A. et al. Numerical analysis of the pulsating heat source effects in a tumor tissue. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, Elsevier, v. 200, p. 105887, 2021.
- ANSARI, F.; CHAUDHARY, R. K.; SINGH, J. Numerical simulation of burn injuries with temperature-dependent thermal conductivity and metabolism under different surface heat sources. *Journal of Thermal Biology*, Elsevier, v. 116, p. 103656, 2023.
- ARIANPOUYA, M. et al. Safe MRI of deep brain stimulation implants: A review of the promises and challenges. *Frontiers in Neurology and Neuroscience Research*, v. 2, p. 100012, 2021.
- ARULAMPALAM, M. S. et al. A tutorial on particle filters for online nonlinear/non-gaussian Bayesian tracking. *Transactions on Signal Processing*, IEEE, v. 50, n. 2, p. 174–188, 2002.
- AUM, D. J.; TIERNEY, T. S. Deep brain stimulation: foundations and future trends. *Front Biosci (Landmark Ed)*, v. 23, n. 7, p. 162–182, 2018.
- BAKER, T. S. et al. Development and clinical validation of a finite element method model mapping focal intracranial cooling. *Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, IEEE, v. 30, p. 2168–2174, 2022.
- BARROS, T. M. S. M.; ABREU, L. A. S.; KNUPP, D. C. Solução da equação de biotransferência de calor em tecido multicamada via transformações integrais com formulação de domínio único. In: ENMC/ECTM. *Anais do Encontro Nacional de Modelagem Computacional e Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais*. Juiz de Fora, MG, 2019.
- BATHE, K. *Finite Element Procedures*. [S.l.]: Prentice Hall, 1996. (Finite Element Procedures, pt. 2).

- BAYES, T. LII. An essay towards solving a problem in the doctrine of chances. By the late Rev. Mr. Bayes, F.R.S communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton, A.M.F.R.S. *Philosophical Transactions*, The Royal Society London, n. 53, p. 370–418, 1763.
- BECK, J. V. Sequential methods in parameter estimation. *Inverse Engineering Handbook*, CRC Press, New York, NY, US, p. 1–40, 2003.
- BECK, J. V.; ARNOLD, K. J. *Parameter estimation in engineering and science*. New York, NY, US: John Wiley & Sons, 1977.
- BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; CLAIR JUNIOR, C. R. S. *Inverse heat conduction: Ill-posed problems*. New York, NY, US: John Wiley & Sons, 1985.
- BENABID, A.-L. et al. Combined (thalamotomy and stimulation) stereotactic surgery of the VIM thalamic nucleus for bilateral Parkinson disease. *Stereotactic and Functional Neurosurgery*, Karger Publishers, v. 50, n. 1-6, p. 344–346, 1987.
- BERGMAN, H.; WICHMANN, T.; DELONG, M. R. Reversal of experimental parkinsonism by lesions of the subthalamic nucleus. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 249, n. 4975, p. 1436–1438, 1990.
- BOUSSELHAM, A. et al. Towards an accurate MRI acute ischemic stroke lesion segmentation based on bioheat equation and u-net model. *International Journal of Biomedical Imaging*, Hindawi, v. 2022, 2022.
- BOUTET, A. et al. Improving safety of MRI in patients with deep brain stimulation devices. *Radiology*, Radiological Society of North America, v. 296, n. 2, p. 250–262, 2020.
- BRONSTEIN, J. M. et al. Deep brain stimulation for Parkinson disease: an expert consensus and review of key issues. *Archives of Neurology*, American Medical Association, v. 68, n. 2, p. 165–165, 2011.
- CANTRELL, D. R. et al. Incorporation of the electrode–electrolyte interface into finite-element models of metal microelectrodes. *Journal of Neural Engineering*, IOP Publishing, v. 5, n. 1, p. 54, 2007.
- CARDENAS, L. L. R.; VARON, L. A. B.; PEREIRA, W. C. A. Parameter estimation in high-intensity focused ultrasound therapy. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley Online Library, v. 38, n. 5, p. e3591, 2022.
- CASTELLO, D. A.; RITTO, T. G. *Quantificação de incertezas e estimação de parâmetros em dinâmica estrutural: uma introdução a partir de exemplos computacionais*. São Carlos, SP: Notas em Matemática Aplicada. SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2016. v. 81.
- CHANG, I. Finite element analysis of hepatic radiofrequency ablation probes using temperature-dependent electrical conductivity. *Biomedical Engineering Online*, Springer, v. 2, n. 1, p. 1–18, 2003.
- CHEN, M. M.; HOLMES, K. R. Microvascular contributions in tissue heat transfer. *Annals of the New York Academy of Sciences*, Wiley Online Library, v. 335, n. 1, p. 137–150, 1980.

- CIESIELSKI, M.; MOCHNACKI, B. Hyperbolic model of thermal interactions in a system biological tissue—protective clothing subjected to an external heat source. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 74, n. 11, p. 1685–1700, 2018.
- COOK, R. *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*. [S.l.]: Wiley, 2001.
- CUBO, R.; MEDVEDEV, A. Online tissue conductivity estimation in deep brain stimulation. *Transactions on Control Systems Technology*, IEEE, v. 28, n. 1, p. 149–162, 2018.
- CUBO, R.; MEDVEDEV, A.; ÅSTRÖM, M. Model-based optimization of individualized deep brain stimulation therapy. *Design & Test*, IEEE, v. 33, n. 4, p. 74–81, 2015.
- CUI, T. *Bayesian calibration of geothermal reservoir models via Markov Chain Monte Carlo*. Tese (Doutorado) — ResearchSpace@ Auckland, 2010.
- DAVIDSON, B. et al. Three-Tesla magnetic resonance imaging of patients with deep brain stimulators: results from a phantom study and a pilot study in patients. *Neurosurgery*, Oxford University Press, v. 88, n. 2, p. 349–355, 2021.
- DAWSON, C. et al. Can you take the heat? model of temperature and neuronal membrane potential changes in the brain tissue due to deep brain stimulation. 2023.
- DODGE JR., H. W. et al. Technics and potentialities of intracranial electrography. *Postgraduate Medicine*, Taylor & Francis, v. 15, n. 4, p. 291–300, 1954.
- DOUCET, A. et al. *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. New York, NY, US: Springer, 2001. v. 1.
- ELWASSIF, M. M. et al. Temperature control at DBS electrodes using a heat sink: experimentally validated FEM model of DBS lead architecture. *Journal of Neural Engineering*, IOP Publishing, v. 9, n. 4, p. 046009, 2012.
- ELWASSIF, M. M. et al. Bio-heat transfer model of deep brain stimulation-induced temperature changes. *Journal of Neural Engineering*, IOP Publishing, v. 3, n. 4, p. 306–315, 2006.
- FERREIRA, L. F. S. et al. Design under uncertainties of the thermal ablation treatment of skin cancer. *Journal of Heat and Mass Transfer*, American Society of Mechanical Engineers, v. 145, n. 3, p. 031202, 2023.
- FIOCCHI, S. et al. Numerical modelling of temperature increase induced by transcutaneous spinal direct current stimulation (tsDC). In: IEEE XPLORE. *20th Mediterranean Electrotechnical Conference (MELECON)*. Palermo, Italy, 2020. p. 424–428.
- GAMERMAN, D.; LOPES, H. F. *Markov chain Monte Carlo: Stochastic simulation for Bayesian inference*. Boca Raton, FL, USA: Taylor & Francis Group, 2006.
- GARDNER, J. A history of deep brain stimulation: Technological innovation and the role of clinical assessment tools. *Social Studies of Science*, Sage Publications Sage UK: London, England, v. 43, n. 5, p. 707–728, 2013.
- GOLESTANIRAD, L. et al. RF heating of deep brain stimulation implants in open-bore vertical MRI systems: A simulation study with realistic device configurations. *Magnetic Resonance in Medicine*, Wiley Online Library, v. 83, n. 6, p. 2284–2292, 2020.

- GUPTA, P. K.; SINGH, J.; RAI, K. N. A numerical study on heat transfer in tissues during hyperthermia. *Mathematical and Computer Modelling*, Elsevier, v. 57, n. 5-6, p. 1018–1037, 2013.
- HARIZ, M. I.; BLOMSTEDT, P.; ZRINZO, L. Deep brain stimulation between 1947 and 1987: the untold story. *Neurosurgical Focus*, American Association of Neurological Surgeons, v. 29, n. 2, p. E1, 2010.
- HARMSSEN, I. E. et al. Clinical trials for deep brain stimulation: current state of affairs. *Brain Stimulation*, Elsevier, v. 13, n. 2, p. 378–385, 2020.
- HASGALL, P. A. et al. IT'IS database for thermal and electromagnetic parameters of biological tissues. *Version 4.0*, 2018.
- HOBINY, A. D.; ABBAS, I. A. Theoretical analysis of thermal damages in skin tissue induced by intense moving heat source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 124, p. 1011–1014, 2018.
- JARDIM, L. C. S. et al. Brain thermal and electrical properties estimation using experimental data from deep brain stimulation lead. *Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão*, v. 5, n. 6, 2020.
- KAPIO, J.; SOMERSALO, E. *Statistical and computational inverse problems*. New York, NY, US: Springer Science & Business Media, 2006. v. 160.
- KAPIO, J. P.; FOX, C. The Bayesian framework for inverse problems in heat transfer. *Heat Transfer Engineering*, Taylor & Francis, v. 32, n. 9, p. 718–753, 2011.
- KALMAN, R. E. A new approach to linear filtering and prediction problems. v. 82, p. 35–45, 1960.
- KELLER, K. H.; SEILER JUNIOR, L. An analysis of peripheral heat transfer in man. *Journal of Applied Physiology*, v. 30, n. 5, p. 779–786, 1971.
- KHADKA, N. et al. Bio-heat model of kilohertz-frequency deep brain stimulation increases brain tissue temperature. *Neuromodulation: Technology at the Neural Interface*, Wiley Online Library, v. 23, n. 4, p. 489–495, 2020.
- KIM, S. et al. Thermal impact of an active 3-D microelectrode array implanted in the brain. *Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, IEEE, v. 15, n. 4, p. 493–501, 2007.
- KRAUSS, J. K. et al. Technology of deep brain stimulation: current status and future directions. *Nature Reviews Neurology*, Nature Publishing Group, v. 17, n. 2, p. 75–87, 2021.
- KRAUSS, J. K. et al. Deep brain stimulation for dystonia. *Journal of Clinical Neurophysiology*, LWW, v. 21, n. 1, p. 18–30, 2004.
- LAM, J. et al. Deep brain stimulation for Alzheimer's disease: Tackling circuit dysfunction. *Neuromodulation: Technology at the Neural Interface*, Wiley Online Library, v. 24, n. 2, p. 171–186, 2021.

- LAMIEN, B.; ORLANDE, H. R. B.; ELIÇABE, G. E. Particle filter and approximation error model for state estimation in hyperthermia. *Journal of Heat Transfer*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 139, n. 1, 2017.
- LAMIEN, B. et al. Estimation of the temperature field in laser-induced hyperthermia experiments with a phantom. *International Journal of Hyperthermia*, Taylor & Francis, v. 35, n. 1, p. 279–290, 2018.
- LAMIEN, B. et al. State estimation in bioheat transfer: a comparison of particle filter algorithms. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Emerald Publishing Limited, v. 27, n. 3, p. 615–638, 2017.
- LIU, J.; WEST, M. Combined parameter and state estimation in simulation-based filtering. In: *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. New York, NY, US: Springer, 2001. p. 197–223.
- LOIOLA, B. R.; ORLANDE, H. R.; DULIKRAVICH, G. S. Thermal damage during ablation of biological tissues. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 73, n. 10, p. 685–701, 2018.
- LOPEZ-QUINTERO, S. V. et al. DBS-relevant electric fields increase hydraulic conductivity of in vitro endothelial monolayers. *Journal of Neural Engineering*, IOP Publishing, v. 7, n. 1, p. 016005, 2010.
- LOPEZ, W. O. C. et al. Directional deep brain stimulation of the posteromedial hypothalamus for refractory intermittent explosive disorder: a case series using a novel neurostimulation device and intraoperative microdialysis. *World Neurosurgery*, Elsevier, v. 155, p. 19–33, 2021.
- LOZANO, A. M. et al. Deep brain stimulation: current challenges and future directions. *Nature Reviews Neurology*, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 3, p. 148–160, 2019.
- MACEROLLO, A. et al. Deep brain stimulation in dystonia: State of art and future directions. *Journal of Neuroscience Methods*, Elsevier, v. 340, p. 108750, 2020.
- MAGALHÃES, F. Y.; ORLANDE, H. R. B.; SUASSUNA, J. H. R. Sequential estimation of creatinine removal by a haemodialyser. *Inverse Problems in Science and Engineering*, Taylor & Francis, p. 1–21, 2021.
- MALEKMOHAMADI, M. H.; AHMADIKIA, H. Hyperthermia mathematical modeling in living tissue with arteries and veins. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier, v. 184, p. 107954, 2023.
- MCELCHERAN, C. E. et al. Numerical simulations of realistic lead trajectories and an experimental verification support the efficacy of parallel radiofrequency transmission to reduce heating of deep brain stimulation implants during MRI. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group, v. 9, n. 1, p. 1–14, 2019.
- MEDTRONIC, I. *DBS Lead Kit for Deep Brain Stimulation - Model 3387/3389*. Minneapolis, MN, US, 2008.
- MERRILL, D. R.; BIKSON, M.; JEFFERYYS, J. G. R. Electrical stimulation of excitable tissue: design of efficacious and safe protocols. *Journal of Neuroscience Methods*, Elsevier, v. 141, n. 2, p. 171–198, 2005.

- MITCHELL, J. W.; MYERS, G. E. An analytical model of the counter-current heat exchange phenomena. *Biophysical Journal*, Elsevier, v. 8, n. 8, p. 897–911, 1968.
- NAMAKSHENAS, P. et al. Optimization of laser dosimetry based on patient-specific anatomical models for the ablation of pancreatic ductal adenocarcinoma tumor. *Scientific Reports*, Nature Publishing Group UK London, v. 13, n. 1, p. 11053, 2023.
- NG, E. Y. K.; JAMIL, M. Parametric sensitivity analysis of radiofrequency ablation with efficient experimental design. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier, v. 80, p. 41–47, 2014.
- NORDBECK, P. et al. Measuring RF-induced currents inside implants: impact of device configuration on MRI safety of cardiac pacemaker leads. *Magnetic Resonance in Medicine: An Official Journal of the International Society for Magnetic Resonance in Medicine*, Wiley Online Library, v. 61, n. 3, p. 570–578, 2009.
- NOVAK FILHO, J. L.; MENESES, A. P. B. de; MENESES, M. S. de. Estimulação cerebral profunda. Perspectivas da neuromodulação em distúrbios neuropsiquiátricos. *JBNC - Jornal Brasileiro de Neurocirurgia*, v. 30, n. 3, p. 223–230, 2019.
- NUNES, F. S.; ORLANDE, H. R. B.; NOWAK, A. J. Estimation of the ischemic brain temperature with the particle filter method. *Computer Assisted Methods in Engineering and Science*, v. 26, n. 1, p. 5–19, 2019.
- NUNES, F. S.; ORLANDE, H. R. B.; NOWAK, A. J. An inverse analysis of the brain cooling process in neonates using the particle filter method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Emerald Publishing Limited, v. 32, n. 12, p. 3908–3934, 2022.
- ORLANDE, H. et al. Tutorial 10 - Kalman and particle filters. *Advanced Spring School: Thermal Measurements and Inverse Techniques*, v. 5, p. 1–39, 2011.
- ORLANDE, H. et al. *Problemas Inversos em Transferência de Calor*. São Carlos, SP, BR: Notas em Matemática Aplicada. SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2011. v. 51.
- ORLANDE, H. R. B. Inverse problems in heat transfer: new trends on solution methodologies and applications. *Journal of Heat Transfer*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 134, n. 3, 2012.
- ORLANDE, H. R. B.; DULIKRAVICH, G. S.; COLAÇO, M. J. Application of Bayesian filters to heat conduction problem. *International Conference on Engineering Optimization - EngOpt*, Citeseer, p. 1–5, 2008.
- ORLANDE, H. R. B. et al. *Thermal measurements and inverse techniques*. New York, NY, US: CRC Press, 2011.
- ORLANDE, H. R. B.; LUTAIF, N. A.; GONTIJO, J. A. R. Estimation of the kidney metabolic heat generation rate. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley Online Library, v. 35, n. 9, p. e3224, 2019.
- ÖZISIK, M. N. *Heat Conduction*. New York, NY, US: John Wiley & Sons, 1993.

- ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. New York, NY, US: Taylor & Francis, 2000.
- ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. New York, NY, US: CRC press, 2021.
- PACHECO, C. et al. State estimation problems in PRF-shift magnetic resonance thermometry. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, Emerald Publishing Limited, v. 28, n. 2, p. 315–335, 2018.
- PACHECO, C. C. et al. Real-time temperature estimation with enhanced spatial resolution during MR-guided hyperthermia therapy. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 77, n. 8, p. 782–806, 2020.
- PENNES, H. H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. *Journal of Applied Physiology*, v. 1, n. 2, p. 93–122, 1948.
- PEREIRA, C. R.; ABREU, L. A. S.; KNUPP, D. C. Modelo de erro de aproximação para estimativa de fluxo de calor na equação de biotransferência de calor unidimensional. *Revista Cereus*, v. 14, n. 2, p. 236–251, 2022.
- PEREIRA, C. R. et al. Analysis under uncertainty with the monte carlo method applied to a bioheat transfer problem with coupled deep brain stimulation lead. v. 427, p. 37–46, 2023.
- PEYRET, R.; TAYLOR, T. D. *Computational Methods for Fluid Flow*. New York, NY, US: Springer-Verlag, 2012.
- PLATT, G. M.; YANG, X.-S.; SILVA NETO, A. J. *Computational Intelligence, Optimization and Inverse Problems with Applications in Engineering*. [S.l.]: Springer, 2018.
- POTEL, S. R. et al. Advances in DBS technology and novel applications: focus on movement disorders. *Current Neurology and Neuroscience Reports*, Springer, v. 22, n. 9, p. 577–588, 2022.
- PUBMED. *Search: (deep brain stimulation)*. 2024. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/?term=%28deep+brain+stimulation%29>>.
- PUBMED. *Search: (deep brain stimulation) AND (temperature)*. 2024. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/?term=%28deep+brain+stimulation%29+AND+%28temperature%29&sort=>>>.
- RAOUL, S. et al. Deep brain stimulation electrodes used for staged lesion within the basal ganglia: experimental studies for parameter validation. *Journal of Neurosurgery*, American Association of Neurological Surgeons, v. 107, n. 5, p. 1027–1035, 2007.
- REZAI, A. R. et al. Neurostimulation system used for deep brain stimulation (DBS): MR safety issues and implications of failing to follow safety recommendations. *Investigative Radiology*, LWW, v. 39, n. 5, p. 300–303, 2004.
- RISTIC, B.; ARULAMPALAM, S.; GORDON, N. *Beyond the Kalman Filter: Particle Filters for Tracking Applications*. Boston, MA, US: Artech House, 2003.
- ROHATGI, A. *Webplotdigitizer: Version 4.6*. 2022. Disponível em: <<https://automeris.io/WebPlotDigitizer>>.

- ROJCZYK, M. et al. Inverse heat transfer problems: an application to bioheat transfer. *Computer Assisted Methods in Engineering and Science*, v. 22, n. 4, p. 365–383, 2017.
- RUBINSTEIN, R. Y.; KROESE, D. P. *Simulation and the Monte Carlo method*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- SADEGHI-TARAKAMEH, A. et al. A workflow for predicting temperature increase at the electrical contacts of deep brain stimulation electrodes undergoing MRI. *Magnetic resonance in medicine*, Wiley Online Library, v. 88, n. 5, p. 2311–2325, 2022.
- SALANOVA, V. Deep brain stimulation for epilepsy. *Epilepsy & Behavior*, Elsevier, v. 88, p. 21–24, 2018.
- SCHWALB, J. M.; HAMANI, C. The history and future of deep brain stimulation. *Neurotherapeutics*, Springer, v. 5, n. 1, p. 3–13, 2008.
- SERRANO-AMENOS, C. et al. Power budget of a skull unit in a fully-implantable brain-computer interface: Bio-heat model. *IEEE Transactions on Neural Systems and Rehabilitation Engineering*, IEEE, v. 31, p. 4029–4039, 2023.
- SERRANO-AMENOS, C. et al. Thermal analysis of a skull implant in brain-computer interfaces. In: IEEE. *42nd Annual International Conference of the Engineering in Medicine & Biology Society (EMBC)*. [S.l.], 2020. p. 3066–3069.
- SHIH, T.-C.; KOU, H.-S.; LIN, W.-L. Effect of effective tissue conductivity on thermal dose distributions of living tissue with directional blood flow during thermal therapy. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 29, n. 1, p. 115–126, 2002.
- SHRIVASTAVA, D. *Theory and Applications of Heat Transfer in Humans*. Burnsville, MN, US: John Wiley & Sons, 2018. v. 2.
- SILVA, N. P. da. *Problemas inversos no estudo do tratamento de câncer por hipertermia e quimioterapia in vitro*. Tese (Doutorado) — COPE/UFRJ, 2022.
- SILVA, N. P. da et al. Monte Carlo parameter estimation and direct simulation of in vitro hyperthermia-chemotherapy experiment. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 80, n. 5, p. 185–209, 2021.
- SILVA NETO, A. J. d.; BECCENERI, J. C. *Técnicas de Inteligência Computacional Inspiradas na Natureza: Aplicação em Problemas Inversos em Transferência Radiativa*. São Carlos, SP, BR: Notas em Matemática Aplicada. SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2012. v. 41.
- SILVA, R. L. S.; ALAEIAN, M.; ORLANDE, H. Design by stochastic simulations of the thermal ablation treatment of tumors with high intensity focused ultrasound. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, Taylor & Francis, p. 1–26, 2023.
- SILVA, W. B. *Aplicação de filtros de partículas para a assimilação de dados em problemas de fronteira móvel*. Tese (Doutorado) — Tese de Doutorado, PEM/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2012.
- SIMON, D. *Optimal State Estimation: Kalman,  $H_\infty$ , and Nonlinear Approaches*. Hoboken, NJ, US: John Wiley & Sons, 2006.

- SOBOL, I. M. *A Primer for the Monte Carlo Method*. Boca Raton, FL, US: CRC Press, 1994.
- SOIZE, C. *Stochastic Models of Uncertainties in Computational Mechanics*. Reston, VA, US: American Society of Civil Engineers Reston, 2012.
- STARR, P. A.; VITEK, J. L.; BAKAY, R. A. E. Ablative surgery and deep brain stimulation for Parkinson's disease. *Neurosurgery*, Oxford University Press, v. 43, n. 5, p. 989–1013, 1998.
- SUI, Y. et al. Deep brain stimulation initiative: toward innovative technology, new disease indications, and approaches to current and future clinical challenges in neuromodulation therapy. *Frontiers in Neurology*, Frontiers, v. 11, p. 1706, 2021.
- SUNG, D. et al. Predicting brain temperature in humans using bioheat models: Progress and outlook. *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*, SAGE Publications Sage UK: London, England, v. 43, n. 6, p. 833–842, 2023.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Washington, US: Taylor & Francis, 1997.
- TIKHONOV, A. N. Inverse problems in heat conduction. *Journal of Engineering Physics*, Springer, v. 29, n. 1, p. 816–820, 1975.
- TIKHONOV, A. N.; ARSENIN, V. I. A. K. *Solutions of ill-posed problems*. Washington, US: Vh Winston & Sons, 1977.
- UMADEVI, V.; RAGHAVAN, S. V.; JAIPURKAR, S. Framework for estimating tumour parameters using thermal imaging. *The Indian Journal of Medical Research*, Wolters Kluwer–Medknow Publications, v. 134, n. 5, p. 725, 2011.
- VARON, L. A. B. *Problema de estimativa de estado no tratamento de câncer com aquecimento por ondas eletromagnéticas na faixa de radiofrequência*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2015.
- VARON, L. A. B.; ORLANDE, H. R. B.; ELIÇABE, G. E. Estimation of state variables in the hyperthermia therapy of cancer with heating imposed by radiofrequency electromagnetic waves. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier, v. 98, p. 228–236, 2015.
- VARON, L. A. B.; ORLANDE, H. R. B.; ELIÇABE, G. E. Combined parameter and state estimation in the radio frequency hyperthermia treatment of cancer. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 70, n. 6, p. 581–594, 2016.
- VENTURA, I.; ABREU, L.; LOIOLA, B. Attenuation coefficient estimation in thermal ablation procedures. In: ABCM. *18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*. Online, 2020.
- VOLTA, A.; BANKS, J. I. On the electricity excited by the mere contact of conducting substances of different kinds. *The Philosophical Magazine*, Taylor & Francis, v. 7, n. 28, p. 289–311, 1800.
- WEINBAUM, S. et al. A new fundamental bioheat equation for muscle tissue: part I—blood perfusion term. *Transactions of the ASME*, 1997.
- Wolfram Research INC. *Mathematica, Version 11.1*. 2020. Champaign, IL. Disponível em: <<https://www.wolfram.com/mathematica>>.

WONG, J. K. et al. Deep brain stimulation in essential tremor: targets, technology, and a comprehensive review of clinical outcomes. *Expert Review of Neurotherapeutics*, Taylor & Francis, v. 20, n. 4, p. 319–331, 2020.

WU, H. et al. Deep brain stimulation for refractory obsessive-compulsive disorder (OCD): emerging or established therapy? *Molecular Psychiatry*, Nature Publishing Group, v. 26, n. 1, p. 60–65, 2021.

XIAO, Y. et al. Image guidance in deep brain stimulation surgery to treat Parkinson's disease: a comprehensive review. *Transactions on Biomedical Engineering*, IEEE, v. 68, n. 3, p. 1024–1033, 2021.

XU, W. et al. Deep brain stimulation for Tourette's syndrome. *Translational Neurodegeneration*, Springer, v. 9, n. 1, p. 1–19, 2020.

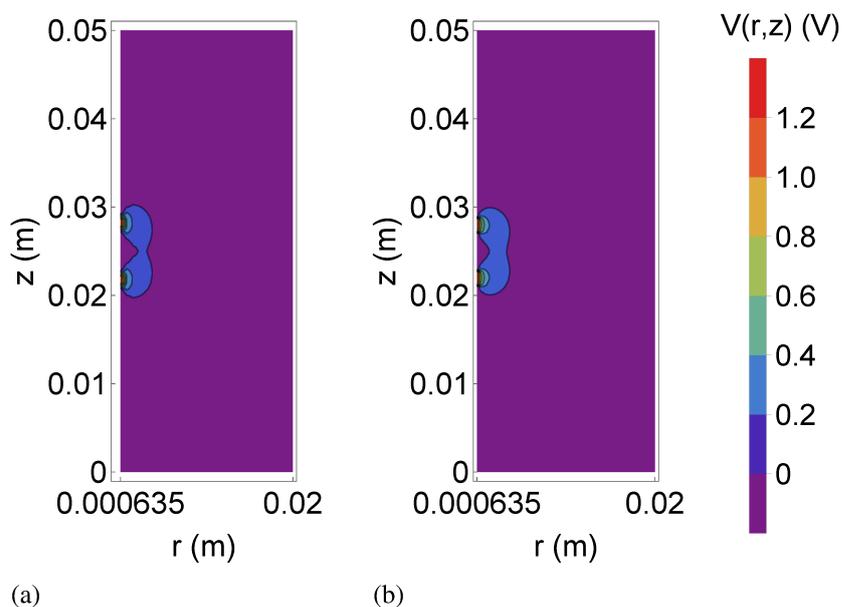
YORIYAZ, H. Método de Monte Carlo: princípios e aplicações em física médica. *Revista Brasileira de Física Médica*, v. 3, n. 1, p. 141–149, 2009.

## APÊNDICE A – Solução do problema direto com MDF e MEF levando em consideração diferentes configurações de eletrodos ativos

### A.1 Solução para as equações da temperatura em regime permanente

Com o intuito de verificar as soluções MDF e MEF do problema direto com MDF e MEF para as equações de temperatura em regime permanente levando em consideração outras configurações de eletrodos ativos foram geradas as Figuras 71, 72 e 73 com os contatos 1 e 4 ativos, onde nota-se a formação de dois picos de temperatura nas regiões de aplicação do potencial, e as Figuras 74, 75 e 76 apenas com o contato 1 ativo. Dessa forma, observa-se que as soluções computacionais obtidas possuem comportamento semelhante a solução com os contatos 1 e 2 ativos e conseguem prever os picos de temperatura em diferentes configurações, mesmo quando os contatos ativos estão próximos ou mais distantes um do outro.

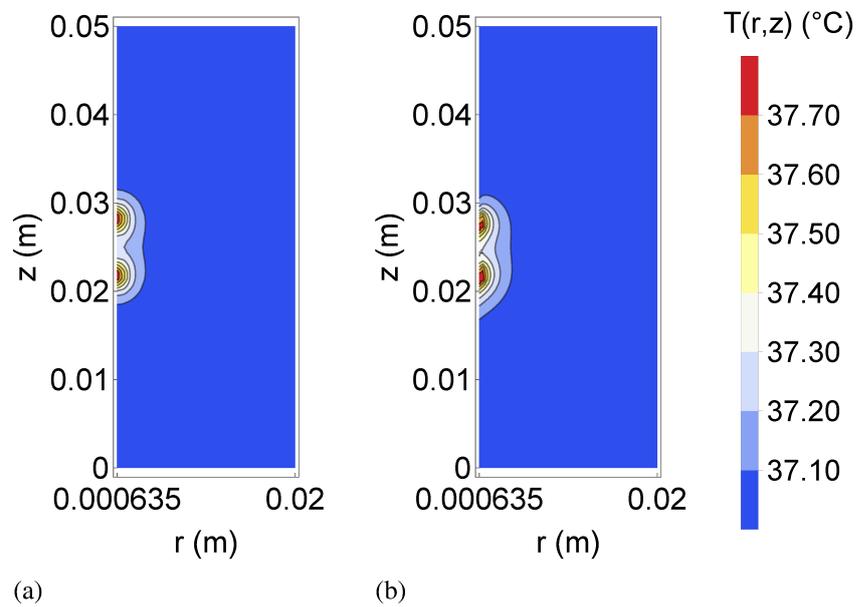
Figura 71 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico com os eletrodos 1 e 4 ativos.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

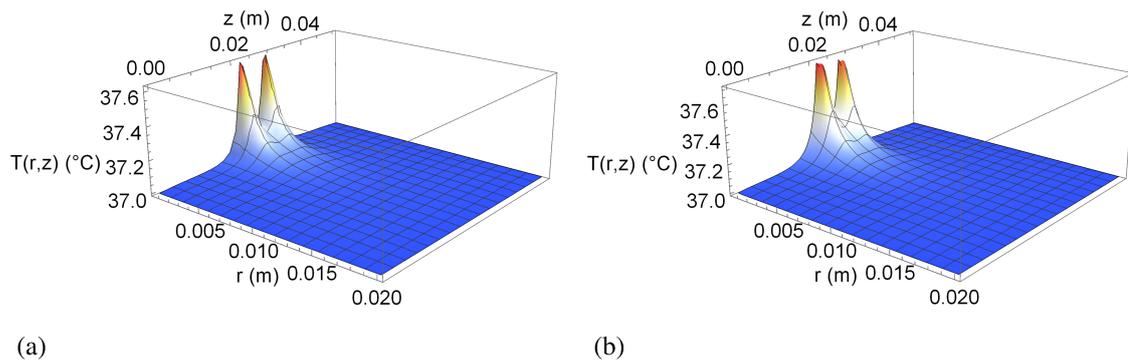
Figura 72 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente com os eletrodos 1 e 4 ativos.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

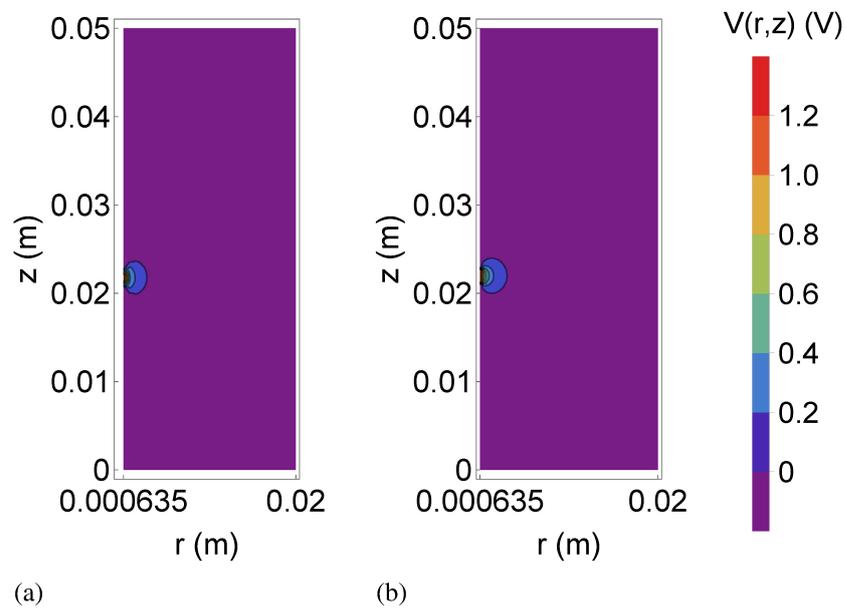
Figura 73 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente com os eletrodos 1 e 4 ativos.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

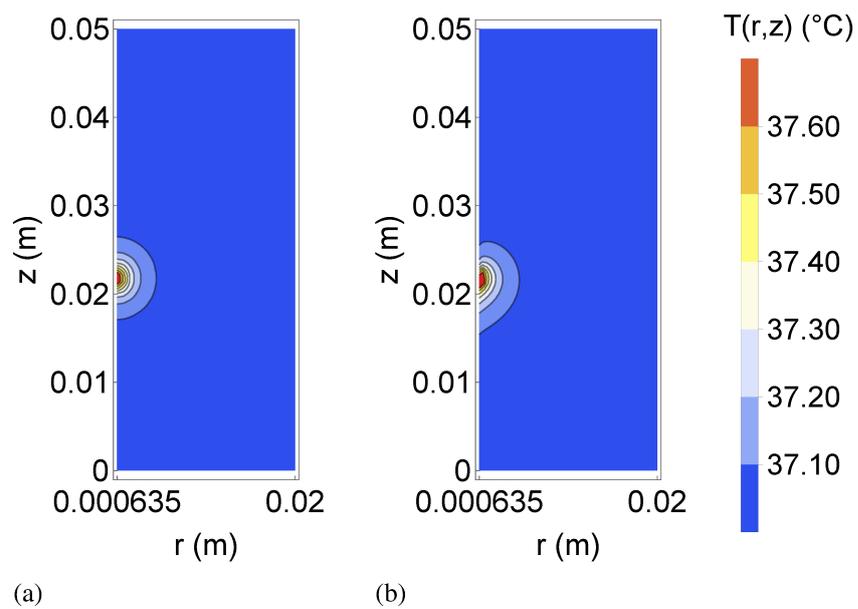
Figura 74 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o potencial elétrico com o eletrodo 1 ativo.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

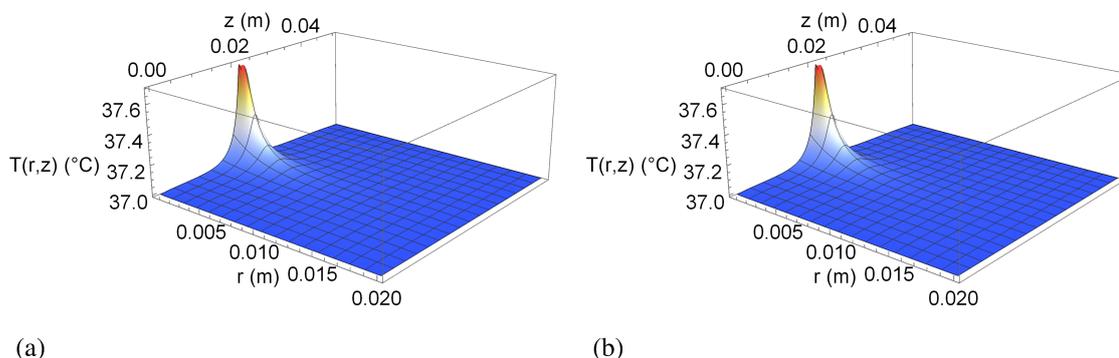
Figura 75 - Gráficos de contorno das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura do problema em regime permanente com o eletrodo 1 ativo.



Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 76 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime permanente com o eletrodo 1 ativo.



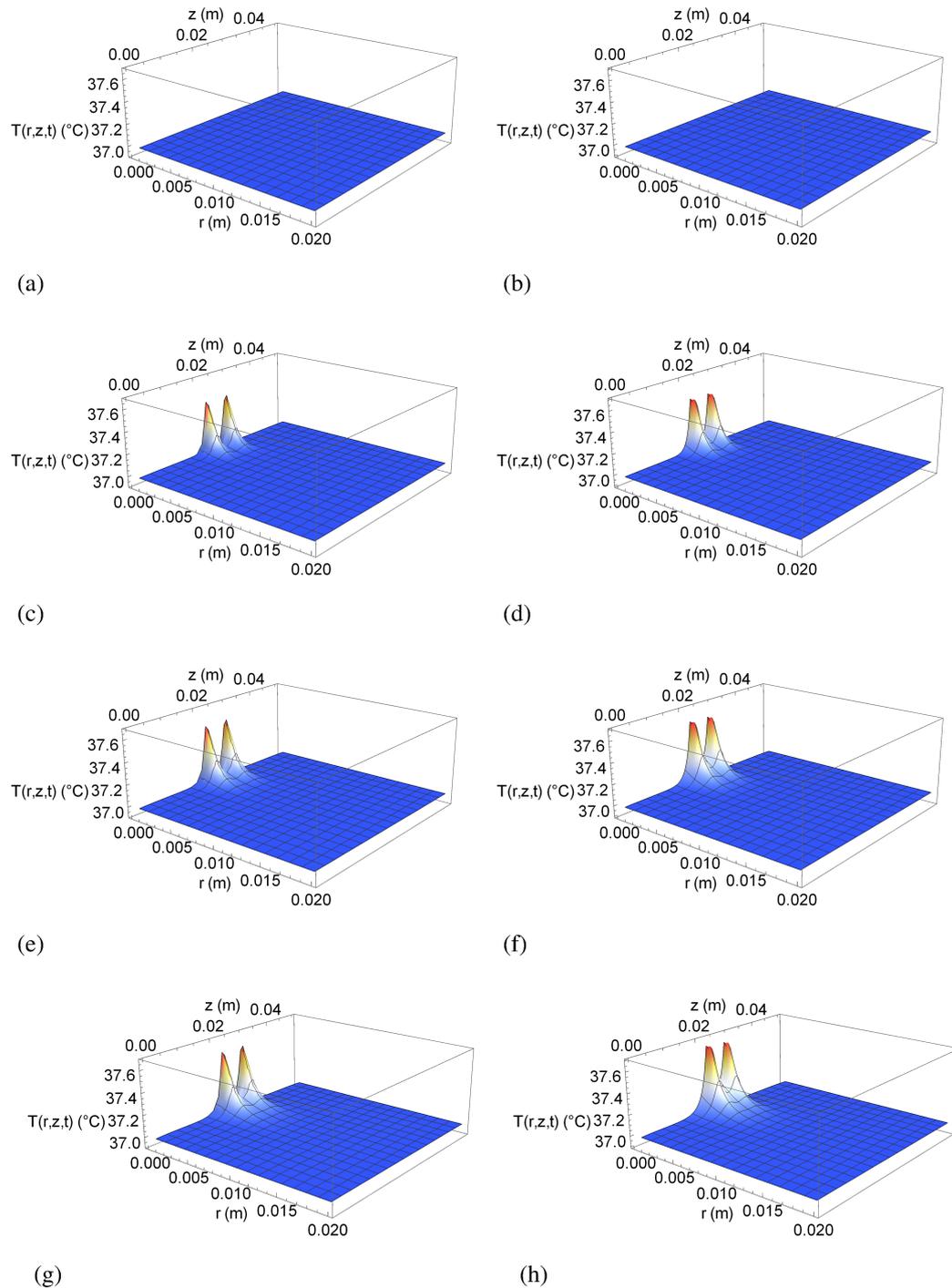
Legenda: (a) NDSolve. (b) MDF.

Fonte: A autora, 2023.

## A.2 Solução para as equações da temperatura em regime transiente

Com o intuito de verificar as soluções MDF e MEF do problema direto com MDF e MEF para as equações de temperatura em regime transiente levando em consideração outras configurações de eletrodos ativos foram geradas as Figuras 77 e 78. A Figura 77 mostra o comportamento tridimensional das soluções NDSolve (à esquerda) e MDF (à direita), considerando os contatos 1 e 4 ativos em diferentes instantes de tempo. Nesse caso, percebe-se que quando os dois contatos mais distantes do eletrodo encontram-se ativos ocorrem dois picos de temperatura nas regiões de aplicação do potencial. A Figura 78 mostra as soluções NDSolve e MDF em diferentes instantes de tempo quando apenas um contato encontra-se ativo, onde observa-se o pico de temperatura ocorrendo no ponto de aplicação do potencial elétrico.

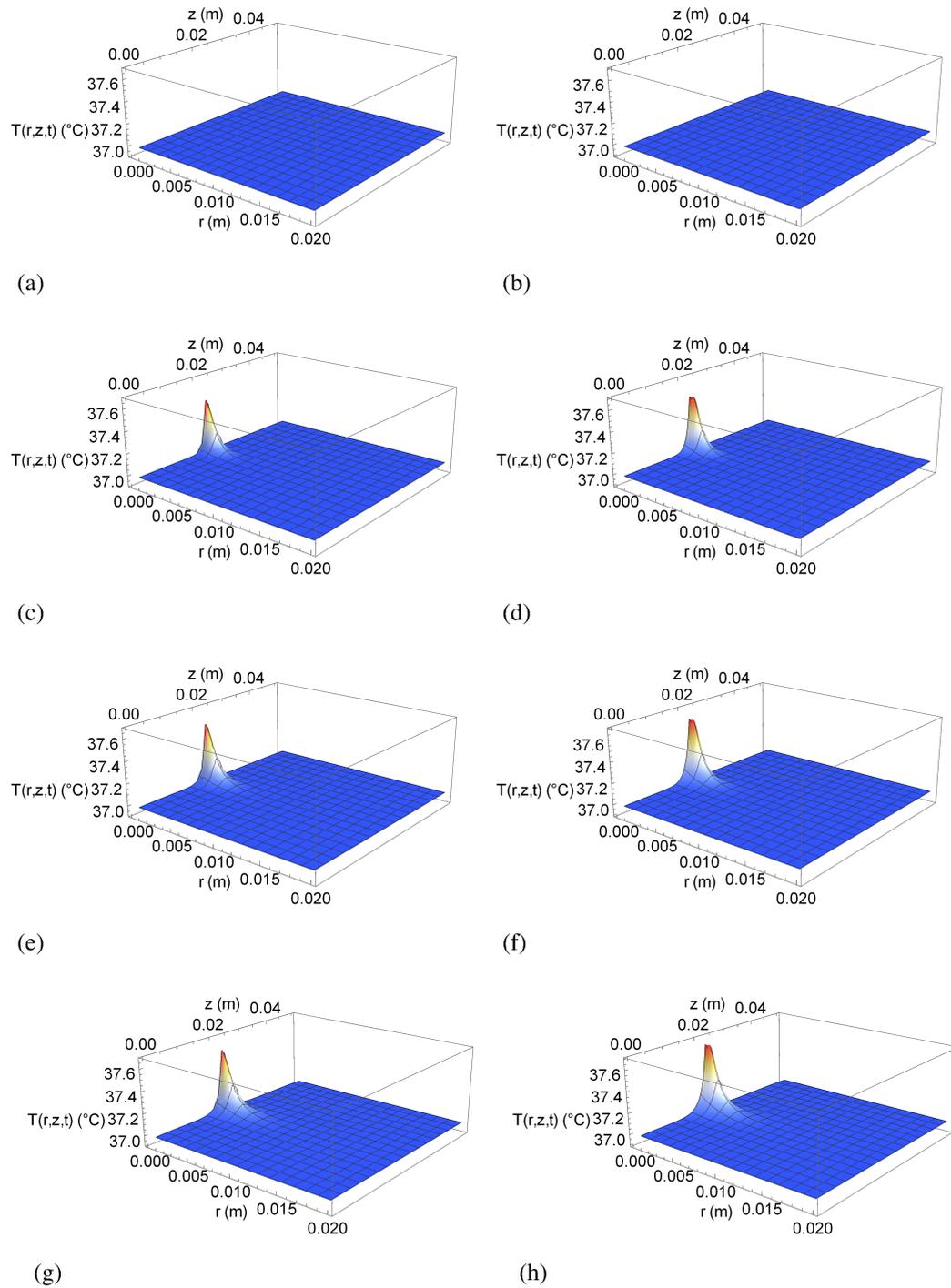
Figura 77 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente com os eletrodos 1 e 4 ativos.



Legenda: (a) NDSolve em  $t = 0$  segundos. (b) MDF em  $t = 0$  segundos. (c) NDSolve em  $t = 15$  segundos. (d) MDF em  $t = 15$  segundos. (e) NDSolve em  $t = 30$  segundos. (f) MDF em  $t = 30$  segundos. (g) NDSolve em  $t = 60$  segundos. (h) MDF em  $t = 60$  segundos.

Fonte: A autora, 2023.

Figura 78 - Comparação das soluções NDSolve e MDF para o campo de temperatura tridimensional do problema em regime transiente com o eletrodo 1 ativo.



Legenda: (a) NDSolve em  $t = 0$  segundos. (b) MDF em  $t = 0$  segundos. (c) NDSolve em  $t = 15$  segundos. (d) MDF em  $t = 15$  segundos. (e) NDSolve em  $t = 30$  segundos. (f) MDF em  $t = 30$  segundos. (g) NDSolve em  $t = 60$  segundos. (h) MDF em  $t = 60$  segundos.

Fonte: A autora, 2023.