



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

Lucas Lopes da Silva Costa

**Estimativa de propriedades termofísicas espacialmente variáveis  
com seleção de classes de modelos e transformações integrais**

Nova Friburgo

2024

Lucas Lopes da Silva Costa

**Estimativa de propriedades termofísicas espacialmente variáveis com seleção de classes de modelos e transformações integrais**



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

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

Orientador: Prof. Luiz Alberto da Silva Abreu, D.Sc.

Nova Friburgo

2024

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

C837 Costa, Lucas Lopes da Silva.  
Estimativa de propriedades termofísicas espacialmente  
variáveis com seleção de classes de modelos e transformações  
integrais / Lucas Lopes da Silva Costa - 2024.  
71 f. : il.

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

1. Transferência de calor - Teses. 2. Modelos matemáticos -  
Teses. 3. Problemas inversos (Equações diferenciais) – Teses. I.  
Knupp, Diego Campos. II. Abreu, Luiz Alberto da Silva. III.  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV.  
Título.

CDU 536.2:519.6

Bibliotecária Fernanda Souza Cruz CRB7/7361

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

---

Assinatura

---

Data

Lucas Lopes da Silva Costa

**Estimativa de Propriedades Termofísicas Espacialmente Variáveis com Seleção de  
Classes de Modelos e Transformações Integrais**

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

Aprovado em 17 de Junho de 2024.

Banca Examinadora:

---

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

---

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

---

Prof. Dr. Leonardo Tavares Stutz  
Instituto Politécnico – UERJ

---

Prof. Dr. Elizeu Melo da Silva  
Universidade Federal Sul e Sudeste do Pará – UNIFESSPA

Nova Friburgo  
2024

## DEDICATÓRIA

Dedico à minha mãe (in memoriam), cujo empenho em cuidar de seus filhos e os educar veio em primeiro lugar. Seus esforços obtiveram resultado. Eternamente grato.

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente gratidão a Deus por permitir este momento.

Agradeço aos meus pais que sempre me apoiaram em todas as minhas escolhas e minhas irmãs por sempre estarem ao meu lado, em especial a minha irmã Ana Gely.

Agradeço a minha esposa Kasselainy Beraldini por sempre estar ao meu lado, me amando, me incentivando nos momentos difíceis, que compreendeu a minha ausência enquanto eu me dedicava à realização deste trabalho.

Agradeço a toda minha família pelo carinho, amor e incentivo.

Agradeço aos professores, Diego Campos Knupp e Luiz Alberto da Silva Abreu, por serem meus orientadores e terem realizado esse papel com extrema dedicação e amizade.

Agradeço a todos os professores do Instituto que tive aula, pelos ensinamentos, correções, incentivo e paciência com qual guiaram meu aprendizado ao longo do curso.

Agradeço à CAPES pela bolsa concedida durante todo o curso de mestrado. O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Agradeço a Mateus Siqueira, Eduardo Classe e Lucas Asth pela amizade verdadeira, pelas inúmeras conversas, discussões, colaborações que foram essenciais durante o curso e todos os momentos que vivemos.

Agradeço aos meus colegas de turmas, por compartilharem comigo momentos de descobertas e aprendizado e por todas as palavras de incentivo.

Não são nossas habilidades que mostram quem realmente somos, são as nossas escolhas.

*Alvo Dumbledore*

## RESUMO

COSTA, Lucas Lopes da Silva. *Estimativa de propriedades termofísicas espacialmente variáveis com seleção de classes de modelos e transformações integrais*. 2024. 71 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

A identificação de propriedades termofísicas com variação espacial é crucial em problemas de transferência de calor em materiais compósitos e Materiais com Gradiente Funcional (FGMs), com diversas aplicações nas engenharias, desde dissipadores em microprocessadores até engenharia aeroespacial. Esta dissertação trata da formulação e solução de um problema inverso de transferência de calor por condução empregando uma abordagem de inferência bayesiana com seleção de classes de modelos. O foco está em um problema de transferência de calor em uma placa plana termicamente fina. Dados experimentais sintéticos foram empregados para verificar a eficiência do método de Monte Carlo com Cadeia de Markov Transicional, em conjunto com transformadas integrais, na estimativa de parâmetros e na seleção do modelo mais plausível. O uso de transformadas integrais permitiu que a solução do problema inverso envolvendo os modelos parametrizados escolhidos das funções que descrevem as propriedades termo-físicas fossem analíticas. Os resultados, utilizando medidas de temperatura sintéticas, mostram que a metodologia utilizada na seleção de modelos é capaz de identificar qualitativa e quantitativamente os modelos prováveis em problemas de condução de calor, especialmente em contextos que envolvem placas planas termicamente finas.

Palavras-chave: problemas inversos em transferência de calor; método da transformada integral generalizada; seleção de classes de modelos; inferência bayesiana; método de Monte Carlo com cadeia de Markov transicional.

## ABSTRACT

COSTA, Lucas Lopes da Silva. *Estimation of spatially variable thermophysical properties with model class selection and integral transformations*. 2024. 71 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2024.

The identification of spatially varying thermophysical properties is crucial in heat transfer problems in composite materials and Functionally Graded Materials (FGMs), with various applications in engineering, ranging from heat sinks in microprocessors to aerospace engineering. This dissertation addresses the formulation and solution of an inverse heat conduction problem using a Bayesian inference approach with model class selection. The focus is on a heat transfer problem in a thermally thin flat plate. Synthetic experimental data were employed to verify the efficiency of the Transitional Markov Chain Monte Carlo method, in conjunction with integral transforms, in parameter estimation and selecting the most plausible model. The use of integral transforms allowed for analytical solutions of the inverse problem involving the parameterized models chosen to describe the thermophysical properties. The results, using synthetic temperature measurements, demonstrate that the model selection methodology is capable of identifying both qualitatively and quantitatively the probable models in heat conduction problems, especially in contexts involving thermally thin flat plates.

Keywords: inverse problems in heat transfer; generalized integral transform technique; model class selection; bayesian inference; transitional Markov chain Monte Carlo method.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 -	Diagramação do problema físico . . . . .	21
Figura 2 -	Coeficientes Exatos . . . . .	38
Figura 3 -	Soluções - Regime Permanente GITT com $M = 25$ e $N = 10$ ; $w(x)$ e $k(x)$ apresentados na Tabela 1. . . . .	40
Figura 4 -	Análise residual das soluções - Regime Permanente GITT com $M = 25$ e $N = 10$ ; $t = 1000s$ ; $w(x)$ e $k(x)$ apresentados na Tabela 1 . . . . .	41
Figura 5 -	Coeficiente $w(x)$ Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1 . . . . .	44
Figura 6 -	Coeficiente $k(x)$ Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1 . . . . .	45
Figura 7 -	Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime permanente: Caso 1 . . . . .	46
Figura 8 -	Análises residuais das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1 . . . . .	47
Figura 9 -	Histogramas e gráficos correlação entre os parâmetros . . . . .	49
Figura 10 -	Coeficiente $w(x)$ Estimado e intervalos de credibilidade de 95%: Caso 2 . . . . .	51
Figura 11 -	Coeficiente $k(x)$ Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2 . . . . .	52
Figura 12 -	Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime permanente: Caso 2 . . . . .	53
Figura 13 -	Análises residuais das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2 . . . . .	54
Figura 14 -	Histogramas e gráfico de correlação entre os parâmetros . . . . .	56
Figura 15 -	Coeficiente $w(x)$ Estimado e intervalos de credibilidade de 95%: Caso 3 . . . . .	58
Figura 16 -	Coeficiente $k(x)$ Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 3 . . . . .	59
Figura 16 -	Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime estacionário: Caso 3 . . . . .	60
Figura 16 -	Análise residual das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 3 . . . . .	61
Figura 16 -	Histogramas e correlação . . . . .	71

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Propriedades Termo físicas da Placa: Modelo Quadrático. . . . .	37
Tabela 2 - Parâmetros predefinidos . . . . .	38
Tabela 3 - Tabela de convergência da solução via GITT. . . . .	39
Tabela 4 - Modelos empregados para obter os dados experimentais sintéticos nos Casos 1, 2 e 3. . . . .	42
Tabela 5 - Modelos utilizados no processo de inversão do problema nos casos 1, 2 e 3 . . . . .	42
Tabela 6 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 1 . . .	43
Tabela 7 - Seleção de classe de modelos: Caso 1 . . . . .	48
Tabela 8 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 2 . . .	50
Tabela 9 - Seleção de classe de modelos: Caso 2 . . . . .	55
Tabela 10 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 3 . . .	57
Tabela 11 - Seleção de classe de modelos: Caso 3 . . . . .	62

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

MCMC	Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov
TMCMC	Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov Transicional
MAP	Maximum a Posteriori
CI	Intervalo de Credibilidade
GITT	Transformada Integral Generalizada
CITT	Transformada Integral Clássica
PDF	Função de Densidade de Probabilidade
AMH	Adaptative Metropolis-Hastings
COV	Coefficiente de Variação
MH	Metropolis-Hastings
EDP	Equação Diferencial Parcial

## LISTA DE SÍMBOLOS

$x, z$	Coordenadas espaciais
$L, L_z$	Dimensões da placa
$w$	difusão térmica da placa
$k$	Condutividade térmica da placa
$q_w1$	Fluxo de calor
$q_w2$	Fluxo de calor
$h_e$	Coefficiente de transferência de calor externo
$\gamma$	Autovalor
$\psi$	Autofunção
$\tilde{\psi}$	Autofunção normalizada
$\Theta$	Limite de integração adimensional
$\lambda$	Espaço fundamental
$\Lambda$	Elementos pertencentes ao espaço fundamental
$\mathcal{A}$	Coleção de eventos com probabilidade associada
$\pi$	Densidade de probabilidade proposta
$\theta$	Vetor de parâmetros
$\mathcal{M}$	Modelo proposto
$\mathbf{D}$	Vetor de dados experimentais
$\Sigma$	Matriz de covariância
$p_i$	Estágio do TMCMC

## SUMÁRIO

	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	13
1	<b>FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO</b> . . . . .	20
1.1	Formulação Matemática . . . . .	20
1.2	Filtro Analítico . . . . .	22
1.3	Solução do Problema Direto via GITT . . . . .	23
2	<b>FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO E SELEÇÃO DE CLASSE DE MODELO</b> . . . . .	27
2.1	Estimação de Parâmetros . . . . .	27
2.2	Transitional Markov Chain Monte Carlo . . . . .	30
2.3	Seleção de Classe de Modelos Bayesiana . . . . .	35
3	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	37
3.1	<b>Análise de Convergência da GITT No Problema de Transferência de calor em uma placa plana</b> . . . . .	37
3.1.1	<u>Problema Inverso</u> . . . . .	41
3.1.2	<u>Caso: 1</u> . . . . .	43
3.1.3	<u>Caso: 2</u> . . . . .	49
3.1.4	<u>Caso: 3</u> . . . . .	56
	<b>CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS</b> . . . . .	63
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	65
	<b>APÊNDICE A – Histogramas e gráficos de correlações entre os parâmetros: Caso 3</b> . . . . .	70

## INTRODUÇÃO

A identificação das propriedades termofísicas espacialmente variáveis com base em dados de medições de temperatura é um problema inverso desafiador, devido à abundância de dados a serem processados e à dificuldade de estimar funções que modelam essas propriedades. Esse desafio é importante na análise de problemas de condução de calor e abrange diversas áreas científicas, como matemática, física, estatística e engenharias. No entanto, é interessante implementar técnicas de estimação dessas propriedades que sejam capazes de reduzir o custo computacional, obtendo soluções viáveis em termos de tempo e com incerteza quantificada.

Essas propriedades são necessárias para compreender e caracterizar o comportamento dos materiais. Propriedades como condutividade térmica e capacidade térmica específica influenciam diretamente o comportamento dos materiais sob variações de temperatura (Incropera et al., 1996). Nas engenharias, essas propriedades desempenham papéis vitais em diversas aplicações práticas, principalmente em materiais compostos, multicamadas, materiais com gradiente funcional (*functionally graded materials* - FGM) ou outros que, de alguma forma, apresentam variação espacial em suas propriedades térmicas. Na engenharia aeroespacial, por exemplo, são relevantes para o desenvolvimento de sistemas de refrigeração eficientes em motores de foguetes e aeronaves (Yan et al., 2023; Liu et al., 2023). Na indústria de petróleo e gás, a identificação precisa das propriedades termofísicas é vital para o projeto de sistemas de transporte e a detecção de falhas em tubulações do tipo "Pipe in Pipe", usadas na extração submarina (Su et al., 2012). Na aeronáutica, tais propriedades são importantes não apenas para projetos de sistemas de ar condicionado, mas também para garantir o funcionamento eficiente de equipamentos sensíveis (Oliveira et al., 2015).

A condução de calor em meios homogêneos com propriedades constantes é amplamente compreendida e modelada. No entanto, a complexidade aumenta consideravelmente quando se utilizam materiais e sistemas reais, onde as propriedades termofísicas, como condutividade térmica, capacidade calorífica e densidade, variam espacialmente. Essas variações podem surgir devido à heterogeneidade na composição, transições de fase, ou outros fatores. No estudo da transferência de calor, essas propriedades são frequentemente descritas por funções, onde o domínio corresponde às dimensões do material, incorporadas em equações diferenciais parciais (EDPs) (Mascouto et al., 2020b; Knupp, 2021). Esse contexto torna desafiador o problema inverso de estimativa dos coeficientes, uma vez que não se trata mais de identificar um valor pontual que represente a propriedade, mas sim de estimar funções cuja forma e natureza não são conhecidas a priori.

Nesse contexto, a análise de materiais com propriedades termofísicas variáveis espacialmente tem crescido significativamente, isso se reflete na vasta quantidade de estudos

acadêmicos recentes. Pesquisas como a de Mascouto *et al.*, (2020b) demonstram como a condutividade térmica e a capacidade térmica variáveis espacialmente podem ser estimadas utilizando metodologias de solução de problemas inversos. Em (Knupp, 2021) o autor apresentou uma metodologia que aplica a Técnica de Transformada Integral Generalizada (*Generalized Integral Transform Technique - GITT*) para a identificação direta dessas propriedades em meios heterogêneos, proporcionando um procedimento computacionalmente eficiente e preciso. Além disso, artigos como os de (Knupp *et al.*, 2012, Padilha *et al.*, 2016) destaca o uso da inferência bayesiana para a estimação de propriedades termofísicas variáveis, mostrando a consistência e confiabilidade dessa abordagem na incorporação de incertezas e dados experimentais.

Os problemas diretos, por sua vez, visam determinar a distribuição de temperatura no domínio do tempo, a partir do conhecimento do modelo físico-matemático, das propriedades físicas, das condições iniciais e de contorno, e da geometria em questão. Geralmente, a solução de problemas de transferência de calor, como mencionado anteriormente, requer o uso de métodos analíticos, numéricos ou híbridos. Com essa finalidade diversos métodos são utilizados como o método de elementos finitos, volumes finitos, separação de variáveis e transformada integral. Entre esses métodos, destaca-se a técnica de transformada integral generalizada, proposta por Özisik e Murray (1974). A GITT é particularmente útil em problemas com condições de contorno e iniciais não triviais, como variação espacial não uniforme, dependência temporal não linear, oferecendo uma abordagem sistemática para esses desafios (Knupp, 2021). Além disso, a Transformada Integral Clássica (CITT), introduzida por Özisik e Mikhailov em 1984, unificou e expandiu métodos anteriores, atendendo às crescentes demandas tecnológicas e científicas (Cotta *et al.*, 2014).

Dando sequência ao uso da GITT, em Naveira-Cotta (2011), o autor apresenta a aplicação da técnica para resolver problemas diretos e inversos de transferência de calor em meios heterogêneos. Utilizando dados de temperatura transformados integralmente, o estudo mostrou que a GITT permite uma compressão significativa dos dados medidos sem perder informações necessárias para a solução do problema inverso. Além disso, a técnica se revela particularmente vantajosa quando há uma abundância de dados experimentais, como os obtidos por termografia infravermelha, e é combinada com a inferência Bayesiana e o método de Monte Carlo em Cadeia de Markov (MCMC) para estimar propriedades termofísicas variáveis espacialmente, como a condutividade térmica e a difusividade térmica, em materiais heterogêneos.

Alguns anos depois, Knupp *et al.*, (2015) investigaram o comportamento transiente da transferência de calor conjugada em fluxo laminar de microcanais, considerando os efeitos de difusão axial, que são frequentemente relevantes nesses sistemas, e incluindo pré-aquecimento ou pré-resfriamento da região da seção de troca de calor. A solução foi desenvolvida utilizando a Técnica de Transformada Integral Generalizada, aplicada a uma

formulação de domínio único realizada de forma que modelasse a transferência de calor tanto na corrente do fluido quanto nas paredes do canal.

Em Knupp, (2021), mencionado anteriormente, o autor apresenta outra abordagem interessante que emprega a GITT para a identificação direta da condutividade térmica e capacidade térmica variáveis em meios heterogêneos. A metodologia consistiu em aplicar as medidas de temperatura transformadas integralmente na equação de condução de calor, permitindo a estimativa dos parâmetros desejados por meio de um problema de minimização simples. Essa técnica simplifica a resolução de problemas inversos em condução de calor, resultando em um procedimento computacionalmente eficiente. Representando as propriedades termofísicas variáveis espacialmente como expansões de autofunções, a abordagem possibilita uma identificação precisa e eficaz desses parâmetros em meios heterogêneos. A aplicação da Transformada Integral Generalizada nesse contexto demonstrou ser consistente na determinação de propriedades térmicas em diferentes cenários de condução de calor difusivos e convectivos.

Diferentemente dos problemas diretos, os problemas inversos visam estimar parâmetros ou funções essenciais para a definição completa do problema, os quais podem ser desconhecidos inicialmente. Esses parâmetros podem incluir propriedades fundamentais, como condutividade térmica, fluxo de calor, coeficiente de transferência de calor, geometria e condições de contorno. A identificação desses elementos é feita a partir de dados experimentais conhecidos, como a distribuição de temperatura. (Orlande *et al.*, 2011; Watanabe *et al.*, 2021; Cao; Luo; Tang, 2022; Naveira-Cotta *et al.*, 2010; Kaipio; Somersalo, 2005). Os problemas inversos são conhecidos tipicamente por serem mal postos (Özişik; Orlande, 2000). De acordo com Orlande *et al.*, (2011), a maioria dos estudos para resolver tais problemas envolve a reformulação do problema inverso em termos de problemas bem-postos. Por exemplo, o problema inverso pode ser formulado como um problema de inferência usando métodos de máxima verossimilhança, onde uma função objetivo de mínimos quadrados é definida. Na formulação e solução de problemas de estimação de parâmetros, nas últimas décadas, métodos baseados em inferência bayesiana têm se destacado como uma poderosa ferramenta no estudo de problemas inversos em diversas áreas do conhecimento, como engenharia, matemática e física (Brandi, 2010). Vários trabalhos relevantes em transferência de calor empregando inferência Bayesiana foram desenvolvidos ao longo dos últimos anos (Wang; Zabaras, 2004; Watanabe *et al.*, 2021; Cao; Luo; Tang, 2022; Mascouto *et al.*, 2019; Mascouto *et al.*, 2020a; Abreu, 2011; Abreu, 2018; Andrade; Mecânica, 2011; Abreu *et al.*, 2014; Naveira-Cotta; Orlande; Cotta, 2011).

Continuando a discussão sobre inferência Bayesiana, o artigo (Knupp *et al.*, 2013) aborda a estimativa de propriedades termofísicas variáveis espacialmente em materiais heterogêneos. Os autores propuseram uma abordagem experimental que combinou medições de temperatura obtidas por termografia infravermelha com uma análise inversa baseada na inferência bayesiana, utilizando um algoritmo de Monte Carlo por Cadeias de

Markov (MCMC). Essa abordagem se mostrou eficaz na recuperação do perfil espacial das propriedades termofísicas, destacando sua relevância para aplicações práticas e pesquisa de materiais que tem como característica a variação espacial de suas propriedades termofísicas. Da mesma forma, no artigo de Somasundharam e Reddy (2019) os autores abordam a questão da estimação de propriedades termofísicas variáveis espacialmente em meios heterogêneos. O foco principal da pesquisa foi a aplicação de técnicas de inferência bayesiana para resolver o problema inverso de condução de calor. A abordagem proposta visou superar as limitações das técnicas tradicionais, que muitas vezes não conseguem capturar a heterogeneidade das propriedades térmicas com variação espacial. A inferência Bayesiana envolve a análise da densidade de probabilidade a posteriori, seja por estimativa pontual, a partir da definição de uma função objetivo de Maximum a Posteriori (MAP), ou por amostragem como no Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov (MCMC) e no Método de Monte Carlo com Cadeia de Markov Transicional (TMCMC) (Orlande *et al.*, 2011; Cao; Luo; Tang, 2022; Ching; Chen, 2007).

No artigo de Ching e Chen (2007), é apresentado o método TMCMC, uma abordagem baseada em simulação para a atualização de modelos Bayesianos, seleção de classes de modelos e média de modelos. Destaca-se a capacidade deste método de amostrar funções de densidade de probabilidade (PDFs) complexas, incluindo PDFs multimodais, altamente pontiagudas e com regiões planas. Inspirado no método Metropolis-Hastings adaptativo (AMH) desenvolvido por Beck e Au (2002), o TMCMC fundamenta-se no MCMC, demonstrando maior versatilidade e robustez em comparação com o AMH e os Metropolis-Hastings tradicionais. Adicionalmente, um subproduto do TMCMC é o cálculo da evidência da classe de modelo, característica fundamental para a seleção de classes de modelos bayesianos.

A seleção da classe de modelo constitui uma etapa fundamental no processo científico, ao permitir uma análise das hipóteses subjacentes à obtenção dos dados. Este processo envolve a escolha dos tipos de modelos mais adequados para representar o fenômeno em estudo, considerando tanto a complexidade do modelo quanto a qualidade da aproximação dos dados experimentais (Mackay, 2003). A abordagem Bayesiana na seleção de classe de modelo é vantajosa devido à sua capacidade de combinar informações prévias com dados observados, permitindo uma atualização contínua dos parâmetros do modelo de maneira probabilística. Isso resulta em estimativas mais precisas, ao mesmo tempo que incorpora incertezas e fornece uma interpretação intuitiva dos resultados na forma de distribuições a posteriori. O trabalho de Yuen, (2010) apresenta desenvolvimentos significativos na seleção de classe de modelo, enfatizando a importância de escolher a classe de modelo mais plausível com base em dados de entrada e saída do sistema. A seleção de classe de modelo é destacada como uma abordagem quantitativa que incorpora o princípio da parcimônia, ou navalha de Ockham, preferindo modelos mais simples quando adequados. Além disso, O trabalho de Yuen, (2010) explora a aplicação do método TMCMC

para casos onde a distribuição posteriori não pode ser aproximada por uma distribuição gaussiana, permitindo uma avaliação mais precisa da evidência para cada classe de modelo.

No campo de estudo envolvendo a identificação de dados estruturais, Prakash e Balomenos (2021), utilizaram a seleção de classe de modelos bayesiana no contexto da modelagem das respostas estáticas de barragens, com foco no monitoramento de saúde estrutural. Os autores desenvolvem dois modelos bayesianos: o Modelo-1, parcimonioso, e o Modelo-2, um modelo de conjunto que considera a incerteza associada a diferentes especificações do modelo. A seleção de modelos é realizada utilizando critérios como o BIC (*Bayesian Information Criterion*), permitindo a identificação das variáveis mais relevantes para a previsão das respostas das barragens.

O artigo de Song *et al.* (2022) explora a seleção de classe de modelos bayesiana, destacando seu uso em um problema envolvendo um sistema de asa-motor com conexões não lineares. A pesquisa mostra como a abordagem bayesiana pode ser utilizada para identificar a função de não linearidade mais plausível entre diferentes classes de modelos, com base na evidência fornecida pelos dados experimentais. Essa metodologia se mostrou importante ao garantir a precisão na modelagem de sistemas complexos, permitindo uma melhor compreensão e previsão do comportamento dinâmico.

O Cardoso *et al.* (2022) aborda o uso da técnica de Aproximação Bayesiana Computacional (ABC) para estimar parâmetros e selecionar modelos de forma simultânea em modelos que descrevem a dinâmica de células no HIV. A técnica mostrou-se eficaz para identificar o modelo com maior probabilidade de explicar o comportamento dessas células, além de estimar com precisão os parâmetros envolvidos. A seleção de modelo, nesse contexto, foi fundamental para identificar a dinâmica mais adequada do sistema estudado, contribuindo significativamente para a compreensão do processo.

Portanto, técnicas de seleção de classe de modelos são aplicadas em diferentes áreas, demonstrando sua versatilidade e capacidade de lidar com problemas complexos, escolhendo o modelo ou os modelos mais plausíveis para representar o fenômeno físico em estudo.

Uma das dificuldades no problema inverso é a ausência de informações sobre os coeficientes variáveis do modelo. Contudo, este estudo apresenta uma solução promissora para essa questão. Ao integrar a Técnica de Transformada Integral Generalizada com o Método Monte Carlo com Cadeia de Markov Transicional (TMCMC) e o processo de seleção de classe modelo, é possível propor modelos para esses coeficientes variáveis. Um diferencial deste trabalho é o uso da GITT como metodologia de solução do problema de transferência de calor com coeficientes variáveis. Nos casos em estudo, ao resolver o problema de transferência de calor com a GITT, resulta em um problema transformado desacoplado, dessa forma obtém-se a solução analítica exata. Como destacado por Özisik e Orlande (2021), a característica marcante dos métodos Bayesianos é a incorporação de

informações a priori sobre as propriedades em questão. Além disso, conforme enfatizado por Muto e Beck (2008), o TMCMC calcula automaticamente a evidência do modelo, permitindo não apenas a proposição desses modelos, mas também a determinação, por meio da seleção de modelo, do mais plausível. Esta contribuição é significativa, pois não só amplia as capacidades do problema inverso, mas também oferece uma abordagem sólida para lidar com a incerteza associada aos coeficientes variáveis, constituindo um avanço importante na modelagem de problemas de transferência de calor em engenharia e ciências aplicadas.

## Objetivos

Utilizar o TMCMC em conjunto com a Técnica de Transformada Integral Generalizada para desenvolver uma metodologia capaz de estimar coeficientes variáveis em modelos de transferência de calor. Essa abordagem permitirá propor modelos parametrizados para os coeficientes de capacidade térmica e condutividade térmica, além de realizar uma análise detalhada das propriedades térmicas, considerando variações espaciais significativas. Adicionalmente, será realizada a seleção automática do modelo mais adequado entre três opções propostas (constante, Linear e quadrático) visando garantir uma representação precisa dos dados experimentais sintéticos e resultados confiáveis.

## Organização do Trabalho

No capítulo 1 é apresentado o modelo físico-matemático para o problema direto de difusão de calor unidimensional transiente em uma placa plana. Este capítulo descreve as equações que governam o fenômeno físico, incluindo as condições de contorno e inicial associadas. Além disso, é apresentada a metodologia de resolução do problema direto utilizando a técnica de Transformada Integral Generalizada.

No capítulo 2 são discutidas a formulação e a metodologia de solução do problema inverso, que visa a estimativa de parâmetros desconhecidos a partir de dados observacionais sintéticos. Este capítulo explora o uso do Método de Monte Carlo via Cadeias de Markov Transicional como ferramenta principal para a resolução do problema inverso. São detalhados os princípios teóricos do TMCMC, seu algoritmo e as vantagens dessa abordagem em termos de eficiência computacional e precisão. Adicionalmente, é discutida a seleção de classe de modelos no contexto da inferência bayesiana, explicando como diferentes modelos são avaliados e selecionados com base em critérios bayesianos para melhor representarem os dados observacionais.

No capítulo 3 são apresentados e analisados os resultados obtidos para os proble-

mas direto e inverso no contexto do problema de condução de calor. Este capítulo inclui uma série de simulações numéricas e comparações entre os resultados obtidos através do modelo direto e as estimativas obtidas pelo problema inverso de estimação de parâmetro. A análise é feita de forma detalhada, discutindo a precisão das estimativas. Além disso, são apresentados os resultados da seleção de classe de modelos, mostrando como diferentes modelos se comportam frente aos dados e quais foram considerados mais adequados segundo a seleção.

O capítulo 3.1.4 apresenta as conclusões do trabalho e apresenta uma perspectiva geral de trabalhos futuros.

## 1 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DIRETO

Neste capítulo, será apresentada a formulação matemática de um problema de transferência de calor em uma placa termicamente fina, que modela matematicamente o fenômeno físico em estudo neste trabalho. As equações utilizadas, juntamente com as simplificações propostas para resolver o problema, serão detalhadas ao longo desta seção.

Serão introduzidos os conceitos básicos relacionados à técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), proposta por Özisik e Murray 1974, como uma abordagem para lidar com problemas lineares que apresentam algumas das dificuldades apontadas por Cotta (1993). A GITT consiste em transformar a equação diferencial parcial que descreve o problema em um sistema infinito de equações diferenciais acopladas, que é posteriormente truncado a uma ordem adequada para resolução numérica. A aplicação da fórmula de inversão é então empregada para recuperar o potencial original. Essa técnica flexibiliza a necessidade de encontrar uma transformação integral exata, permitindo a escolha de um problema de autovalor que compartilhe características semelhantes ao problema original. Essa abordagem resulta na transformação integral do problema diferencial parcial, gerando um sistema diferencial ordinário acoplado e infinito (Cotta; Knupp; Quaresma, 2017).

A GITT tem sido utilizada para resolver uma variedade de problemas não lineares, adaptando seus fundamentos conforme as particularidades de cada problema (Naveira-Cotta, 2009; Cotta, Knupp e Naveira-Cotta, 2016; Cassol, Wortmann e Rizza 2009). Uma das principais distinções da GITT em relação a outros métodos é a ausência da necessidade de discretização do domínio para geração de malhas, proporcionando vantagens como a redução do tempo de processamento e a aceleração da taxa de convergência numérica.

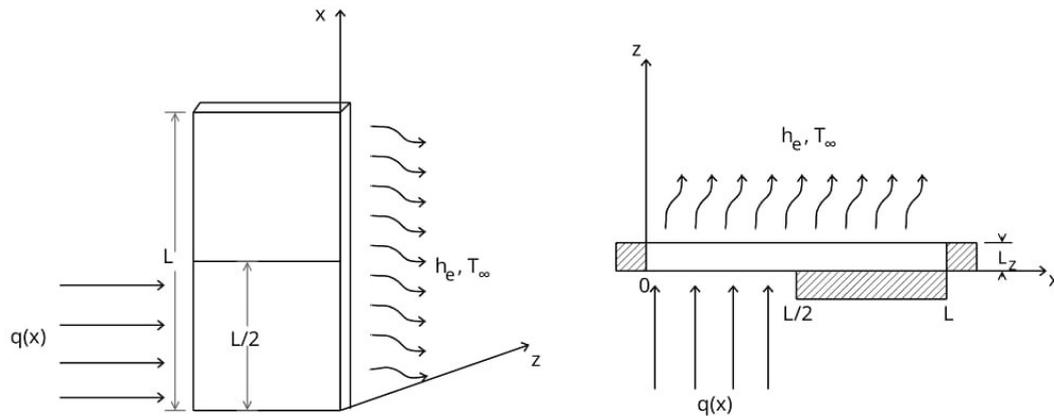
### 1.1 Formulação Matemática

Na presente seção, será desenvolvida uma análise da modelagem matemática que descreve o fenômeno físico de transferência de calor em uma placa de comprimento  $L$ . Este trabalho aborda as condições de contorno de Neumann, em conjunto com uma condição inicial constante. A Figura 1 esquematiza o problema de difusão na placa. A placa tem comprimento  $L$  e espessura  $L_z$ . Um fluxo de calor uniforme, representado por  $q(x)$ , aquece a placa da posição  $\frac{L}{2}$  até  $L$  na interface em que  $z = 0$ . Na interface oposta ( $z = L$ ), a placa realiza troca de calor com o ambiente por meio de convecção natural, enquanto os demais contornos são considerados isolados. Neste contexto, as trocas de calor por radiação são desconsideradas.

A escolha deste modelo físico específico é motivada pela sua utilização em estudos

publicados ao longo dos últimos anos, que abordaram o estudo de problemas de condução térmica em placas finas (Naveira-Cotta, 2011, Knupp, 2021)

Figura 1 - Diagramação do problema físico



Fonte: O autor, 2024.

A equação geral, juntamente com as condições de contorno de Neumann e inicial que modela esse fenômeno físico, foram formuladas a partir de uma abordagem de parâmetros concentrados parcial *Lumped analysis* e é dada pela seguinte equação diferencial parcial:

$$w(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right) + \frac{q_w(x)}{L_z} - \frac{h_e}{L_z} [T(x,t) - T_\infty], \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \quad (1a)$$

$$\left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad t > 0 \quad (1b)$$

$$\left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad t > 0 \quad (1c)$$

$$T(x,t) = T_\infty, \quad 0 < x < L, \quad t = 0 \quad (1d)$$

Neste contexto,  $k(x)$  representa o coeficiente de condutividade térmica espacialmente variável, que descreve a capacidade do material da composição da placa em conduzir calor. O coeficiente  $w(x)$  é o termo da capacidade térmica específica, este termo indica o quanto de energia térmica é necessário para aumentar (ou diminuir) a temperatura de um objeto em um grau Celsius ( $^{\circ}\text{C}$ ) e  $L_z$  representa a espessura da placa. Por fim,  $h_e$

representa o coeficiente de transferência de calor externo e está relacionado com a lei de resfriamento de Newton.

As Eqs. 1b e 1c são condições de contorno, assumindo isolamento térmico nas fronteiras da placa, e a condição inicial é estabelecida da pela Eq. 1d, sendo que  $T_\infty$  é uma constante que representa a distribuição de temperatura inicial dentro da placa. A temperatura  $T(x,t)$  calculado no problema físico modelado pela Eq. 1 pode ser medido experimentalmente com termografia por infravermelho, conforme demonstrado nos estudos conduzidos por (Knupp *et al.* 2012, Padilha *et al.*, 2016, Abreu *et al.*, 2016b).

Este trabalho trata da análise da Equação (1) em três cenários distintos: primeiramente, quando ambos os coeficientes  $k(x)$  e  $w(x)$  são mantidos constantes; em segundo lugar, quando eles são modelados como funções lineares; e, finalmente, quando seguem funções exponenciais. O principal objetivo dessas análises é avaliar a capacidade do método TCMC, apresentado na próxima seção, em estimar com precisão esses parâmetros e posteriormente realizar a seleção de classe de modelo.

## 1.2 Filtro Analítico

No âmbito da Transformada Integral Generalizada, um filtro analítico assume um papel importante na obtenção de convergência de solução mais rápidas. Enquanto a solução formal oferece um procedimento básico, é recomendável minimizar a influência das equações e termos de fonte associados, resultando em melhorias significativas no desempenho computacional (Cotta e Mikhailov, 1997). A proposição de soluções de filtragem analítica representa uma abordagem mais flexível e amplamente empregada para aprimorar as taxas de convergência. Esses filtros têm o propósito de extrair informações dos termos de fonte originais para expressões analíticas mais simplificadas. Dada a diversidade de problemas e condições, a escolha do filtro mais apropriado muitas vezes requer experiência e discernimento por parte do usuário, a fim de encontrar um equilíbrio entre complexidade analítica e melhoria da convergência.

Em trabalhos como os de Knupp, Naveira-Cotta e Cotta (2013), Naveira-Cotta, Cotta e Orlande (2011), foram descritos métodos de filtragem de condições de contorno simples e esquemas progressivos de filtragem para promover a homogeneização das condições de contorno em problemas unidimensionais e multidimensionais.

A estratégia de filtragem é geralmente delineada da seguinte forma:

$$T(x,t) = F(x) + T^*(x,t) \tag{2}$$

O objetivo do filtro é gerar um problema filtrado, reduzindo a influência dos termos de fonte originais e, assim, simplificando a resolução do problema.

### 1.3 Solução do Problema Direto via GITT

Visando homogeneizar a condição inicial em  $t = 0$  e simplificar a dedução do termo de dissipação, além de obter uma ordem de truncamento menor, foi empregado um filtro analítico:

$$T(x,t) = T^*(x,t) + T_\infty \quad (3)$$

Assim, obtém-se o problema filtrado como:

$$w(x) \frac{\partial T^*(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k(x) \frac{\partial T^*(x,t)}{\partial x} \right] + \frac{q_w(x)}{L_z} - \frac{h_e}{L_z} T^*(x,t), \quad 0 < x < L, t > 0 \quad (4a)$$

$$\left. \frac{\partial T^*(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad t > 0 \quad (4b)$$

$$\left. \frac{\partial T^*(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad t > 0 \quad (4c)$$

$$T^*(x,t) = 0, \quad 0 < x < L, t = 0 \quad (4d)$$

A solução exata formal do problema referente à Eq. 4 é determinada pelo método da Transformada Integral Clássica (CITT) (Mikhailov; Ozisik, 1984). Essa solução é descrita como:

$$T^*(x,t) = \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{\psi}_i(x) \left[ \bar{f}_i e^{-\mu_i^2} + \int_0^t (\bar{g}_{f_i}(t') + \bar{g}_{d_i}(t')) e^{-\mu_i^2(t-t')} dt \right] \quad (5)$$

onde os autovalores  $\mu_i$  e autofunções  $\psi_i(x)$  são obtidos por meio de um problema de autovalor que contém as informações sobre o meio heterogêneo definido como:

$$\frac{d}{dx} \left[ k(x) \frac{d\tilde{\psi}_i(x)}{dx} \right] + \mu_i^2 w(x) \tilde{\psi}_i(x) = 0, \quad 0 < x < L \quad (6a)$$

$$\left. \frac{d\tilde{\psi}_i(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\tilde{\psi}_i(x)}{dx} \right|_{x=L} = 0, \quad 0 < x < L \quad (6b)$$

E os demais termos presentes na Eq.5 são calculados após a solução do Problema 6, sendo calculados da seguinte forma:

$$\tilde{\psi}_i(x) = \frac{\psi_i(x)}{\sqrt{N_i}}, \text{ Autofunção Normalizada} \quad (7a)$$

$$N_i = \int_0^L w(x)\psi_i^2(x)dx, \text{ Integral de Normalização} \quad (7b)$$

$$\bar{g}_{f_i}(t) = \int_0^L q(x)\tilde{\psi}_i(x)dx, \text{ Termo Fonte Transformado} \quad (7c)$$

$$\bar{g}_{d_i} = - \int_0^L \tilde{\psi}_i(x) \frac{h_e}{L_z} [T^*(x,t)] dx, \text{ Termo de Dissipação Transformado} \quad (7d)$$

A Técnica de Transformada Integral Generalizada é empregada aqui para resolver o problema de Sturm-Liouville Eq. 6. Essa técnica envolve a proposição de um problema de autovalor auxiliar mais simples e a expansão das autofunções desconhecidas em termos de uma base proposta (Naveira-Cotta, 2009), o problema de autovalor auxiliar mais simples é proposto como:

$$\frac{d^2\Omega_j(x)}{dx^2} + \gamma_j^2\Omega_j(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq L \quad (8a)$$

com as seguintes condições de contorno

$$\left. \frac{d\Omega_j(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Omega_j(x)}{dx} \right|_{x=L} = 0 \quad (8b)$$

A autofunção original é expandida de acordo com o par de transformadas integrais:

$$\text{Transformada: } \bar{\Psi}_{ij} = \int_0^L \tilde{\psi}_i(x)\tilde{\Omega}_j dx \quad (9a)$$

$$\text{Inversa: } \tilde{\psi}_i(x) = \sum_{j=1} \bar{\Psi}_{ij}\tilde{\Omega}_j(x) \quad (9b)$$

Aplicando o operador  $\int_0^L \tilde{\Omega}_j(x)(\cdot)dx$  no Problema de Auto-Valor original Eq.6, após algumas manipulações algébricas e utilizando a fórmula da inversa Eq. 9b, tem-se o problema algébrico de autovalor:

$$\tilde{\psi} \int_0^L k(x) \frac{d\tilde{\Omega}_m(x)}{dx} \frac{d\tilde{\Omega}_n(x)}{dx} dx = -\tilde{\psi} \mu_i^2 \int_0^L w(x) \tilde{\Omega}_m(x) \tilde{\Omega}_n(x) dx \quad (10)$$

que em forma matricial é dado por:

$$\mathbf{A} \tilde{\psi}_{n,m} = \mu_i^2 (-\mathbf{B}) \tilde{\psi}_{n,m} \quad (11a)$$

onde os coeficientes das matrizes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  podem ser escritos em termos das funções expandidas da seguinte forma:

$$A_{mn} = \int_0^L k(x) \frac{d\tilde{\Omega}_m(x)}{dx} \frac{d\tilde{\Omega}_n(x)}{dx} dx, \quad \text{Coeficientes da Matriz } \mathbf{A} \quad (11b)$$

$$B_{mn} = \int_0^L w(x) \tilde{\Omega}_m(x) \tilde{\Omega}_n(x) dx, \quad \text{Coeficientes da Matriz } \mathbf{B} \quad (11c)$$

As matrizes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  são calculadas com expressões analíticas, fornecendo os resultados para os autovalores e autofunções, de forma que os resultados fiquem dependentes de  $w(x)$  e  $k(x)$ . Após uma ordem de truncamento  $M$  e  $N$  finitamente grande, a fórmula inversa 9b será utilizada para combinar os resultados e reconstruir as autofunções originais desejadas.

Assim, as integrais de normalização  $N_i$  são determinadas de acordo com

$$N_i = \int_0^L w(x) \psi^2(x) dx = \int_0^L w(x) \psi_i(x) \psi_j(x) dx \quad (12a)$$

Aplicando a transformada inversa Eq. 9b, obtém-se

$$N_i = \sum_l \sum_j \bar{\Psi}_{ij} \bar{\Psi}_{il} \int_0^L w(x) \tilde{\Omega}_j(x) \tilde{\Omega}_l(x) dx \quad (12b)$$

Assim, a condição inicial transformada é calculada da seguinte forma:

$$\bar{T}_i(0) = \bar{f}_i = \int_0^L w(x) \tilde{\psi}_i(x) T_0 dx = T_0 \sum_j \bar{\Psi}_{ij} \int_0^L w(x) \tilde{\Omega}_j(x) dx \quad (13)$$

O termo da fonte Eq. 7c transformado é calculado analiticamente sendo dado pela

seguinte expressão:

$$\overline{g_{f_i}} = \int_0^L \tilde{\psi}_i(x) \frac{q(x)}{L_z} dx = \sum_j \frac{\Psi_{ji}}{\sqrt{N_i}} \int_0^L \tilde{\Omega}_j(x) \frac{q(x)}{L_z} dx \quad (14)$$

e  $\overline{g_{f_i}}$ , o termo de dissipação 7d transformado, é expresso analiticamente pela seguinte equação:

$$\overline{g_{d_i}} = - \int_0^L \tilde{\psi}_i(x) \frac{h}{L_z} [T^*(x,t)] dx = - \frac{h}{L_z} \sum_j \sum_l \sum_m \frac{\overline{\Psi}_{ji}}{\sqrt{N_i}} \frac{\overline{\Psi}_{ml}}{\sqrt{N_l}} \overline{T}_l \int_0^L \tilde{\Omega}_j(x) \tilde{\Omega}_l(x) dx \quad (15)$$

Utilizou-se a Transformada Integral Generalizada de forma que as soluções analíticas dos termos transformados são obtidas, permitindo que a solução final seja expressa em função dos parâmetros dos coeficientes  $k(x)$  e  $w(x)$ . Os modelos considerados para  $k(x)$  e  $w(x)$  incluem suas representações constantes, lineares e quadráticas. Todos os cálculos apresentados aqui são desenvolvidos em função dos parâmetros desses modelos de funções. Esses parâmetros serão estimados no problema inverso, que será detalhado no capítulo seguinte. A capacidade de determinar esses parâmetros com precisão é crucial para verificar a eficácia da metodologia proposta e para realizar a seleção do modelo mais adequado para descrever o fenômeno físico.

## 2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA INVERSO E SELEÇÃO DE CLASSE DE MODELO

Neste capítulo, serão apresentados alguns conceitos relevantes acerca da resolução do problema inverso de estimação de parâmetros e seleção de classe de modelos, utilizando abordagem bayesiana. Para obter amostras da densidade de probabilidade a posteriori dos parâmetros de interesse e também da evidência de cada classe de modelo considerada, empregou-se o método de amostragem Monte Carlo com cadeia de Markov Transicional. Além disso, uma breve descrição deste método será fornecida ao longo deste capítulo.

### 2.1 Estimação de Parâmetros

Neste estudo, os problemas inversos de estimação de parâmetros são formulados utilizando a abordagem da inferência bayesiana. Portanto, os parâmetros incertos de um dado modelo são tratados como variáveis aleatórias, e o foco está em determinar a PDFs a posteriori desses parâmetros. A densidade de probabilidade a posteriori conjunta dos parâmetros incertos do modelo é estabelecida pelo Teorema de Bayes (Kaipio; Somersalo, 2006). De acordo com Paulino; Turkman; Murteira, (2018), geralmente, quando o Teorema de Bayes é exposto por matemáticos, é comum iniciar com um espaço de probabilidade  $(\lambda, \mathcal{A}, \pi)$ , definido da seguinte maneira:

- $\lambda$  é um espaço fundamental não vazio (geralmente coincidente com o espaço de resultados), com elementos  $\Lambda \in \lambda$  e subconjuntos  $A \subseteq \lambda$ , chamados de eventos.
- $\mathcal{A}$  é a coleção de eventos com probabilidade associada.
- $\pi$  é a medida de probabilidade definida para os eventos  $A \subseteq \lambda$ ,  $A \in \mathcal{A}$ , em que  $\pi(A)$  representa a probabilidade do evento A.

Considera-se uma partição finita (ou infinita) de  $\lambda$ .

$$A_1, \dots, A_m, \pi(A_i) > 0, A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j, \cup_i A_i = \lambda.$$

Supondo um evento arbitrário  $B$ , com  $\pi(B) > 0$ , este pode ser decomposto na união disjunta de conjuntos da seguinte forma:

$$B = \cup_i (A_i \cap B).$$

Assim, de acordo com a aditividade da função  $\pi$  e a definição de probabilidade condicional, obtém-se:

$$\pi(B) = \sum_i \pi(A_i \cap B) = \sum_i \pi(B|A_i)\pi(A_i).$$

Por fim, rearranjando, chegamos ao Teorema de Bayes:

$$\pi(A_i|B) = \frac{\pi(B|A_i)\pi(A_i)}{\pi(B)}.$$

Substituindo  $A_i$  pelo vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\theta}$ ,  $B$  pelos dados experimentais observados  $\mathcal{Z}$  e considerando uma informação inicial  $\mathcal{M}$ , o Teorema de Bayes pode ser expresso da seguinte forma:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M}) = \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})}{\pi(\mathcal{Z}|\mathcal{M})} \quad (16)$$

onde  $\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})$  representa a função de verossimilhança,  $\pi(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})$  é a função densidade de probabilidade a *priori* dos parâmetros e  $\pi(\mathcal{Z}|\mathcal{M})$  é a verossimilhança marginal, também conhecida como evidência do modelo, e é calculada da seguinte forma (Paulino; Turkman; Murteira, 2018).

$$\pi(\mathcal{Z}|\mathcal{M}) = \int_{\Theta} \pi(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})d\boldsymbol{\theta} \quad (17)$$

onde  $\Theta$  representa o espaço de valores possíveis para  $\boldsymbol{\theta}$ . A distribuição de probabilidade antes da coleta de dados, que contém informações prévias sobre os parâmetros de interesse do sistema, é chamada de função densidade de probabilidade a *priori*. No contexto da estimação de parâmetros, o denominador da Eq. 16 atua apenas como uma constante de normalização.

Considerando os erros de medição como aditivos, independentes dos parâmetros incertos e seguem uma distribuição normal com média zero e uma matriz de covariância representada por  $\mathbf{W}$ , a função de verossimilhança é dada por:

$$\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^{N_d} \det \mathbf{W}}} \exp\left(-\frac{1}{2}[\mathcal{Z} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})]^T \mathbf{W}^{-1}[\mathcal{Z} - \mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})]\right) \quad (18)$$

Onde,  $N_d$  denota o número de dados observados na análise inversa, que corresponde ao número de elementos tanto do vetor de resposta observado  $\mathcal{Z}$  quanto do vetor de

resposta previsto pelo modelo  $\mathbf{T}(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$ .

Embora a Eq. (18) represente o modelo probabilístico completo para a obtenção de informações sobre os parâmetros incertos do modelo, vale resaltar que o seu cálculo apresenta desafios computacionais significativos, demandando o emprego de técnicas numéricas, tais como métodos de Monte Carlo com cadeias de Markov, para a obtenção de amostras que representem de forma precisa a densidade de probabilidade a *posterior* (Orlande, 2011). Entre os algoritmos mais empregados para a implementação do MCMC, destaca-se o Metropolis-Hastings (MH), que tem início com a escolha de uma densidade  $q(\boldsymbol{\theta}^*, \boldsymbol{\theta}^{t-1})$ , a qual indica a probabilidade de um novo candidato  $\boldsymbol{\theta}^*$  dado o estado atual  $\boldsymbol{\theta}^{t-1}$  da cadeia de Markov (Orlande, 2011; Santos, 2017; Barbosa, 2010; Watanabe, 2021). A partir dessa seleção, o algoritmo de Metropolis-Hastings é implementado seguindo os seguintes passos (Orlande, 2012; Orlande, 2011):

1. Seleciona-se um ponto candidato  $\boldsymbol{\theta}^*$  da densidade proposta  $q(\boldsymbol{\theta}^*, \boldsymbol{\theta}^{t-1})$ ;
2. Calcula-se:

$$\alpha_{MH} = \min \left[ 1, \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}^*|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}^*, \mathcal{M})q(\boldsymbol{\theta}^{t-1}|\boldsymbol{\theta}^*)}{\pi(\boldsymbol{\theta}^{t-1}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}^{t-1}, \mathcal{M})q(\boldsymbol{\theta}^*|\boldsymbol{\theta}^{t-1})} \right]; \quad (19)$$

3. Gera-se um número aleatório  $U$  com distribuição uniforme em  $(0,1)$ ;
4. Se  $U \leq \alpha_{MH}$ , define-se  $\boldsymbol{\theta}^t = \boldsymbol{\theta}^*$ ; caso contrário,  $\boldsymbol{\theta}^t = \boldsymbol{\theta}^{t-1}$ ;
5. Retorna-se ao passo 1 para gerar a sequência  $[\boldsymbol{\theta}^1, \boldsymbol{\theta}^2, \dots, \boldsymbol{\theta}^n]$ .

Neste trabalho, o algoritmo Monte Carlo via Cadeia de Markov Transicional será utilizado para realizar a amostragem dos parâmetros incertos do vetor  $\boldsymbol{\theta}$ , uma vez que sua ideia básica consiste em obter amostras da distribuição a *posterior*, considerando distribuições intermediárias (Ching; Wang, 2016; Rangel et al. 2020), os parâmetros incertos do vetor  $\boldsymbol{\theta}$  correspondem aos parâmetros dos coeficientes  $w(x)$  e  $k(x)$  do problema de condução apresentado no capítulo anterior. Estes coeficientes descrevem as propriedades de condutividade térmica e a capacidade térmica específica da placa.

Os dados experimentais utilizados são dados sintéticos, gerados por simulações computacionais, utilizando *NDSolve*, e acrescidos de ruído para simular dados reais obtidos em experimentos, como termografia por infravermelho. Os modelos considerados para  $w(x)$  e  $k(x)$  incluem representações constantes, lineares e quadráticas. A análise apresentada aqui evidencia como os parâmetros desses modelos serão estimados no problema inverso, descrito no capítulo seguinte.

## 2.2 Transitional Markov Chain Monte Carlo

O método Transitional Markov Chain Monte Carlo foi concebido por Ching e Chen, (2007), inspirado no método adaptativo de Metropolis-Hastings proposto por (Beck; Au, 2002), fundamentado no método de Monte Carlo via Cadeias de Markov. A proposta central é evitar a amostragem direta de distribuições de probabilidade desafiadoras, optando por amostrar de uma série de distribuições intermediárias que convergem para a distribuição a posteriori (Ching; Chen,2007).

Esse método herda as vantagens do *Adaptative Metropolis -Hastings* (AMH), sendo apropriado para funções de densidade de probabilidade extremamente pontiagudas, planas e multimodais, demonstrando eficiência particular em PDFs de alta dimensionalidade. Adicionalmente, o TMCMC possui a capacidade de selecionar automaticamente PDFs intermediárias, o que amplia sua versatilidade e eficácia na amostragem de distribuições complexas (Ching; Chen,2007).

O cálculo da distribuição a posteriori é realizado empregando o teorema de Bayes, conforme descrito na Eq. (16) (Kaipio; Fox, 2011). Contudo, conforme mencionado anteriormente, o método TMCMC evita o cálculo direto da distribuição. Dessa forma, para realizar o cálculo da distribuição a posteriori, calculam-se distribuições intermediárias. As PDFs amostradas são gradualmente modificadas, de modo que, no último estágio do método, a densidade amostrada seja a densidade alvo, ou seja, a densidade  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M})$ . No estágio  $i$  do método, a densidade de probabilidade amostrada é calculada pelo teorema de Bayes em sua forma proporcional, cuja fórmula é dada por:

$$\pi_i(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M}) \propto \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) \pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i} \quad (20)$$

onde  $0 \leq p_i \leq 1$  com  $p_0 = 0 < \dots < p_m = 1$ , onde  $m$  é o número total de estágios necessários para atingir a posteriori convergida, verifica-se pela Eq. (20) que  $\pi_0(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M})$  representa a densidade a priori  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})$  quando  $i = 0$ , e  $\pi_m(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M})$  corresponde à distribuição a posteriori  $\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{Z}, \mathcal{M})$  para  $i = m$ .

No estágio inicial do algoritmo obtém-se uma coleção de  $N_{sam}$  amostras da PDF a priori,  $\{\boldsymbol{\theta}_{0,1}, \boldsymbol{\theta}_{0,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{0,N_{sam}}\}$ . Em cada  $i$ -ésimo estágio do algoritmo, as amostras  $\{\boldsymbol{\theta}_{i,1}, \boldsymbol{\theta}_{i,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{i,N_{sam}}\}$  da  $i$ -ésima PDF intermediária são obtidas, e novas amostras da PDF intermediária seguinte,  $\{\boldsymbol{\theta}_{i+1,1}, \boldsymbol{\theta}_{i+1,2}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{i+1,N_{sam}}\}$ , são calculadas por re-amostragem. O processo de re-amostragem, conforme discutido por Ching e Chen (2007) e Ching e Wang (2016), é realizado considerando pesos normalizados de plausibilidade para cada amostra.

$$\bar{w}_{i,k} = \frac{w_{i,k}}{\sum_{k=1}^{N_{sam}} w_{i,k}} \quad (21)$$

onde  $w_{i,k}$  é o  $k$ -ésimo peso de plausibilidade relacionado à  $k$ -ésima amostra no  $i$ -ésimo estágio do TMCMC e é dada pela seguinte equação

$$w_{i,k} = \pi(\mathbf{Z}|\boldsymbol{\theta}_{i,k})^{(p_{i+1}-p_i)} \quad (22)$$

Onde  $\mathbf{w}_i$  é o vetor que contém os pesos de plausibilidade em um  $i$ , uma transição suave para o próximo estágio é realizada escolhendo um valor apropriado para o expoente  $p_{i+1}$ . Ching e Chen (2007) propuseram o valor de  $p_{i+1}$  de forma que para o vetor  $\mathbf{w}_i$ , o coeficiente de variação (*coefficient of variation*- COV) dos pesos de plausibilidade seja igual a um limite pré-determinado de 100%. Dessa forma, pode-se calcular  $p_{i+1}$  usando a seguinte fórmula:

$$p_{i+1} = \arg \min(|COV_{\mathbf{w}_i} - v_t|) \quad (23)$$

onde  $v_t$  é o valor prescrito e  $COV_{\mathbf{w}_i}$  é o coeficiente de variação dos pesos de plausibilidade, definido pela razão entre a média  $\mu_{\mathbf{w}_i}$  e o desvio padrão  $\sigma_{\mathbf{w}_i}$  (Beck; Au,2002), ou seja

$$COV_{\mathbf{w}_i} = \frac{\sigma_{\mathbf{w}_i}}{\mu_{\mathbf{w}_i}} \quad (24)$$

Em cada estado re-amostrado é realizado um passo de Metropolis-Hastings. Nesse processo, um candidato é gerado a partir de uma distribuição Gaussiana centrada em uma amostra do estágio anterior, de índice  $l \in [1, \dots, N_{sam}]$ , selecionada aleatoriamente conforme a distribuição de probabilidades representada pelo vetor de plausibilidade normalizado  $\mathbf{w}_i$  e a matriz de covariância é dada por

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \beta^2 \sum_{k=1}^{N_{sam}} \left[ \frac{w_{i,k}}{S_i N_s} (\boldsymbol{\theta}_{i,k} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{i+1})(\boldsymbol{\theta}_{i,k} - \bar{\boldsymbol{\theta}}_{i+1})^T \right] \quad (25)$$

onde  $\bar{\boldsymbol{\theta}}_{i+1}$  representa a média das amostras ponderadas pela plausibilidade e é dado por

$$\bar{\boldsymbol{\theta}}_{i+1} = \frac{\sum_{l=1}^{N_{sam}} w_{i,l} \cdot \boldsymbol{\theta}_{i,l}}{\sum_{l=1}^{N_{sam}} w_{i,l}} \quad (26)$$

e  $\beta$  é um fator de escala da matriz de covariância. É definido de forma que regule a taxa de aceitação, ao mesmo tempo que realize saltos no MCMC (Ching e Chen, 2007). A aceitação dos candidatos da cadeia gerados pelo movimento de Metropolis-Hastings ocorre por meio da aplicação da razão de Hastings:

$$r_{MH} = \min \left[ 1, \frac{\pi_i(\boldsymbol{\theta}^* | \mathcal{Z}, \mathcal{M})}{\pi_i(\boldsymbol{\theta}_{i,l}^c | \mathcal{Z}, \mathcal{M})} \right] \quad (27)$$

Em que  $\boldsymbol{\theta}^*$  é o candidato e  $\boldsymbol{\theta}_{i,l}^c$  é a amostra geradora. No final do último estágio do TMCMC, após amostra a PDF alvo, obtém-se a evidência do modelo considerando as médias dos pesos de plausibilidade registrados em cada estágio:

$$S_i = \frac{1}{N_{sam}} \sum_{k=1}^{N_{sam}} w_{i,k} \quad (28)$$

e calculando o produtório:

$$\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}) = \prod_{i=1}^m S_i \quad (29)$$

O uso do produtório de  $S_i$  como estimador da evidência de uma classe de modelos pode ser demonstrado conforme abordado por Ching e Chen (2007), Ching e Wang (2016). O passo a passo da demonstração da Eq. 29 inicia-se realizando o cálculo do valor esperado da plausibilidade  $w_{i+1}$ :

$$E(w_{i+1}) = \int w_{i+1} \pi_i(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} \quad (30)$$

Com base na equação (22), é possível reescrever (30) da seguinte forma:

$$E(w_{i+1}) = \int w_{i+1} \pi_i(\mathcal{Z} | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_{i+1} - p_i} \pi_i(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} \quad (31)$$

Utilizando as equações (16), (17) e (20), tem-se:

$$\pi_i(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) = \frac{\pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) \pi(\mathcal{Z} | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i}}{\int \pi(\boldsymbol{\theta} | \mathcal{M}) \pi(\mathcal{Z} | \boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i} d\boldsymbol{\theta}} \quad (32)$$

Substituindo (32) em (31), obtém-se:

$$\begin{aligned}
E(w_{i+1}) &= \int \pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_{i+1}-p_i} \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i}}{\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i} d\boldsymbol{\theta}} d\boldsymbol{\theta} \\
&= \frac{\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_{i+1}} d\boldsymbol{\theta}}{\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_i} d\boldsymbol{\theta}}
\end{aligned} \tag{33}$$

Assim, o produto dos valores de  $w_{i+1}$  é expresso como:

$$\prod_{i=0}^{n_i-2} E(w_{i+1}) = \frac{\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_{n_i-1}} d\boldsymbol{\theta}}{\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_0} d\boldsymbol{\theta}} \tag{34}$$

Sabendo que  $p_0 = 0$ ,  $p_{n_i-1} = 1$  e também que  $\int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M}) d\boldsymbol{\theta} = 1$ , obtém-se:

$$\prod_{i=0}^{n_i-2} E(w_{i+1}) = \int \pi(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{M})\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}, \mathcal{M})^{p_{n_i-1}} d\boldsymbol{\theta} \tag{35}$$

Se um número suficientemente grande de amostras  $N_{sam}$  for escolhido, pode-se aplicar a Lei dos Grandes Números (Ching e Chen 2007), e assim, o valor esperado da plausibilidade pode ser expresso como:

$$E(w_{i+1}) \approx \frac{1}{N_{sam}} \sum_{l=1}^{N_{sam}} w_{i+1,l} \tag{36}$$

Reescrevendo a Eq. (36) como:

$$\prod_{i=0}^{n_i-2} S_{i+1} \approx \pi(\mathcal{Z}|\mathcal{M}) \tag{37}$$

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

É pertinente ressaltar alguns aspectos referentes ao método discutido. Uma vantagem notável do TMCMC é sua capacidade de fornecer uma estimativa para a evidência do modelo como um subproduto do algoritmo. Além disso, o uso da Eq. 25 elimina a necessidade de calibração manual da distribuição auxiliar, uma vez que considera a covariância amostral dos estados em cada etapa do algoritmo (Ching e Wang 2016). Isso implica que apenas o fator de escala  $\beta$  precisa ser selecionado para manter uma taxa de aceitação adequada nos passos de MH. O Algoritmo 1 fornece um pseudocódigo para o

TMCMC.

---

### AlgoritmoTMCMC

---

```

1: Inicialize  $i = 0$ ,  $p_0 = 0$  e  $CE = 1$ ; * $CE$  armazena a evidência do modelo
2: Obtenha  $N_{sam}$  amostras  $\theta_0$  da distribuição priori, gerando o conjunto  $\{\theta_{0,1}, \theta_{0,2}, \dots, \theta_{0,N_{sam}}\}$ 
3: while  $p_i \neq 1$  do
4:    $i = i + 1$ 
5:   Calcule  $p_i$  para minimizar Eq. (23)
6:   if  $p_i > 1$  then
7:      $p_i = 1$ 
8:   end if
9:   Calcule a plausibilidade  $w_i$  conforme Eq. (22)
10:  Obtenha a média aritmética  $S_i$  de  $w_i$ , onde  $w_i = [w_{i,1}, w_{i,2}, \dots, w_{i,N_{sam}}]^T$ 
11:  Calcule a média ponderada  $\hat{\theta}_{j+1}$  das amostras  $\theta_i$  ponderada pela plausibilidade (26)
12:   $CE = S_i \cdot CE$  (Atualize a evidência do modelo)
13:  Calcule a matriz de covariância  $\Sigma_i$  usando Eq. (25)
14:   $\theta_i^c = \theta_i$ 
15:  for  $l^* = 1$  até  $N_{sam}$  do
16:    Selecione  $l$  de  $\{1, \dots, N_{sam}\}$ , com probabilidade  $w_i(N_{sam} * S_i)^{-1}$ 
17:    Proponha  $\theta^* \sim \mathcal{N}(\theta_{i,l}^c, \Sigma_i)$ 
18:    Obtenha  $r \sim \mathcal{U}(0, 1)$ 
19:    Calcule  $\alpha_i$  (Razão de Hastings)
20:    if  $r \leq \alpha_i$  then
21:       $\theta_{i,l}^c = \theta^*$ 
22:    end if
23:     $\theta_{i,l^*} = \theta_{i,l}^c$ 
24:  end for
25: end while

```

---

### 2.3 Seleção de Classe de Modelos Bayesiana

A seleção da classe de modelos pode ser vista como uma etapa adicional de inferência que visa identificar a classe de modelo mais adequada para descrever os dados experimentais observados (Mackay, 2003; Beck; Yuen, 2004). Na comparação de modelos, é crucial considerar tanto a qualidade do ajuste aos dados quanto a complexidade dos modelos envolvidos (Muto; Beck, 2008; Mackay, 2003; Beck; Yuen, 2004). Em resumo, o objetivo é encontrar o melhor ajuste possível com o modelo mais simples disponível, ou seja, o modelo com maior acurácia dos resultados e menor custo computacional. O teorema de Bayes integra naturalmente esses aspectos, dispensando avaliações adicionais (Muto; Beck, 2008). Suponha que  $\mathbf{M}$  seja uma coleção de diferentes classes de modelos competindo para representar os dados experimentais  $\mathcal{Z}$ .

$$\mathbf{M} = \{\mathcal{M}_0, \mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_{N_{mod}}\} \quad (38)$$

onde  $N_{mod}$  é o número de modelos analisados. De acordo com o teorema de Bayes, a probabilidade *a posteriori* de uma classe de modelo  $\mathcal{M}_i$  é dada pela seguinte equação:

$$\pi(\mathcal{M}_i | \mathcal{Z}, \mathbf{M}) = \frac{\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i) \pi(\mathcal{M}_i | \mathbf{M})}{\sum_{i=1}^N \pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i) \pi(\mathcal{M}_i | \mathbf{M})} \quad i = 0, 1, \dots, N_{mod} \quad (39)$$

onde  $\pi(\mathcal{M}_i | \mathbf{M})$  é a probabilidade *a priori* da classe de modelo  $\mathcal{M}_i$  e  $\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i)$  é a verossimilhança marginal ou evidência do modelo  $\mathcal{M}_i$ . Segundo Muto e Beck (2008), a evidência de modelo geralmente exerce grande influência na probabilidade da classe de modelo. A Equação 39 mostra claramente que a probabilidade *a posteriori* de uma classe de modelos específica está diretamente relacionada à sua evidência. Essa evidência encapsula automaticamente um equilíbrio entre a capacidade do modelo de ajustar-se aos dados e sua complexidade (Gull, 1988; Beck e Yuen, 2004; Ching, 2005). Considerando a Equação (16), o logaritmo natural da evidência do modelo  $\mathcal{M}_i$  pode ser expresso como:

$$\ln[\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i)] = \ln[\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i)] \int_{\Theta} \pi(\boldsymbol{\theta}_i | \mathcal{Z}, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta}_i \quad (40)$$

Dado que a evidência não depende de  $\boldsymbol{\theta}_i$ , ela é considerada uma constante, permitindo sua incorporação na integral. Com as substituições estabelecidas pelo Teorema de Bayes, obtém-se (Muto e Beck, 2008):

$$\ln[\pi(\mathcal{Z} | \mathcal{M}_i)] = \int_{\Theta} \ln \left[ \frac{\pi(\mathcal{Z} | \boldsymbol{\theta}_i, \mathcal{M}_i) \pi(\boldsymbol{\theta}_i | \mathcal{M}_i)}{\pi(\boldsymbol{\theta}_i | \mathcal{Z}, \mathcal{M}_i)} \right] \pi(\boldsymbol{\theta}_i | \mathcal{Z}, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta}_i \quad (41)$$

De acordo com (Gull, 1988) é possível decompor a evidência em uma soma de dois termos. O primeiro se refere ao ajuste aos dados e o segundo, chamado de fator de Ockham, penaliza a complexidade do modelo. Esta decomposição é formalizada pela seguinte equação:

$$\ln[\pi(\mathcal{Z}|\mathcal{M}_i)] = \int_{\Theta} \ln[\pi(\mathcal{Z}|\boldsymbol{\theta}_i, \mathcal{M}_i)] \pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathcal{Z}, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta}_i - \int_{\Theta} \ln \left[ \frac{\pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathcal{Z}, \mathcal{M}_i)}{\pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathcal{M}_i)} \right] \pi(\boldsymbol{\theta}_i|\mathcal{Z}, \mathcal{M}_i) d\boldsymbol{\theta}_i \quad (42)$$

A Eq. 42 mostra que o logaritmo natural da evidência pode ser dividido em dois termos distintos. O primeiro informa a qualidade do ajuste do modelo aos dados, ponderado pela distribuição a posteriori dos parâmetros. O segundo, conhecido como informação de Kullback-Leibler, mede a discrepância entre as distribuições a posteriori e a priori dos parâmetros do modelo  $\mathcal{M}_i$ . Esse termo, sempre positivo, atua como uma penalização à complexidade do modelo, funcionando como o fator de Ockham. Assim, conforme a Eq. 42, o logaritmo natural da evidência de uma classe de modelos é composto por um termo relacionado ao ajuste aos dados e outro que penaliza a complexidade do modelo.

A escolha do modelo baseada exclusivamente no ajuste aos dados tende a favorecer modelos mais complexos, geralmente resultando em super parametrização e custo computacional elevado. A seleção de modelos bayesianos evita a super parametrização ao favorecer automaticamente modelos mais simples, com custo computacional menor. A evidência do modelo não pode ser determinada a priori e seu cálculo envolve o cálculo de uma integral complexa de alta dimensão, tornando-se desafiador.

Para evitar a complexidade computacional associada ao cálculo da evidência do modelo, este trabalho utiliza o método TMCMC, descrito no capítulo anterior, que oferece uma estimativa da evidência do modelo como um subproduto do algoritmo, sem exigir custos computacionais adicionais.

### 3 RESULTADOS

#### 3.1 Análise de Convergência da GITT No Problema de Transferência de calor em uma placa plana

Nesta seção, apresentam-se os resultados do estudo referente ao problema de transferência de calor em uma placa plana, conforme detalhado no Capítulo 1. Primeiramente, realiza-se uma análise comparativa entre a solução obtida pelo método GITT e a solução gerada pela rotina NDSolve da plataforma *Wolfram Mathematica 13.3* para um problema de condução de calor descrito na seção 1. Nesse cenário, os coeficientes de capacidade térmica específica e condutividade térmica variam espacialmente de forma quadrática. A solução obtida pelo NDSolve é utilizada como referência para avaliar a precisão da solução obtida pela Transformada Integral Generalizada.

A Tabela 1 detalha as propriedades termo-físicas do problema em análise. As dimensões físicas da placa são especificadas com um comprimento de  $L = 80$  mm e uma espessura de  $L_z = 1,5$  mm. O tempo de simulação é de 1000 segundos, sendo o período necessário para o sistema atingir o regime permanente. Além disso, foi adotado um coeficiente de transferência de calor  $h_e$  constante ao longo de todo o processo. É importante destacar a diferença no fluxo de calor  $q_w(x)$  utilizado na GITT e na rotina NDSolve. A Tabela 2 apresenta os parâmetros predefinidos, valores próximos aos reportados por Knupp *et al.*, (2012) em seu estudo, mantendo a mesma ordem de grandeza.

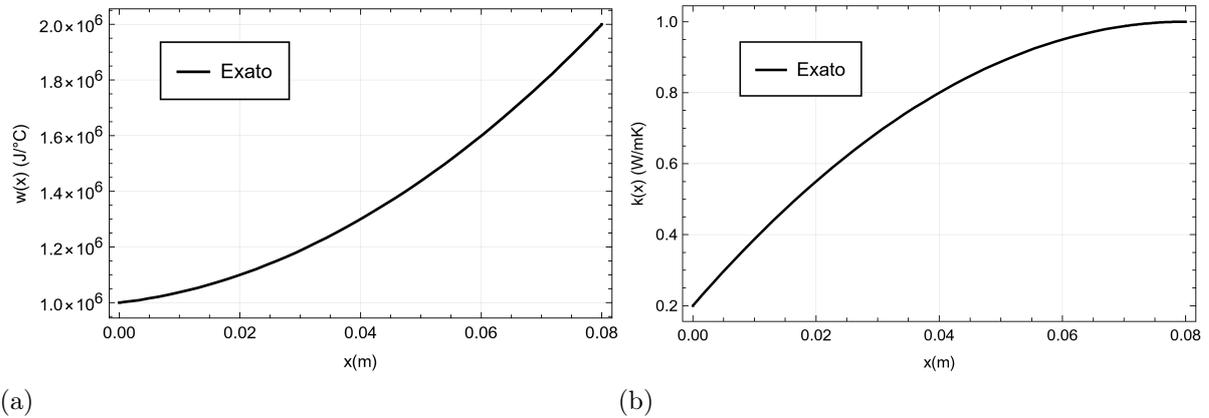
Tabela 1 - Propriedades Termo físicas da Placa: Modelo Quadrático.

Modelo	$w(x)$ (J/kgK)	$k(x)$ (W/mK)
Quadrático	$1.25 \times 10^8 x^2 + 2.50 \times 10^6 x + 1.0 \times 10^6$	$-125x^2 + 20x + 0.2$

Fonte: O autor, 2024.

A Figura 2 fornece uma representação gráfica do comportamento funcional dos coeficientes  $w(x)$  e  $k(x)$ , conforme detalhado na Tabela 1.

Figura 2 - Coeficientes Exatos



Legenda: (a) Coeficiente  $w(x)$  e (b) Coeficiente  $k(x)$ .

Fonte: O autor, 2024.

Tabela 2 - Parâmetros predefinidos

Parâmetro	Valor
$h_e$	15W/m <sup>2</sup> K
$T_\infty$	25°C
$T_0$	25°C
$q_{w1}(x)$	$\begin{cases} 500 \text{ W/m}^2 & \text{se } x \leq \frac{L}{2} \\ 0 \text{ W/m}^2 & \text{se } x > \frac{L}{2} \end{cases}$
$q_{w2}(x)$	$500 \left( 1 - \left( 1 + e^{[-5000(x-0.5L)]} \right)^{-1} \right) \text{ W/m}^2$

Fonte: O autor, 2024.

Inicialmente, é realizada uma comparação da convergência entre as soluções obtidas pelo NDSolve e GITT com diferentes ordens de truncamento. Nessa comparação, o modelo quadrático é adotado, apesar de a solução pelo NDSolve apresentar erro numérico; utiliza-se essa solução para verificar e escolher a ordem de truncamento da GITT. Na GITT, utilizou-se a função degrau  $q_{w1}$ , enquanto na rotina NDSolve foi aplicada a função  $q_{w2}$ , que simula a função degrau. A solução do problema de condução de calor é obtida com a função NDSolve ao fornecer como parâmetros a equação diferencial parcial, as condições iniciais e de contorno, e o domínio das variáveis independentes, resultando em uma função interpolada que representa a solução numérica. A Tabela 3 apresenta as soluções obtidas via GITT para ordens de truncamento dos autovalores de 15 até 25 e das autofunções de 6 até 10 para diferentes tempos e posições.

Tabela 3 - Tabela de convergência da solução via GITT.

$t = 600s$ e $x = 2mm$ , NDSolve= 57.6615					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	58,3608	57,2664	57,5534	57,7296	57,6958
20	58,3606	57,2667	57,5536	57,7535	57,6413
25	58,3606	57,2666	<b>57,5536</b>	57,7535	57,6422

$t = 1000s$ e $x = 2mm$ , NDSolve= 57.7788					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	58,4785	57,384	57,6711	57,8473	57,8135
20	58,4783	57,3843	57,6713	57,8712	57,759
25	58,4783	57,3843	<b>57,6756</b>	57,8711	57,7599

$t = 600s$ e $x = 4mm$ , NDSolve= 40.8718					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	40,6132	40,8873	40,9557	40,9587	40,8599
20	40,6131	40,8875	40,9563	40,9429	40,9110
25	40,6131	40,8875	<b>40,9562</b>	40,9430	40,9104

$t = 1000s$ e $x = 4mm$ , NDSolve= 40.9859					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	40,7274	41,0015	41,0699	41,0728	40,9741
20	40,7273	41,0017	41,0705	41,0571	41,0252
25	40,7273	41,0017	<b>41,0704</b>	41,0571	41,0246

$t = 600s$ e $x = 6mm$ , NDSolve= 25.8088					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	25,1177	25,7891	25,7754	25,9651	26,0565
20	25,1178	25,7894	25,7758	25,9650	26,0569
25	25,1177	25,7894	<b>25,7757</b>	25,9649	26,0569

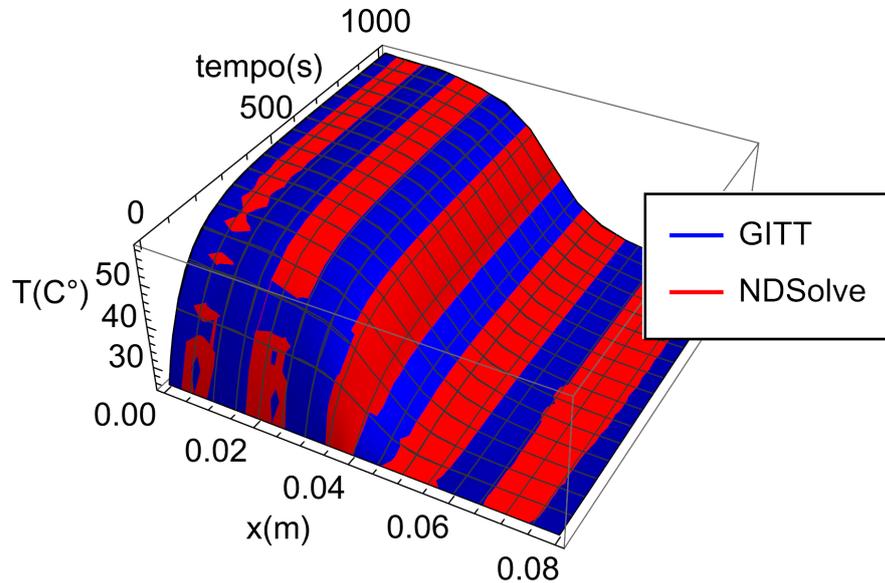
$t = 1000s$ e $x = 6mm$ , NDSolve= 25.8796					
$M$	$N = 6$	$N = 8$	$N = 10$	$N = 12$	$N = 14$
15	25,1881	25,8458	26,1268	25,811	25,822
20	25,1881	25,8461	26,1273	25,8129	25,7771
25	25,1881	25,8460	<b>26,1273</b>	25,813	25,7774

Todas as soluções estão em graus Celsius ( $^{\circ}C$ ).

Fonte: O autor, 2024.

Ao analisar a Tabela 3, observa-se que todas as soluções obtidas via GITT se aproximam da solução via NDSolve, de forma geral, ficando com uma diferença de menos de  $1^{\circ}C$ , por esse motivo escolhe-se a ordem de truncamento  $M = 25$  e  $N = 10$  por obter uma solução satisfatória com um custo computacional razoável. Além disso, nota-se que a ordem de truncamento dos autovalores  $M$  tem um impacto menor na convergência. Com base nisso, as análises subsequentes das soluções adotaram essa ordem como referência. Portanto, a Figura 3 apresenta uma comparação gráfica em regime permanente entre as soluções obtidas pela GITT e pela rotina NDSolve para o modelo quadrático de  $w(x)$  e  $k(x)$ , considerando um tempo de 1000s e um comprimento  $L$  de 0.08m.

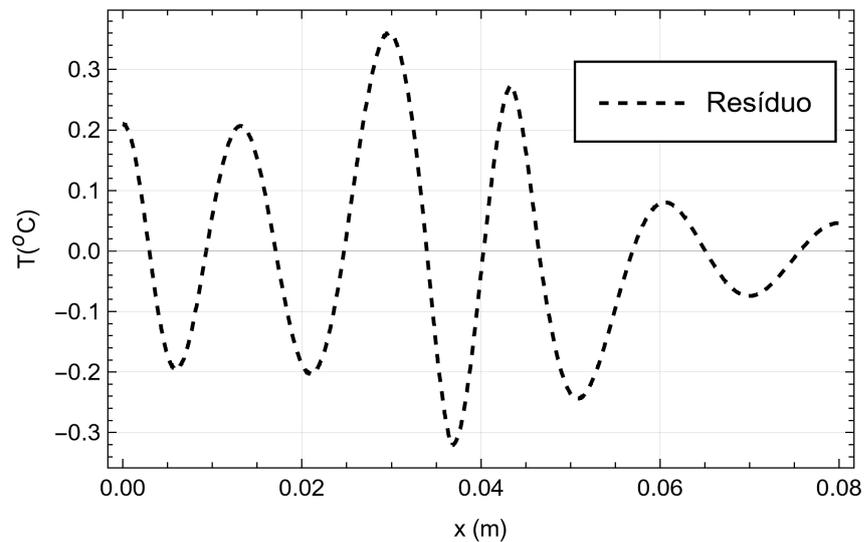
Figura 3 - Soluções - Regime Permanente GITT com  $M = 25$  e  $N = 10$ ;  $w(x)$  e  $k(x)$  apresentados na Tabela 1.



Fonte: O autor, 2024.

Na Figura 3, é possível observar que, durante o regime permanente, ambas as abordagens apresentaram comportamentos notavelmente semelhantes, resultando em resultados com uma proximidade significativa. Para uma análise mais minuciosa das áreas com maiores disparidades entre as soluções, foi elaborado um gráfico representando a diferença entre as soluções obtidas com o método NDSolve e a técnica GITT. O gráfico dos resíduos em graus Celsius entre as soluções, demonstrado na Figura 4, revela que as maiores amplitudes das oscilações estão localizadas próximo à região de transição do fluxo de calor  $q(x)$ , um dos parâmetros relevantes do problema. Apesar disso, o erro entre as soluções permanece relativamente baixo, exibindo diferenças na ordem de grandeza de  $10^{-1}$ .

Figura 4 - Análise residual das soluções - Regime Permanente GITT com  $M = 25$  e  $N = 10$ ;  $t = 1000s$ ;  $w(x)$  e  $k(x)$  apresentados na Tabela 1



Fonte: O autor, 2024.

Após a análise de convergência apresentada, é evidente que, apesar das variações pontuais, sobretudo nas imediações da região de transição do fluxo de calor, os resultados apresentam uma concordância geral notável. Essa consistência sugere a viabilidade da utilização do método GITT no contexto da resolução do problema inverso de transferência de calor que será realizada na próxima seção. Isso deve-se a capacidade de reproduzir com precisão o comportamento térmico da placa, aliada à eficiência computacional da técnica GITT.

### 3.1.1 Problema Inverso

Nesta seção serão apresentados os resultados do problema inverso de estimação de parâmetros e seleção de classes de modelos para a transferência de calor em uma placa plana. Considerou-se a possível variação espacial do coeficiente capacidade térmica específica  $w(x)$  e da condutividade térmica  $k(x)$ . As classes de modelos são diferenciadas com base nessa possibilidade de variação, conforme detalhado na Tabela 4.

Em todos os cenários, o coeficiente de transferência de calor por convecção natural na face superior externa da placa,  $h_e$ , foi mantido constante. O valor de  $h_e$  utilizado na geração dos dados experimentais simulados foi o mesmo apresentado na Tabela 2 para todos os casos analisados.

Nas análises subsequentes, foram utilizados dados experimentais sintéticos de temperatura para simular dados experimentais reais, como os obtidos por termografia infravermelha, gerados com base nos modelos descritos na Tabela 4, e incrementados com

Tabela 4 - Modelos empregados para obter os dados experimentais sintéticos nos Casos 1, 2 e 3.

Caso	$w(x)$	$k(x)$
1	$1.5 \times 10^6$	0.4
2	$(1.25 \times 10^7)x + 1.0 \times 10^6$	$10x + 0.2$
3	$(1.25 \times 10^8)x^2 + (2.50 \times 10^6)x + 1.0 \times 10^6$	$-125x^2 + 20x + 0.2$

Fonte: O autor, 2024.

ruído gaussiano de média zero e desvio padrão de  $0,5^\circ C$ , esse tipo de ruído foi escolhido de modo ser coerente e simular razoavelmente experimentos por termografia infravermelha como realizados em (Knupp *et al.*, 2012, Abreu *et al.*, 2016a). Três cenários distintos foram considerados. No primeiro cenário, os dados observados foram gerados usando um modelo constante para  $w(x)$  e  $k(x)$ , resultando em dados sem variação espacial. No segundo cenário, um modelo linear foi empregado para gerar os dados observados de  $w(x)$  e  $k(x)$ . No terceiro cenário, utilizou-se um modelo quadrático para  $w(x)$  e  $k(x)$ . Assim, os cenários 2 e 3 apresentam variações espaciais.

É importante destacar que, em todos os cenários analisados, os dados observados foram gerados utilizando o solver numérico disponível na plataforma *Wolfram Mathematica*. Esta abordagem permite examinar se os modelos mais plausíveis se alinham com as expectativas, mesmo com a discrepância entre o modelo utilizado para gerar os dados experimentais e o modelo aplicado na resolução do problema inverso, a tabela 5 exibe as classes de modelos, juntamente com os parâmetros estimados.

Tabela 5 - Modelos utilizados no processo de inversão do problema nos casos 1, 2 e 3

Modelo	$w(x)$	$k(x)$	Vetor de Parâmetros Incertos
$\mathcal{M}_0$	$w(x) = w_0$	$k(x) = k_0$	$\theta = [w_0, k_0]^T$
$\mathcal{M}_1$	$w(x) = w_1x + w_0$	$k(x) = k_1x + k_0$	$\theta = [w_1, w_0, k_1, k_0]^T$
$\mathcal{M}_2$	$w(x) = w_2x^2 + w_1x + w_0$	$k(x) = k_2x^2 + k_1x + k_0$	$\theta = [w_2, w_1, w_0, k_2, k_1, k_0]^T$

Fonte: O autor, 2024.

Em todos os casos, foi realizada a estimativa de parâmetros utilizando três classes distintas de modelos no processo inverso. Este procedimento teve como objetivo identificar qual dos modelos é o mais plausível, baseando-se nas evidências de modelo calculadas. A análise envolveu a comparação dos resultados obtidos para cada classe de modelo, permitindo uma avaliação da adequação de cada modelo às observações experimentais. Com isso, buscou-se determinar o modelo que melhor se alinha com as evidências e que oferece a representação mais adequada.

Além disso, nos três cenários, as medidas de temperatura foram obtidas em três pontos espacialmente distintos, situados nas posições:  $x = 0,25L$  mm,  $x = 0,5L$  mm e

$x = 0,75L$  mm. Cada sensor realizou 1001 medições no intervalo de tempo analisado, que foi de 1000 segundos, com medições igualmente espaçadas a cada 1 segundo. Dessa forma, o vetor de dados experimentais possui 3003 elementos que serão utilizados na resolução do problema inverso.

Nos dois primeiros casos, os parâmetros utilizados no TMCMC para estimar os valores foram  $N_{sample} = 5000$ , onde  $N_{sample}$  representa o número de amostras por estágio. Para o caso 3, foi utilizado  $N_{sample} = 20000$ . Além disso, em todos os casos, a COV dos pesos de importância foi definida como 1 e o fator  $\beta$  foi fixado em 0.1. Nos casos 1, 2 e 3, foram escolhidas distribuições uniforme a priori  $\mathcal{U}$  para os parâmetros estimados e estão detalhadas nas respectivas Tabelas 6, 8 e 10.

### 3.1.2 Caso: 1

No primeiro caso de teste, os dados experimentais sintéticos foram gerados utilizando o modelo constante, caracterizado pela ausência de variação nos coeficientes de difusão térmica,  $w(x)$ , e de condutividade térmica,  $k(x)$ . Para resolver o problema inverso com este conjunto de dados, foram aplicados os três modelos apresentados na Tabela 5. Os resultados obtidos são discutidos na presente seção.

Durante o processo de inversão, os parâmetros estimados correspondem aos elementos do vetor incerto específico de cada modelo ( $\theta$  de  $\mathcal{M}_i$ ). A Tabela 5, na coluna 4, detalha o vetor incerto associado a cada modelo  $\mathcal{M}_i$ . A Tabela 6 apresenta os valores dos parâmetros estimados para os três modelos no Caso 1.

Tabela 6 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 1

Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$	Priori
$\mathcal{M}_0$	$w_0$	$1.49852 \times 10^6$	$[1.49183 \times 10^6, 1.50479 \times 10^6]$	0.00224991	$\mathcal{U}[0.5 \times 10^6, 3.5 \times 10^6]$
	$k_0$	0.397697	$[0.386813, 0.408172]$	0.013743	$\mathcal{U}[0.2, 1]$
$\mathcal{M}_1$	$w_1$	607491	$[-573229, 1.99087 \times 10^6]$	1.12418	$\mathcal{U}[-3.50 \times 10^6, 3.50 \times 10^7]$
	$w_0$	$1.4859 \times 10^6$	$[1.45372 \times 10^6, 1.51152 \times 10^6]$	0.0102091	$\mathcal{U}[0.5 \times 10^6, 3.5 \times 10^6]$
	$k_1$	-0.116774	$[-0.403075, 0.160875]$	-1.27223	$\mathcal{U}[-5, 5]$
	$k_0$	0.401991	$[0.386284, 0.417872]$	0.020339	$\mathcal{U}[0.2, 1]$
$\mathcal{M}_2$	$w_2$	-167229	$[-331052, 672438]$	-1.76186	$\mathcal{U}[-1.25 \times 10^6, 1.25 \times 10^6]$
	$w_1$	623858	$[-1.52447 \times 10^6, 2.13279 \times 10^6]$	1.31992	$\mathcal{U}[-3.50 \times 10^6, 3.50 \times 10^7]$
	$w_0$	$1.48823 \times 10^6$	$[1.45673 \times 10^6, 1.53421 \times 10^6]$	0.011609	$\mathcal{U}[0.5 \times 10^6, 3.5 \times 10^6]$
	$k_2$	-0.798427	$[-2.17092, 2.41728]$	-0.832	$\mathcal{U}[-4, 4]$
	$k_1$	-0.0389154	$[-0.554052, 0.196358]$	-4.48344	$\mathcal{U}[-5, 5]$
	$k_0$	0.395167	$[0.383541, 0.413833]$	0.0194825	$\mathcal{U}[0.2, 1]$

Unidade de medida para  $w_i$  é J/kgK e para  $k_i$  é W/mK.

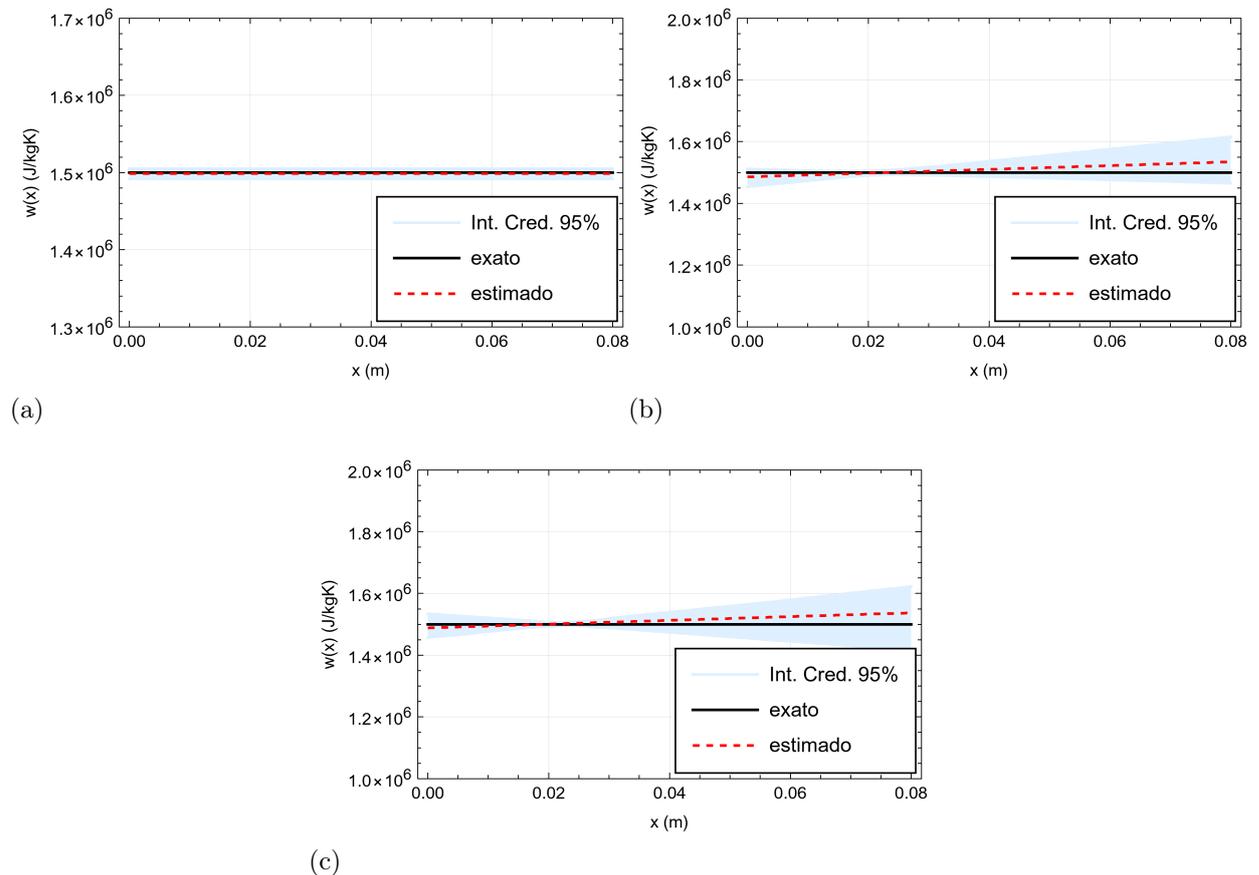
Fonte: O autor, 2024.

Ao analisar a Tabela 6, observa-se que todos os modelos utilizados no processo de

inversão apresentaram um baixo coeficiente de variância  $\frac{\sigma}{\mu}$ , indicando alta precisão. O modelo  $\mathcal{M}_0$  se destaca por obter médias dos parâmetros muito próximas dos valores exatos utilizados na geração de dados experimentais sintéticos e pelos menores coeficientes de variância. Nos modelos  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$ , os parâmetros associados a  $x$  e ao termo quadrático no caso de  $\mathcal{M}_2$  tendem a se aproximar de zero, como era esperado, já que são modelos hiperparametrizados. Isso resulta em comportamentos muito próximos ao modelo constante utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos.

A Figura 5 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de difusão térmica do modelo exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Além disso, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para os coeficientes estimados.

Figura 5 - Coeficiente  $w(x)$  Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1



Legenda: (a) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

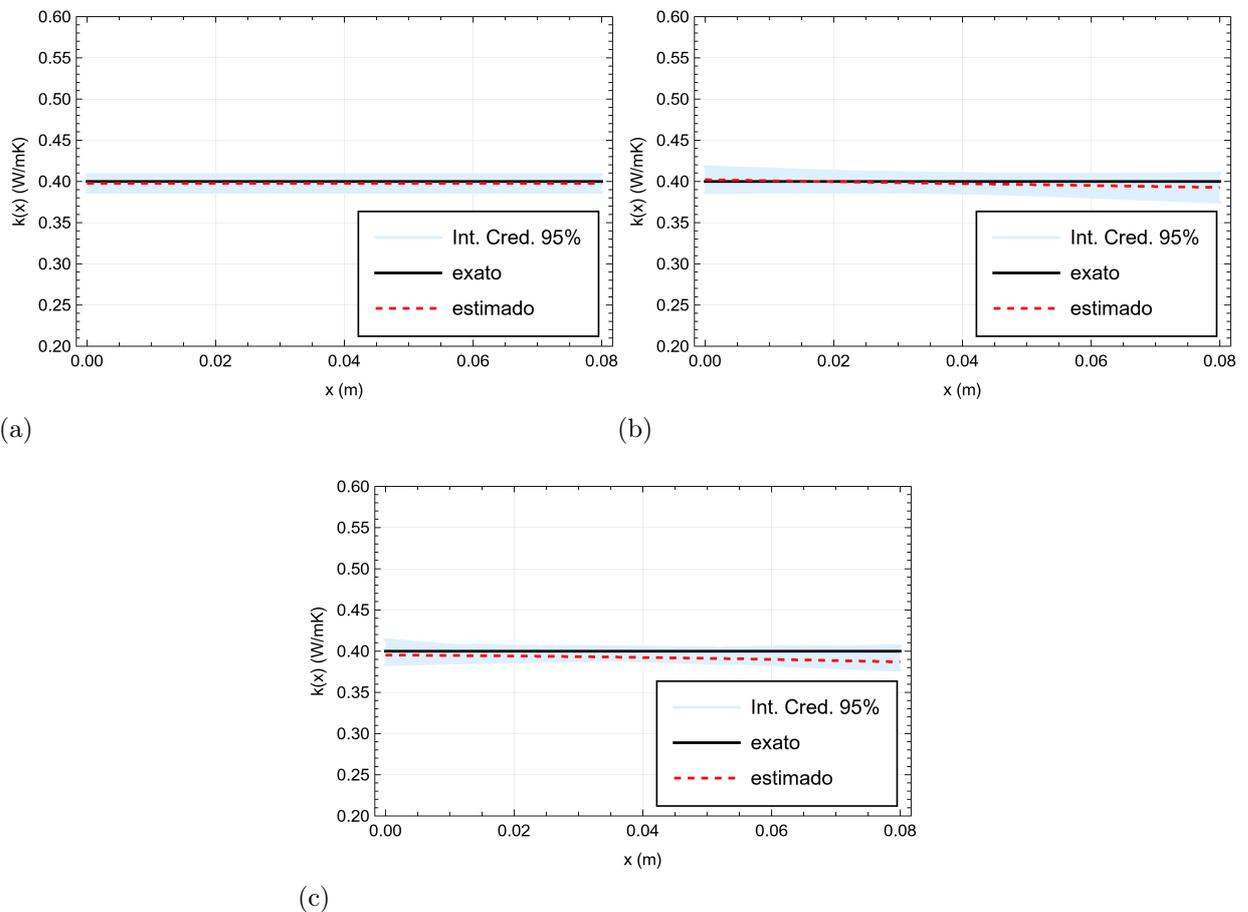
Fonte: O autor, 2024.

A Figura 5 demonstra que todos os modelos conseguiram representar o comportamento do modelo exato. Observa-se que o modelo  $\mathcal{M}_0$  descreve melhor o coeficiente  $w(x)$  exato, o que é evidenciado pela proximidade das curvas. Além disso, o intervalo de

credibilidade de 95% permanece constante, reforçando a precisão do modelo  $\mathcal{M}_0$ .

Adicionalmente, a Figura 6 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de condutividade térmica do modelo exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Assim como no caso do coeficiente de difusão térmica, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para o coeficiente de condutividade estimado de cada modelo, permitindo uma análise detalhada da precisão e da confiabilidade dos modelos aplicados na estimativa dos parâmetros térmicos.

Figura 6 - Coeficiente  $k(x)$  Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 1



Legenda: (a) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

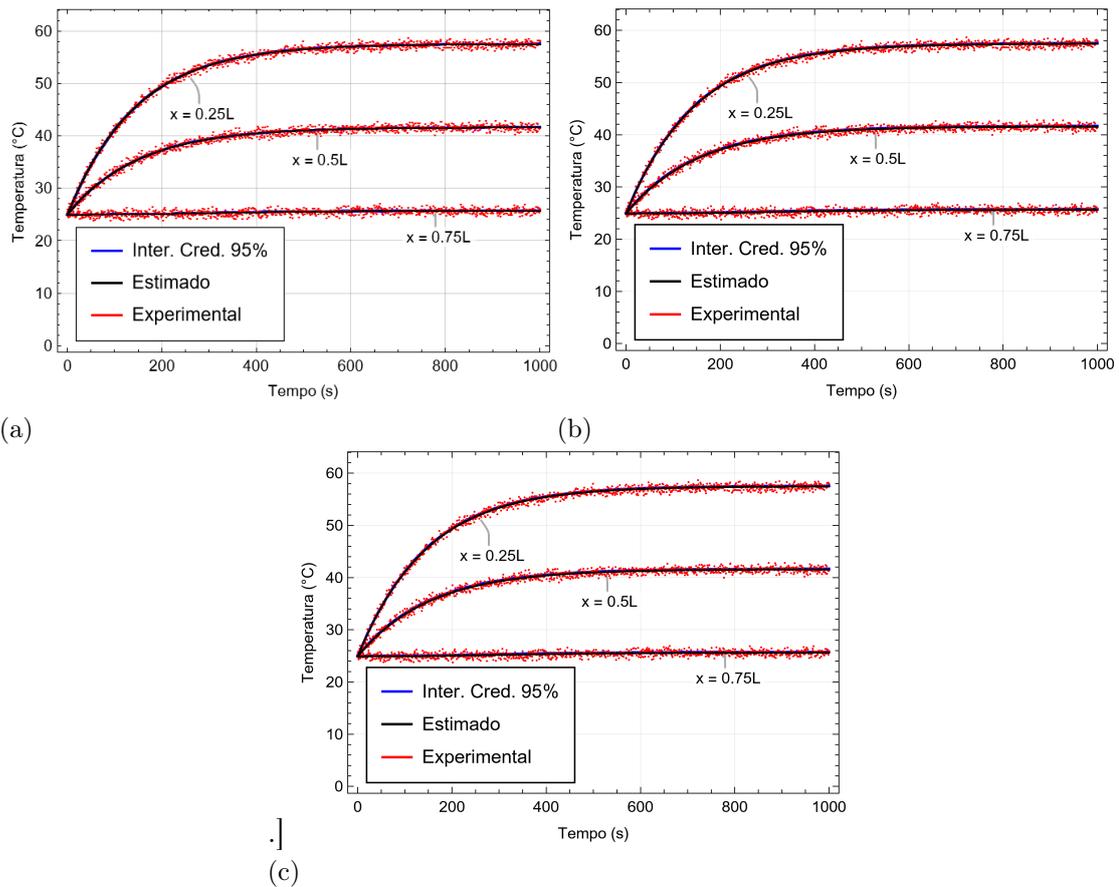
Fonte: O autor, 2024.

A Figura 6 mostra que todos os modelos conseguiram capturar o comportamento do coeficiente de condutividade térmica do modelo exato. Entre eles, o modelo  $\mathcal{M}_0$  se destaca mais uma vez por sua precisão, evidenciada pela proximidade das curvas em relação ao modelo exato. Os intervalos de credibilidade de 95% para os coeficientes estimados também são apresentados, permanecendo consistentes e reforçando a confiabilidade do modelo  $\mathcal{M}_0$ . Esses resultados indicam que, assim como no coeficiente de difusão térmica,

o modelo  $\mathcal{M}_0$  oferece uma descrição mais acurada dos parâmetros térmicos, demonstrando sua superioridade na representação dos dados experimentais sintéticos.

A Figura 7 apresenta as medidas experimentais sintéticas, para cada ponto de medição, juntamente com as respostas estimadas e os intervalos de credibilidade de 95% das respostas obtidas a partir dos modelos estimados mostrados nas Figs. 5 e 6.

Figura 7 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime permanente:  
Caso 1



Legenda: (a) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

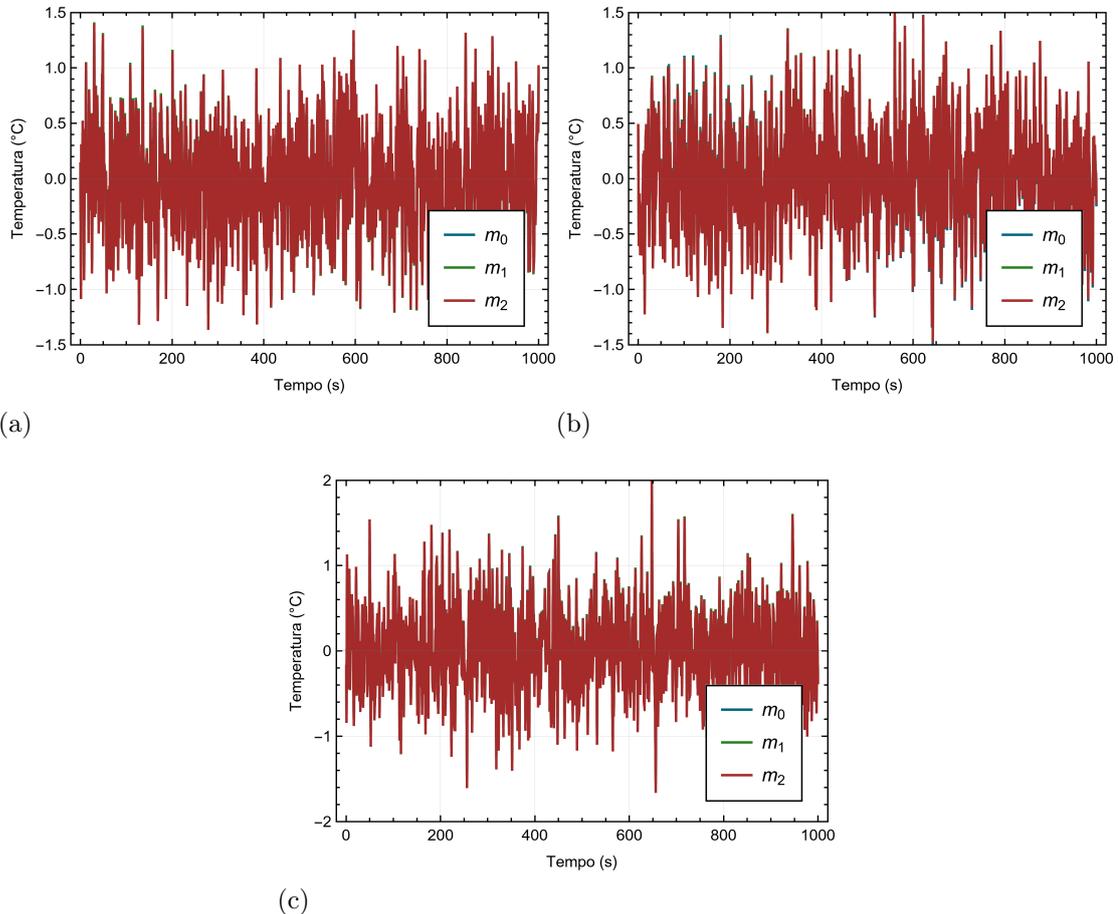
Fonte: O autor, 2024

Analisando a Fig. 7, observa-se que todos os modelos conseguiram descrever o comportamento das temperaturas experimentais sintéticas de maneira muito similar, não sendo possível discernir diferenças significativas entre os gráficos. Além disso, os intervalos de credibilidade de 95% ficaram muito apertados, falhando em englobar as medidas experimentais. Vale ressaltar que essas posições foram escolhidas por representar o comportamento das temperaturas em diferentes regiões da placa.

A Figura 7 destaca a necessidade de uma análise mais detalhada do ajuste das respostas para o conjunto completo dos dados experimentais. Com esse objetivo, a Figura

8 apresenta os resíduos de cada solução em relação aos dados experimentais, permitindo uma avaliação mais precisa da qualidade do ajuste de cada modelo.

Figura 8 - Análises residuais das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 1



Legenda: (a) Resíduos do sensor 1, (b) Resíduos do sensor 2 e (c) Resíduos do sensor 3.

Fonte: O autor, 2024.

Nesse contexto, torna-se inviável determinar qual modelo se destaca com base nos resultados obtidos, uma vez que todos demonstraram desempenhos praticamente idênticos na representação dos dados experimentais sintéticos. Diante dessa situação, a seleção da classe de modelo assume um papel crucial, tornando-se um aspecto fundamental neste trabalho. Os resultados da seleção da classe de modelo, incluindo o logaritmo da evidência, o logaritmo da função de verossimilhança média sobre a posteriori, também denominando como ajuste de dados, e o ganho de informação (a diferença entre a média da verossimilhança e logaritmo da evidência de modelo), calculado através da equação 42, são apresentados na Tabela 7, estimados por meio de simulação estocástica.

Tabela 7 - Seleção de classe de modelos: Caso 1

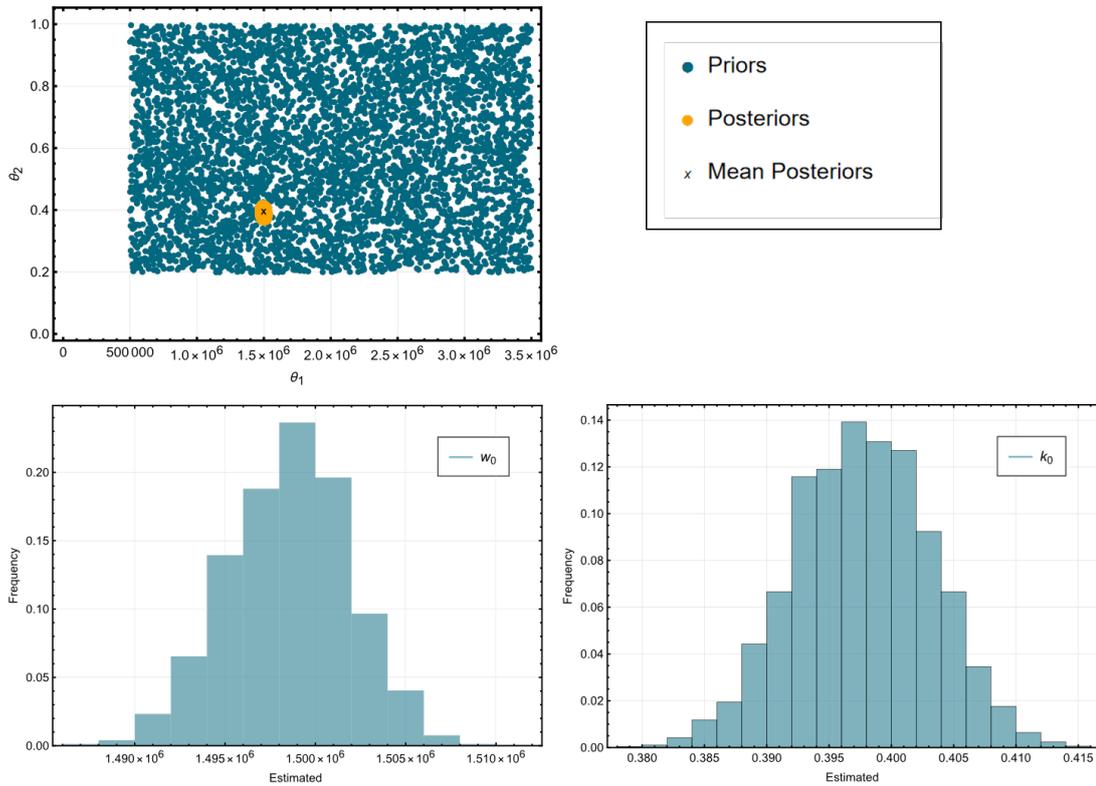
Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	ln(evidência)	Probabilidade (%)
$\mathcal{M}_0$	<b>-1445.09</b>	<b>1252.14</b>	<b>-2697.24</b>	<b>100</b>
$\mathcal{M}_1$	-1446.64	1348.82	-2795.46	0
$\mathcal{M}_2$	-1445.58	1708.92	-3154.51	0

Fonte: O autor, 2024.

A análise da Tabela 9 revela que a evidência favorece a classe de modelo  $\mathcal{M}_0$ , conforme esperado. Isso se deve ao fato de que o  $\mathcal{M}_0$  é o único modelo que não incorpora variação espacial dos parâmetros, em consonância com o modelo utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos. Embora apresente o menor ganho de informação, o  $\mathcal{M}_0$  se destaca pelo melhor ajuste dos dados, o que o torna o modelo mais plausível diante da maior evidência de modelo. Portanto,  $\mathcal{M}_0$  é a classe de modelo que apresenta maior probabilidade de descrever os dados experimentais observáveis.

A Figura 9 exibe os histogramas da distribuição posterior dos parâmetros da classe de modelo  $\mathcal{M}_0$ , acompanhados do gráfico de correlação entre os parâmetros.

Figura 9 - Histogramas e gráficos correlação entre os parâmetros



Fonte: O autor, 2024.

### 3.1.3 Caso: 2

No segundo caso, os dados experimentais sintéticos foram gerados utilizando o modelo linear, que apresenta variação espacial nos coeficientes de difusão térmica,  $w(x)$ , e de condutividade térmica,  $k(x)$ . Para resolver o problema inverso com este conjunto de dados, foram aplicados os três modelos listados na Tabela 5. Os resultados obtidos serão discutidos nesta seção.

Durante o processo de inversão, os parâmetros estimados são os componentes do vetor incerto específico de cada modelo ( $\theta$  de  $\mathcal{M}_i$ ). A Tabela 5 descreve o vetor incerto correspondente a cada modelo  $\mathcal{M}_i$ . A Tabela 8 apresenta os valores dos parâmetros estimados para os três modelos no Caso 2.

Ao analisar a Tabela 6, observa-se que todos os modelos utilizados no processo de inversão apresentaram um baixo coeficiente de variância  $\frac{\sigma}{\mu}$ , indicando alta precisão.

Tabela 8 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 2

Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$	Priori
$\mathcal{M}_0$	$w_0$	$1.30146 \times 10^6$	$[1.29492 \times 10^6, 1.30827 \times 10^6]$	0.0026193	$\mathcal{U}[0, 3.5 \times 10^6]$
	$k_0$	0.542173	$[0.532377, 0.551694]$	0.00915487	$\mathcal{U}[0, 1.2]$
$\mathcal{M}_1$	$w_1$	$1.34841 \times 10^7$	$[1.26584 \times 10^7, 1.43821 \times 10^7]$	0.0335412	$\mathcal{U}[-5 \times 10^6, 2.5 \times 10^7]$
	$w_0$	960286	$[936272, 980588]$	0.0117314	$\mathcal{U}[0, 3.5 \times 10^6]$
	$k_1$	8.72587	$[8.18105, 9.2411]$	0.0312657	$\mathcal{U}[-1.25, 10]$
	$k_0$	0.185909	$[0.161246, 0.215785]$	0.0765564	$\mathcal{U}[0, 1.2]$
$\mathcal{M}_2$	$w_2$	383899	$[280619, 641154]$	0.2888	$\mathcal{U}[-1.25 \times 10^2, 1 \times 10^6]$
	$w_1$	$1.37836 \times 10^7$	$[1.29328 \times 10^7, 1.45346 \times 10^7]$	0.0240847	$\mathcal{U}[-5 \times 10^6, 2.5 \times 10^7]$
	$w_0$	955015	$[939119, 969617]$	0.00807032	$\mathcal{U}[0, 3.5 \times 10^6]$
	$k_2$	0.476979	$[-1.34651, 7.97206]$	6.58462	$\mathcal{U}[-5, 10]$
	$k_1$	9.02448	$[8.15685, 9.19835]$	0.0269969	$\mathcal{U}[-1.25, 10]$
	$k_0$	0.161656	$[0.153007, 0.201917]$	0.0698367	$\mathcal{U}[0, 1.2]$

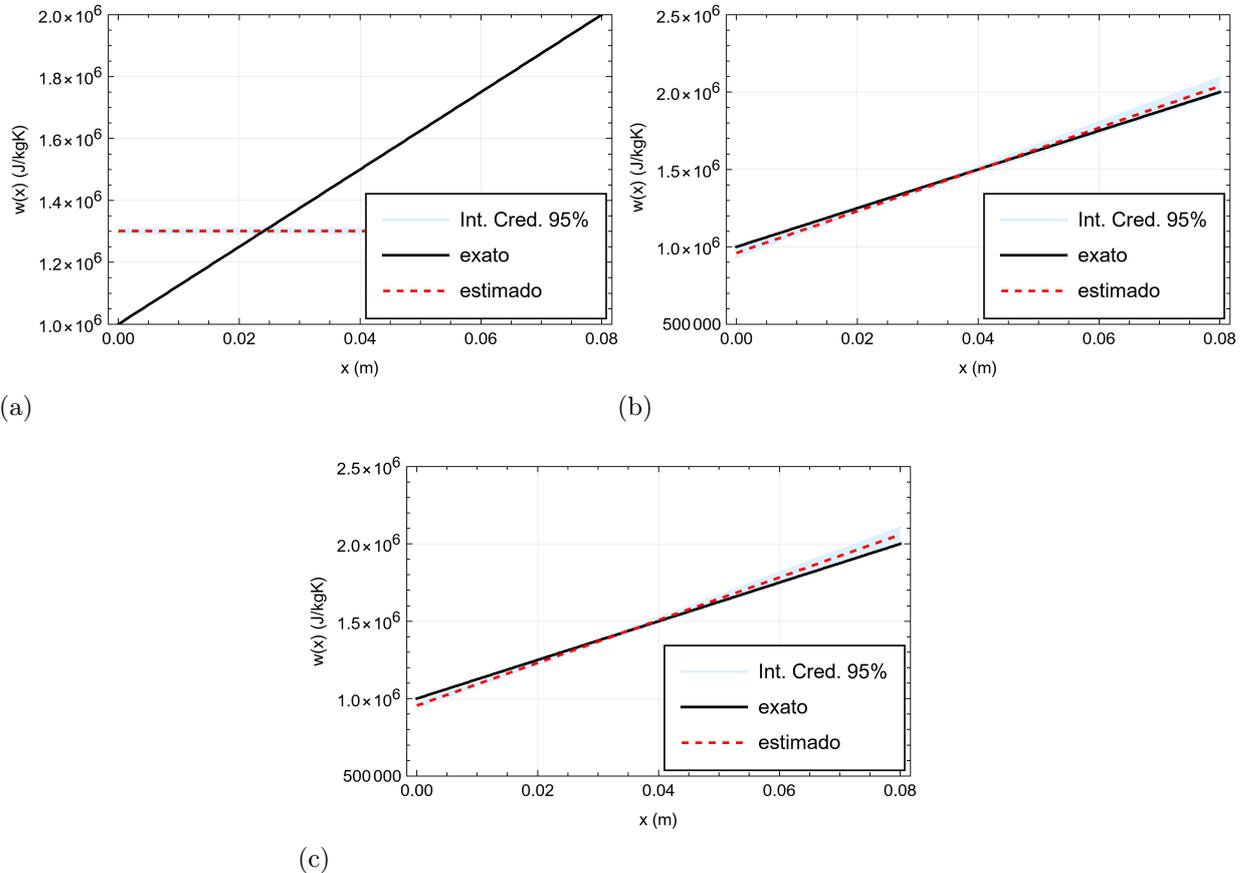
Unidade de medida para  $w_i$  é  $J/kg \cdot K$  e para  $k_i$  é  $W/m \cdot K$ .

Fonte: O autor, 2024.

O modelo  $\mathcal{M}_1$  se destaca por obter médias dos parâmetros mais próximas dos valores exatos utilizados na geração dos dados experimentais sintéticos, embora não apresente os menores coeficientes de variância. No modelo  $\mathcal{M}_2$ , o parâmetro que acompanha o termo quadrático, coeficiente angular, causa menor impacto em relação ao parâmetro que acompanha o termo linear, que regula a inclinação da curva. Isso indica que o modelo  $\mathcal{M}_2$  terá um comportamento próximo ao modelo linear utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos.

A Figura 5 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de difusão térmica exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Além disso, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para os coeficientes estimados, proporcionando uma visão clara da precisão dos modelos em relação ao comportamento esperado.

Figura 10 - Coeficiente  $w(x)$  Estimado e intervalos de credibilidade de 95%: Caso 2



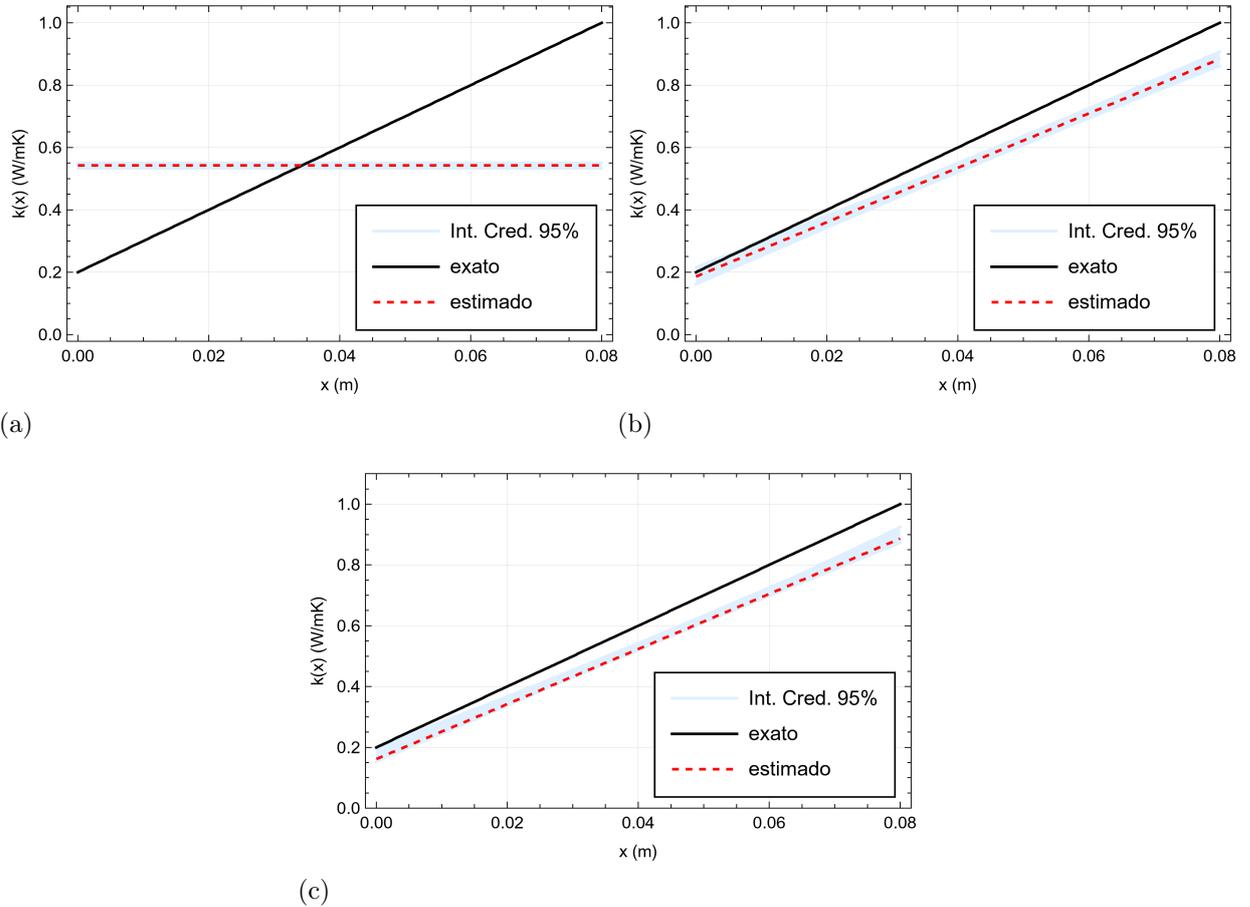
Legenda: (a) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

Fonte: O autor, 2024.

Ao analisar a Figura 10, observa-se que o modelo  $\mathcal{M}_0$  não conseguiu representar adequadamente o modelo exato. Em contraste, os modelos  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  descrevem melhor o coeficiente  $w(x)$  exato, evidenciado pela proximidade das curvas. Além disso, o intervalo de credibilidade de 95% nos dois modelos engloba a curva do parâmetro exato em todos os pontos do domínio. Esse comportamento não é observado no modelo  $\mathcal{M}_0$ , que falha em representar adequadamente o comportamento do coeficiente  $w(x)$  exato.

A Figura 11 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de condutividade térmica do modelo exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Assim como no caso do coeficiente de difusão térmica, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para o coeficiente estimado de cada modelo, permitindo uma análise detalhada da precisão e da confiabilidade dos modelos aplicados na estimativa dos parâmetros térmicos.

Figura 11 - Coeficiente  $k(x)$  Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 2



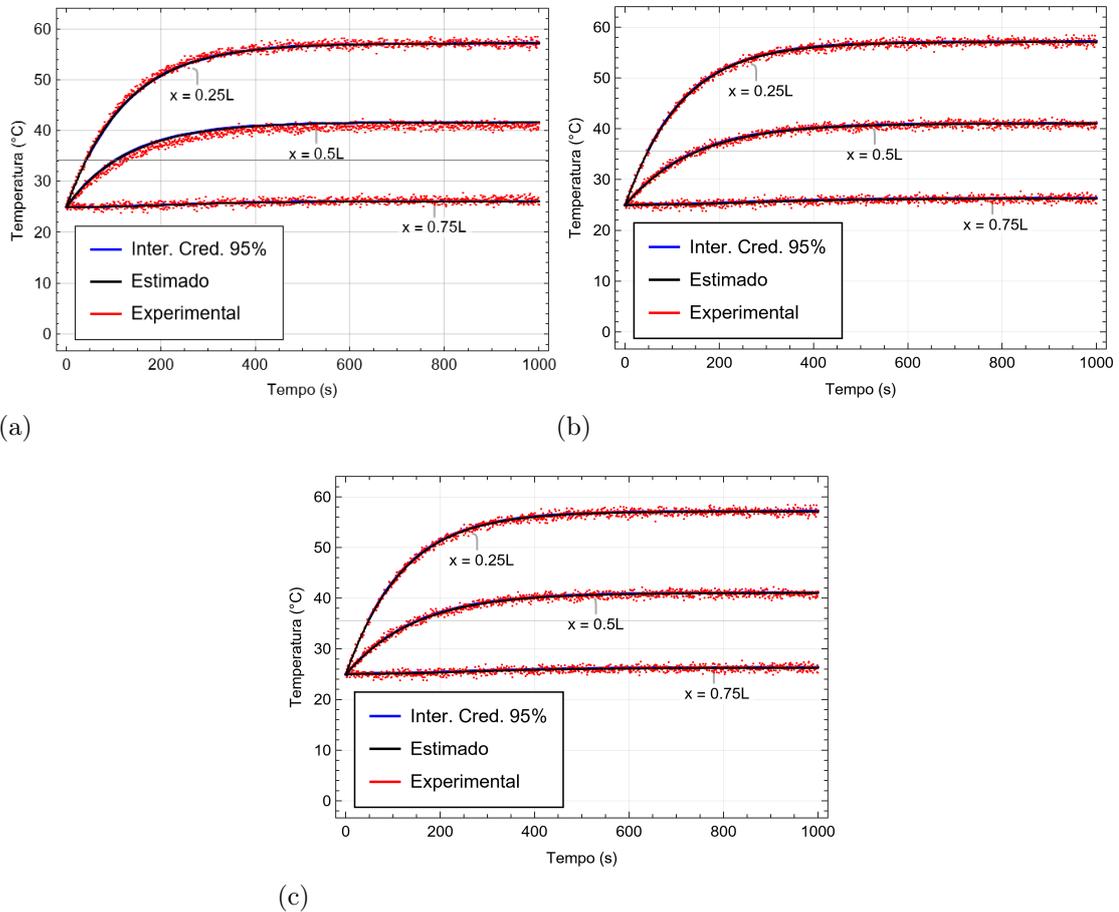
Legenda: (a) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

Fonte: O autor, 2024.

Assim como no coeficiente de difusão térmica, a Figura 11 mostra que o modelo  $\mathcal{M}_0$  não conseguiu representar adequadamente o comportamento do modelo exato. Em contraste, os modelos  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  descrevem melhor o coeficiente  $k(x)$  exato, evidenciado pela proximidade das curvas. No entanto, diferentemente do coeficiente  $w(x)$ , para o coeficiente  $k(x)$ , o intervalo de credibilidade de 95% não engloba a curva do parâmetro exato em todos os pontos. A dificuldade do modelo  $\mathcal{M}_0$  em representar bem o comportamento do coeficiente  $k(x)$  exato é notória, resultando em um intervalo de credibilidade que também não engloba o modelo exato.

A Figura 12 apresenta as medidas experimentais sintéticas juntamente com as respostas estimadas e os intervalos de credibilidade das respostas obtidas a partir dos modelos estimados mostrados nas Figuras 10 e 11. Também expõe os pontos de medição utilizados para realizar a análise e gerar os gráficos, que foram, respectivamente, 25%, 50% e 75% do comprimento da placa.

Figura 12 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime permanente:  
Caso 2



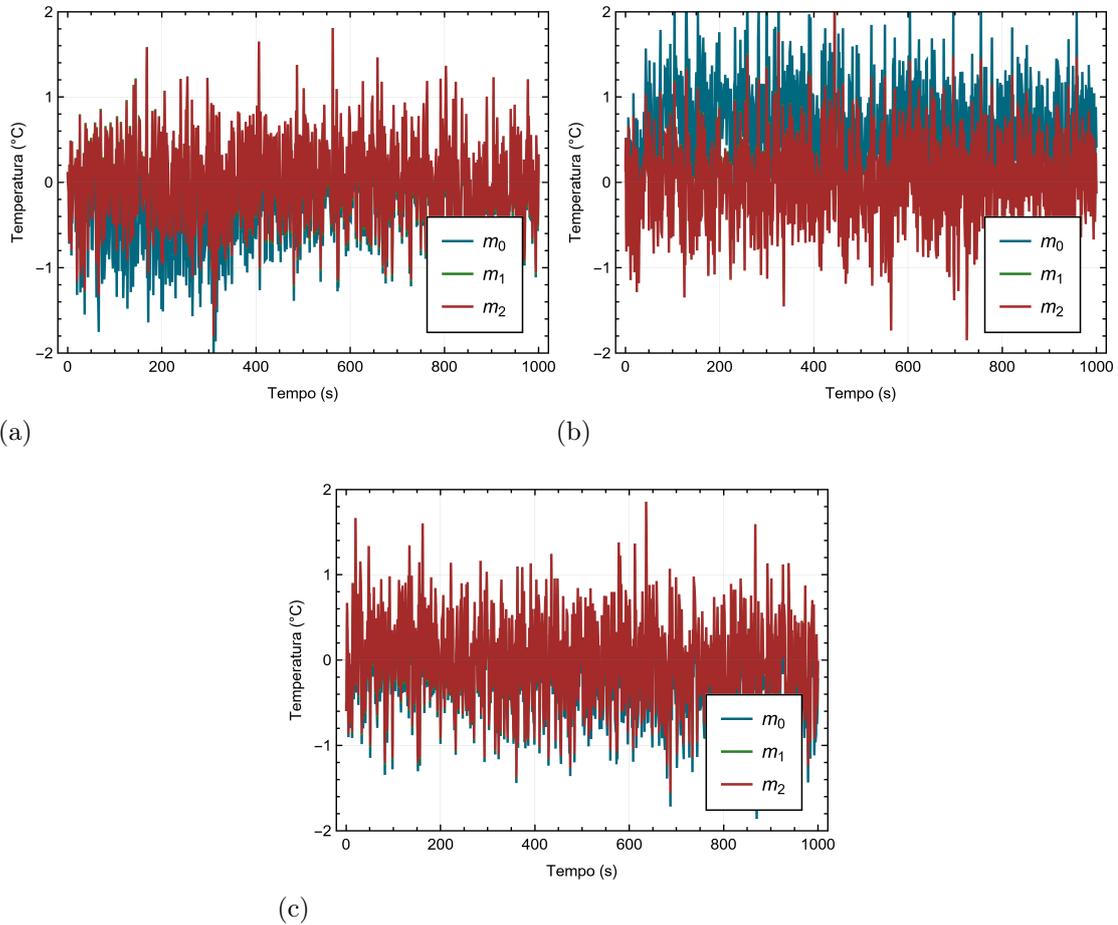
Legenda: (a) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

Fonte: O autor, 2024

Analisando a Figura 12, observa-se que todos os modelos conseguiram descrever o comportamento das temperaturas experimentais sintéticas de maneira muito similar, não sendo possível discernir diferenças significativas entre os gráficos, exceto pelo modelo  $\mathcal{M}_0$  que apresenta uma pequena diferença na curva de 50% do domínio  $L$ . Além disso, os intervalos de credibilidade de 95% ficaram muito apertados, falhando em englobar as medidas experimentais. Vale ressaltar que essas posições foram escolhidas por representar o comportamento das temperaturas em diferentes regiões da placa.

A Figura 12 destaca a necessidade de uma análise mais detalhada do ajuste das respostas para o conjunto completo dos dados experimentais. Com esse objetivo, a Figura 13 apresenta os resíduos de cada solução em relação aos dados experimentais.

Figura 13 - Análises residuais das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 2



Legenda: (a) Resíduos do sensor 1, (b) Resíduos do sensor 2 e (c) Resíduos do sensor 3.

Fonte: O autor, 2024.

Nesse contexto, identificar um modelo destacado com base nos resultados obtidos se mostra desafiador, uma vez que os modelos  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  apresentaram desempenhos praticamente equivalentes na representação dos dados experimentais sintéticos. Assim como no caso 1, a seleção da classe de modelo assume uma importância crucial. Os resultados da seleção da classe de modelo, contendo o logaritmo da evidência, o logaritmo da função de verossimilhança média sobre a posteriori, ajuste de dados, e o ganho de informação (a diferença entre a média da verossimilhança e logaritmo da evidência de modelo), calculado através da equação Eq. 42, são detalhados na Tabela 9.

Tabela 9 - Seleção de classe de modelos: Caso 2

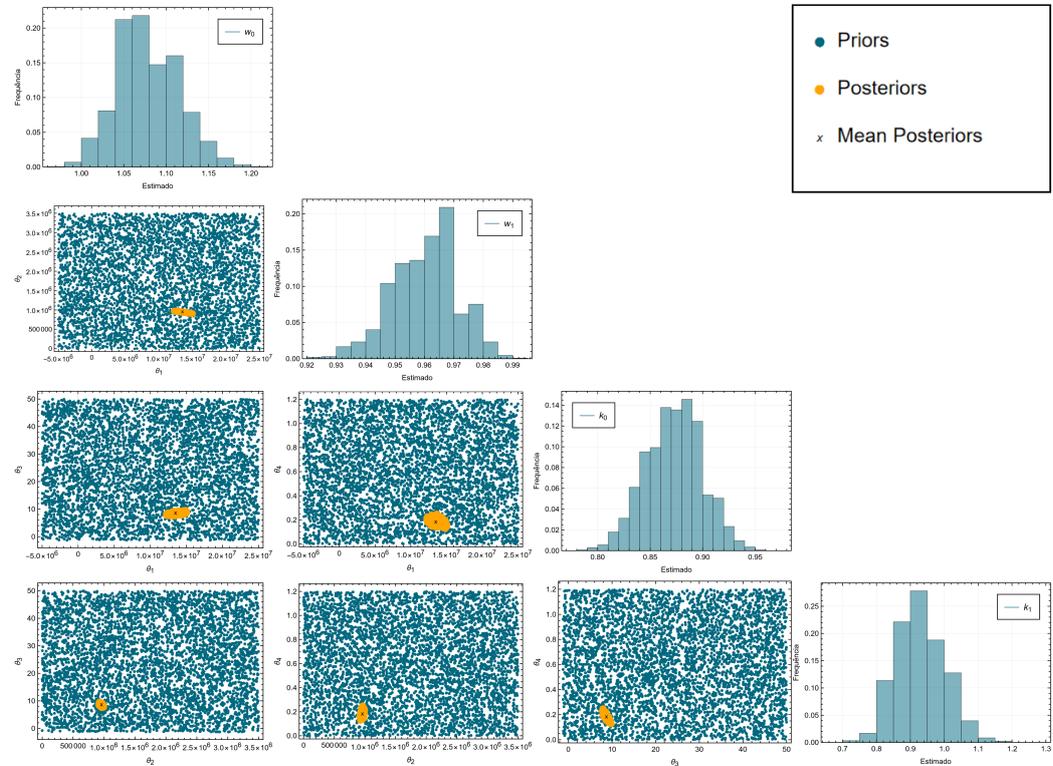
Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	ln(evidência)	Probabilidade (%)
$\mathcal{M}_0$	-2640.78	2010.15	-5446.34	0
$\mathcal{M}_1$	<b>-1552.54</b>	<b>1028.99</b>	<b>-2581.52</b>	<b>100</b>
$\mathcal{M}_2$	-1552.33	1290.97	-2843.30	0

Fonte: O autor, 2024.

A análise da Tabela 9 revela que a evidência favorece a classe de modelo  $\mathcal{M}_1$ , se comportando conforme a expectativa inicial. Esse resultado se deve ao fato de que o modelo  $\mathcal{M}_1$  incorpora uma variação espacial mais simples dos parâmetros, alinhada com o modelo utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos. Além disso, apresenta um ganho de informação menor em comparação com outros modelos, o modelo  $\mathcal{M}_1$  se destaca pelo seu melhor ajuste aos dados, tornando-o o modelo mais plausível diante da evidência de modelo. Portanto, o modelo  $\mathcal{M}_1$  é a classe de modelo que possui maior probabilidade de descrever os dados experimentais observáveis.

A Figura 14 exibe os histogramas da distribuição a posterior dos parâmetros da classe de modelo  $\mathcal{M}_1$ , acompanhados dos gráficos de correlações entre os parâmetros. Essa análise mais detalhada permite uma melhor compreensão da distribuição dos parâmetros e das relações entre eles.

Figura 14 - Histogramas e gráfico de correlação entre os parâmetros



Fonte: O autor, 2024.

### 3.1.4 Caso: 3

No terceiro caso, os dados experimentais sintéticos foram gerados utilizando o modelo quadrático, que apresenta variação espacial nos coeficientes de difusão térmica,  $w(x)$ , e de condutividade térmica,  $k(x)$ . Para resolver o problema inverso com este conjunto de dados, foram aplicados os três modelos listados na Tabela 5. Os resultados obtidos serão discutidos nesta seção.

Durante o processo de inversão, os parâmetros estimados são os componentes do vetor incerto específico de cada modelo ( $\theta$  de  $\mathcal{M}_i$ ). A Tabela 5 descreve o vetor incerto correspondente a cada modelo  $\mathcal{M}_i$ . A Tabela 10 apresenta os valores dos parâmetros estimados para os três modelos no Caso 3.

Ao analisar a Tabela 10, verifica-se que todos os modelos utilizados no processo

Tabela 10 - Resultados da estimação do vetor de parâmetros incertos: Caso 3

Modelo	Parâmetro	Média	IC (95%)	$\frac{\sigma}{\mu}$	Priori
$\mathcal{M}_0$	$w_0$	$1.14948 \times 10^6$	$[1.14307 \times 10^6, 1.15568 \times 10^6]$	0.00279611	$\mathcal{U}[0, 5 \times 10^6]$
	$k_0$	0.749466	$[0.739382, 0.759893]$	0.00704786	$\mathcal{U}[0, 2]$
$\mathcal{M}_1$	$w_1$	$4.93198 \times 10^6$	$[4.73121 \times 10^6, 4.99723 \times 10^6]$	0.0149449	$\mathcal{U}[-50000, 5 \times 10^6]$
	$w_0$	$1.02313 \times 10^6$	$[1.01867 \times 10^6, 1.02815 \times 10^6]$	0.00269679	$\mathcal{U}[10000, 5 \times 10^6]$
	$k_1$	6.32936	$[6.1859, 6.39855]$	0.00962681	$\mathcal{U}[-1.6, 6.4]$
	$k_0$	0.501045	$[0.484998, 0.513318]$	0.015396	$\mathcal{U}[0.1, 1.6]$
$\mathcal{M}_2$	$w_2$	$8.12051 \times 10^7$	$[5.44011 \times 10^7, 1.18147 \times 10^8]$	0.350344	$\mathcal{U}[-2 \times 10^2, 3 \times 10^8]$
	$w_1$	$3.25232 \times 10^6$	$[1.15595 \times 10^6, 4.66416 \times 10^6]$	0.469017	$\mathcal{U}[-5 \times 10^2, 5 \times 10^6]$
	$w_0$	$1.00104 \times 10^6$	$[987803, 1.02603 \times 10^6]$	0.0160734	$\mathcal{U}[1 \times 10^4, 2 \times 10^6]$
	$k_2$	-42.1722	$[-88.6439, -25.9165]$	-0.572626	$\mathcal{U}[-200, 100]$
	$k_1$	12.3902	$[11.1281, 16.8887]$	0.160248	$\mathcal{U}[10, 30]$
	$k_1$	0.320608	$[0.202913, 0.36521]$	0.149397	$\mathcal{U}[0, 1]$

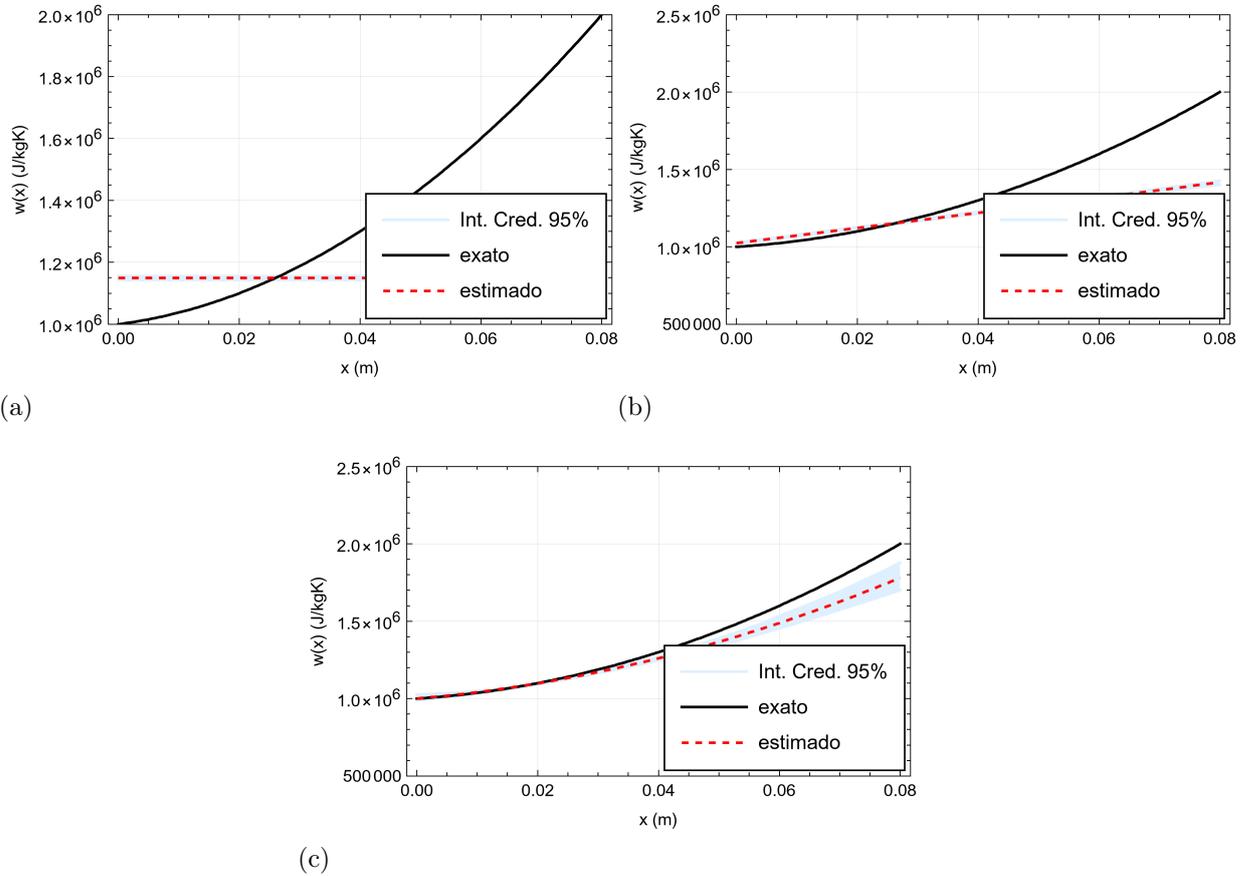
Unidade de medida para  $w_i$  é  $J/kg \cdot K$  e para  $k_i$  é  $W/m \cdot K$ .

Fonte: O autor, 2024.

de inversão apresentaram um baixo coeficiente de variância  $\frac{\sigma}{\mu}$ , indicando alta precisão nas estimativas. Apesar das discrepâncias observadas, o modelo  $\mathcal{M}_2$  se destaca por obter médias dos parâmetros mais próximas dos valores exatos utilizados na geração dos dados experimentais sintéticos, mesmo sem apresentar os menores coeficientes de variância. No entanto, no modelo  $\mathcal{M}_2$ , o parâmetro que acompanha o termo quadrático, o coeficiente angular, apresentou os maiores erros em comparação com os parâmetros exatos. Isso sugere que o modelo  $\mathcal{M}_2$  terá maior dificuldade de representar o comportamento do modelo utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos.

A Figura 15 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de difusão térmica exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Além disso, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para os coeficientes estimados, proporcionando uma visão clara da precisão dos modelos em relação ao comportamento esperado.

Figura 15 - Coeficiente  $w(x)$  Estimado e intervalos de credibilidade de 95%: Caso 3



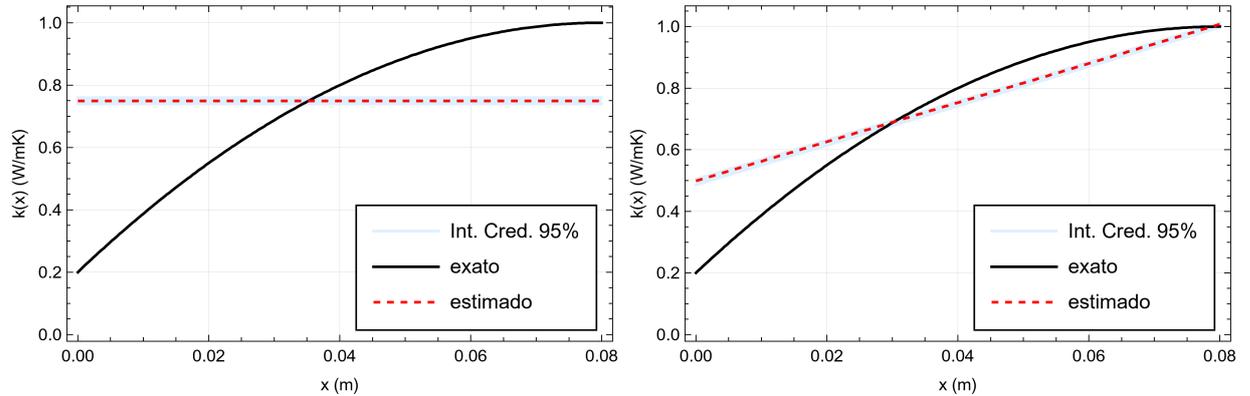
Legenda: (a) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $w(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

Fonte: O autor, 2024.

Ao analisar a Figura 15, constata-se que tanto o modelo  $\mathcal{M}_0$  quanto o modelo  $\mathcal{M}_1$  não conseguiram representar adequadamente o comportamento do modelo exato. Por outro lado, observa-se que o modelo  $\mathcal{M}_2$  descreve de forma mais precisa o comportamento do coeficiente  $w(x)$  exato, conforme evidenciado pela proximidade das curvas. Além disso, é importante notar que o intervalo de credibilidade de 95% engloba a curva do parâmetro exato para todos os pontos até a metade do domínio. Contudo, a partir de  $x = 0.04$ , torna-se evidente a discrepância entre as curvas.

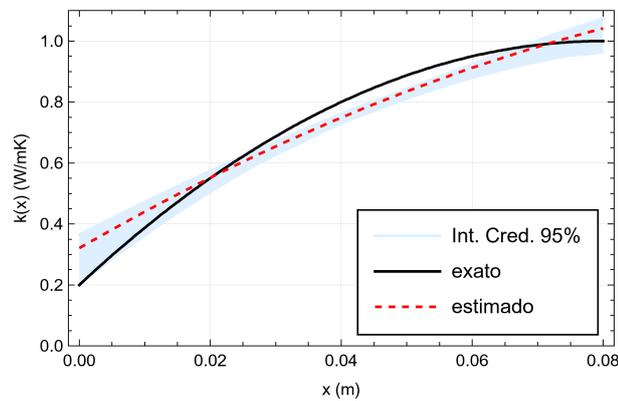
A Figura 16 ilustra o comportamento funcional do coeficiente de condutividade térmica do modelo exato comparado aos modelos  $\mathcal{M}_0$ ,  $\mathcal{M}_1$  e  $\mathcal{M}_2$  utilizados no processo de inversão. Assim como no coeficiente de difusão térmica, são apresentados os intervalos de credibilidade de 95% para o coeficiente estimado de cada modelo, permitindo uma análise detalhada da precisão e da confiabilidade dos modelos aplicados na estimativa dos parâmetros térmicos.

Figura 16 - Coeficiente  $k(x)$  Estimado e intervalo de credibilidade de 95%: Caso 3



(a)

(b)



(c)

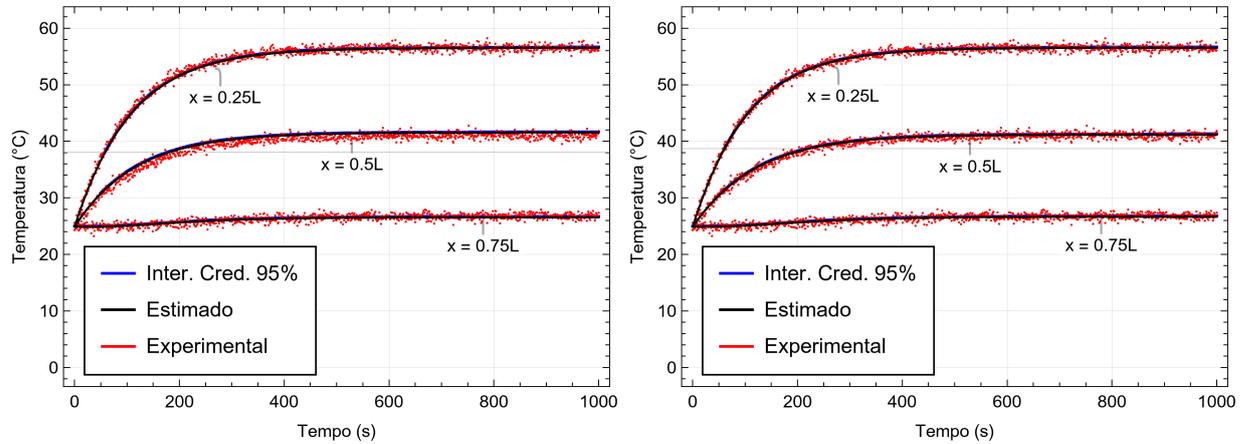
Legenda: (a) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Coeficiente  $k(x)$  Estimado - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

Fonte: O autor, 2024.

Assim como no coeficiente de difusão térmica, a Figura 16 mostra que os modelos  $\mathcal{M}_0$  e  $\mathcal{M}_1$  não conseguiram representar adequadamente o comportamento do modelo exato. Observa-se que o modelo  $\mathcal{M}_2$  descreve melhor o coeficiente  $k(x)$  exato, evidenciado pela proximidade das curvas. Como no coeficiente  $w(x)$ , para o coeficiente  $k(x)$ , o intervalo de credibilidade de 95% não engloba completamente a curva do parâmetro exato.

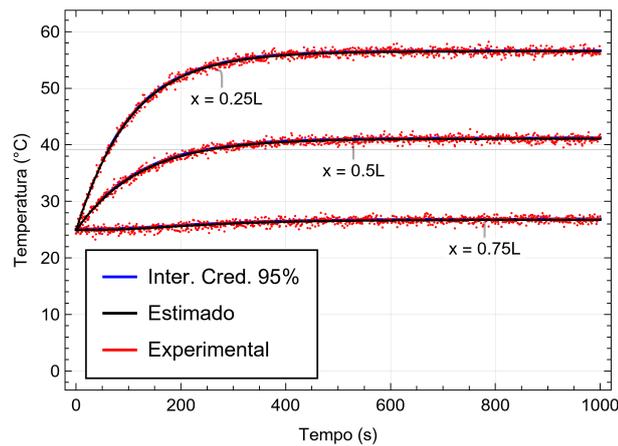
A Figura 16 apresenta as medidas experimentais sintéticas juntamente com as respostas estimadas e os intervalos de credibilidade das respostas obtidas a partir dos modelos estimados mostrados nas Figuras 15 e 16.

Figura 16 - Respostas estimadas e intervalos de credibilidade (95%) em regime estacionário:  
Caso 3



(a)

(b)



(c)

Legenda: (a) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_0$ , (b) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_1$  e (c) Resposta Estimada - Modelo  $\mathcal{M}_2$ .

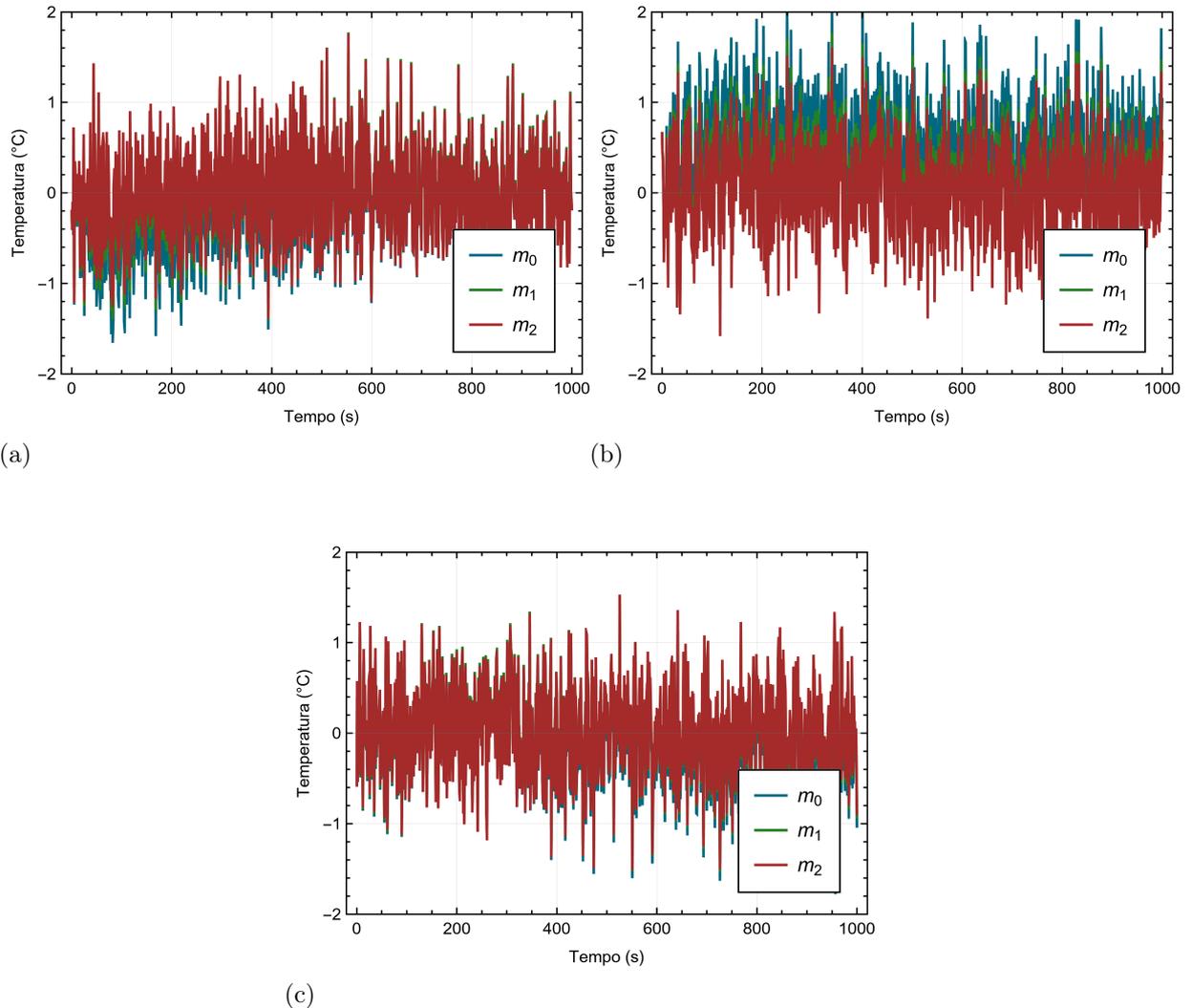
Fonte: O autor, 2024

Analisando a Figura 16, observa-se que todos os modelos conseguiram descrever o comportamento das temperaturas experimentais sintéticas de maneira muito similar, não sendo possível discernir diferenças significativas entre os gráficos, exceto pelo modelo  $\mathcal{M}_0$  que apresenta uma pequena discrepância na curva de 50% do domínio  $L$ , isso ocorre pelo modelo não ter variação espacial e ser o ponto de transição entre as regiões com fluxo e sem fluxo de calor. Além disso, os intervalos de credibilidade de 95% ficaram muito apertados, dessa forma, não englobou as medições experimentais. Vale ressaltar que essas posições foram escolhidas por representar o comportamento das temperaturas em diferentes regiões da placa.

A Figura 16 destaca a necessidade de uma análise mais detalhada do ajuste das

respostas para o conjunto completo dos dados experimentais. Com esse objetivo, a Figura 16 apresenta os resíduos de cada solução em relação aos dados experimentais.

Figura 16 - Análise residual das soluções dos modelos em relação aos dados observados: Caso 3



Legenda: (a) Resíduos do sensor 1, (b) Resíduos do sensor 2 e (c) Resíduos do sensor 3.

Fonte: O autor, 2024.

Nessas circunstâncias, identificar um modelo com maior aderência com base nos resultados obtidos se mostra desafiador. Embora o modelo  $\mathcal{M}_1$  não consiga reproduzir fielmente o comportamento dos coeficientes de condutividade térmica e difusão térmica do modelo usado para gerar os dados experimentais sintéticos, ele ainda apresenta uma solução muito similar ao modelo  $\mathcal{M}_2$ , que consegue reproduzir com maior acurácia esses coeficientes. Assim como nos casos 1 e 2, a seleção da classe de modelo assume papel crucial nesse estudo. Os resultados da seleção da classe de modelo, contendo o logaritmo da evidência, o logaritmo da função de verossimilhança média sobre a posteriori, ajuste de dados, e o ganho de informação (a diferença entre a média da verossimilhança e logaritmo

da evidência de modelo), calculado através da equação Eq. 42, são detalhados na Tabela 11.

Tabela 11 - Seleção de classe de modelos: Caso 3

Modelo	Ajuste de dados	Info. ganha	ln(evidência)	Probabilidade (%)
$\mathcal{M}_0$	-2212.43	2306.39	-4518.83	0
$\mathcal{M}_1$	-1581.82	1291.93	-2873.75	0
$\mathcal{M}_2$	<b>-1503.50</b>	<b>757.35</b>	<b>-2260.85</b>	<b>100</b>

Fonte: O autor, 2024.

De maneira semelhante ao caso 2, a análise da Tabela 11 destaca a classe de modelo com o melhor ajuste, evidenciada pela maior probabilidade associada ao comportamento funcional dos coeficientes comparados aos dados experimentais. A classe de modelo  $\mathcal{M}_2$ , considerada a mais plausível, apresenta o menor ganho de informação, como era esperado. Esse resultado se deve ao fato de que o modelo  $\mathcal{M}_2$  incorpora uma variação espacial dos parâmetros, concordando com o modelo utilizado para gerar os dados experimentais sintéticos. Portanto, o modelo  $\mathcal{M}_2$  é o que possui maior probabilidade de descrever os dados experimentais observáveis.

Embora nenhum dos modelos utilizados no processo de estimação de parâmetros tenha representado os coeficientes de maneira totalmente acurada, o método TMCMC cumpre seu papel na seleção de modelo, ao identificar o modelo com maior probabilidade de descrever os dados experimentais. A eficácia do TMCMC é evidenciada por sua capacidade de selecionar o modelo mais adequado, mesmo em cenários complexos com variabilidade espacial dos parâmetros. Essa robustez e precisão tornam o TMCMC uma ferramenta valiosa no âmbito de seleção de classe de modelo.

A Figura 15, apresentada no apêndice A, exibe os histogramas da distribuição a posterior dos parâmetros da classe de modelo  $\mathcal{M}_2$ , acompanhados do gráfico de correlação entre os parâmetros. Essa análise mais detalhada permite uma melhor compreensão da distribuição dos parâmetros e das relações entre eles.

## CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

O estudo realizado neste trabalho focou na identificação de parâmetros em equações diferenciais parciais que modelam a transferência de calor em placas planas, utilizando uma modelagem por meio de *Lumped Analysis*, com ênfase em problemas de condução de calor. O primeiro objetivo foi implementar e validar a Técnica de Transformada Integral Generalizada para solucionar esse problema, além de verificar a eficácia da metodologia proposta para a estimativa de propriedades termo físicas e a seleção de modelos bayesiana.

A abordagem do trabalho foi dividida em três etapas principais. Na primeira etapa, a GITT foi aplicada para resolver problema de condução de calor sob três cenários distintos de coeficientes de condutividade térmica e capacidade térmica espacialmente variáveis. A solução obtida foi comparada com a solução fornecida pelo *solver* numérico, *NDSolve*, da plataforma *Wolfram Mathematica*, confirmando a precisão e robustez da metodologia adotada. Esta etapa demonstrou que a GITT é uma ferramenta poderosa para obter-se a solução de problemas de transferência de calor, permitindo sua aplicação mesmo em condições complexas e variáveis.

Na segunda etapa, foram utilizados dados experimentais sintéticos gerados através da solução do *NDSolve*, acrescidos de ruído gaussiano, para avaliar a metodologia proposta. Verificou-se que a abordagem baseada em inferência bayesiana, combinada com a GITT e o processo de Monte Carlo com cadeia de Markov Transicional, é eficaz na resolução de problemas inversos para a estimativa de propriedades termo físicas em problemas de transferência de calor. Mesmo utilizando métodos distintos para obter os dados experimentais e solucionar o problema inverso, visando reduzir o "crime inverso", este processo mostrou-se eficiente e preciso, fornecendo estimativas confiáveis dos parâmetros térmicos, permitindo quantificar o nível de incerteza. Esta etapa evidenciou a robustez da metodologia em lidar com dados ruidosos e a capacidade de gerar estimativas precisas em condições adversas.

Finalmente, na terceira etapa, foi realizada a seleção de modelos bayesiana utilizando a evidência de modelo fornecida pelo TMCMC. Esta técnica foi aplicada aos casos analisados na etapa anterior, demonstrando sua capacidade de identificar o modelo mais adequado entre os cenários propostos. A abordagem mostrou-se uma ferramenta robusta e eficiente para a seleção de modelos e estimação de parâmetros em problemas de condução de calor, mesmo quando havia diferenças entre os modelos utilizados para gerar os dados experimentais sintéticos e os utilizados no processo de inversão. Esta etapa comprovou que a metodologia não só é eficaz em identificar o modelo mais plausível, mas também consegue discriminar entre diferentes modelos com base em dados experimentais.

Os resultados obtidos ao longo do estudo confirmam a eficiência da metodologia proposta para a seleção de modelos bayesiana, evidenciando sua eficácia em diversos

casos de estudo. Em todos os casos analisados, o modelo mais plausível foi corretamente identificado, demonstrando a capacidade da técnica em lidar com problemas complexos de transferência de calor. Além disso, a abordagem proposta mostrou-se versátil e robusta, podendo ser aplicada a uma ampla gama de problemas práticos na engenharia térmica. A metodologia desenvolvida nesta dissertação representa uma contribuição significativa para a área de transferência de calor, oferecendo novas ferramentas para a solução e análise de processos térmicos.

Um próximo passo deste trabalho consiste em aplicar as técnicas desenvolvidas utilizando dados experimentais obtidos por meio de ensaios reais de medições não destrutivos como medições por câmera infravermelho, sendo uma etapa fundamental para validar a metodologia estudada.

## REFERÊNCIAS

- ABREU, L. A. et al. Thermography detection of contact failures in double layered materials using the reciprocity functional approach. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier BV, v. 100, p. 1173–1178, maio 2016. ISSN 1359-4311.
- ABREU, L. A. et al. Thermography detection of contact failures in double layered materials using the reciprocity functional approach. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier, v. 100, p. 1173–1178, 2016.
- ABREU, L. A. D. S. *Abordagem Bayesiana para Identificação de Falhas em Compósitos Laminados Através da Transferência de Calor*. 2014, 138 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.
- ABREU, L. A. da S. et al. Estimativa de fluxo de calor bidimensional com variação temporal empregando o método de monte carlo com cadeias de markov. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 6, n. 1, 2018.
- ANDRADE, G. J. A. D. *Problema Inverso de Estimativa de Velocidade pela Resposta Térmica de Sondas de Pitot sob Condição de Formação de Gelo*. 2014, 110 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) — Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2014.
- BARBOSA, H. A. et al. Simulação monte carlo e algoritmos mcmc: Estudo comparativo e simulações com foco na média a posteriori. In: MARINHA DO BRASIL. *Anais do Simpósio de pesquisa operacional e logística da marinha*. Rio de Janeiro, 2010.
- BECK, J. L.; AU, S.-K. Bayesian updating of structural models and reliability using markov chain monte carlo simulation. *Journal of engineering mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 128, n. 4, p. 380–391, 2002.
- BECK, J. L.; YUEN, K.-V. Model selection using response measurements: Bayesian probabilistic approach. *Journal of Engineering Mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 130, n. 2, p. 192–203, 2004.
- BRANDI, A. C. *Desenvolvimento de uma Técnica Não Intrusiva de Medição do Coeficiente de Convecção: Solução do Problema Térmico Inverso*. 2010, 145 f. p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) — Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2010.
- CAO, N.; LUO, X.; TANG, H. A bayesian model to solve a two-dimensional inverse heat transfer problem of gas turbine discs. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier, p. 118762, 2022.
- CARDOSO, R. D. S. et al. Application of approximate bayesian computational for estimate parameter and selection model in dynamic of hiv. *Conjecturas*, Uniao Atlantica de Pesquisadores, v. 22, n. 2, p. 1848–1866, mar. 2022. ISSN 1657-5830.

- CASSOL, M.; WORTMANN, S.; RIZZA, U. Analytic modeling of two-dimensional transient atmospheric pollutant dispersion by double gitt and laplace transform techniques. *Environmental Modelling & Software*, Elsevier, v. 24, n. 1, p. 144–151, 2009.
- CHING, J.; CHEN, Y.-C. Transitional markov chain monte carlo method for bayesian model updating, model class selection, and model averaging. *Journal of engineering mechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 133, n. 7, p. 816–832, 2007.
- CHING, J.; MUTO, M.; BECK, J. L. Bayesian linear structural model updating using gibbs sampler with modal data. In: MILLPRESS. *Proceedings of the 9th International Conference on Structural Safety and Reliability*. [S.l.], 2005. p. 2609–2616.
- CHING, J.; WANG, J.-S. Application of the transitional markov chain monte carlo algorithm to probabilistic site characterization. *Engineering Geology*, Elsevier, v. 203, p. 151–167, 2016.
- COTTA, R. M. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. [S.l.]: CRC Press, 1993.
- COTTA, R. M.; KNUPP, D. C.; NAVEIRA-COTTA, C. P. *Analytical heat and fluid flow in microchannels and microsystems*. [S.l.]: Springer, 2016. v. 164.
- COTTA, R. M. et al. The unified integral transforms (unit) algorithm with total and partial transformation. *Computational Thermal Sciences: An International Journal*, Begel House Inc., v. 6, n. 6, 2014.
- COTTA, R. M.; KNUPP, D. C.; QUARESMA, J. N. N. Analytical methods in heat transfer. *Handbook of thermal science and engineering*, Springer International Publishing, 2017.
- COTTA, R. M.; MIKHAILOV, M. D. *Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms and Symbolic Computation*. First. [S.l.]: John Wiley Sons, 1997.
- GULL, S. F. Bayesian inductive inference and maximum entropy. In: *Maximum-entropy and bayesian methods in science and engineering: foundations*. [S.l.]: Springer, 1988. p. 53–74.
- INCROPERA, F. P. et al. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, 4a Edição*. [S.l.: s.n.], 1996.
- KAIPIO, J.; SOMERSALO, E. *Statistical and computational inverse problems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006. v. 160.
- KAIPIO, 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.
- KAIPIO, J. P.; SOMERSALO, E. Statistical inversion theory. *Statistical and computational inverse problems*, Springer, p. 49–114, 2005.
- KNUPP, D. C. Integral transform technique for the direct identification of thermal conductivity and thermal capacity in heterogeneous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier BV, v. 171, p. 121120, jun. 2021. ISSN 0017-9310.

- KNUPP, D. C. et al. Transient conjugated heat transfer in microchannels: Integral transforms with single domain formulation. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier BV, v. 88, p. 248–257, fev. 2015. ISSN 1290-0729.
- KNUPP, D. C. et al. Space-variable thermophysical properties identification in nanocomposites via integral transforms, bayesian inference and infrared thermography. *Inverse Problems in Science and Engineering*, Informa UK Limited, v. 20, n. 5, p. 609–637, jun. 2012. ISSN 1741-5985.
- KNUPP, D. C.; NAVEIRA-COTTA, C. P.; COTTA, R. M. Conjugated convection-conduction analysis in microchannels with axial diffusion effects and a single domain formulation. *Journal of heat transfer*, American Society of Mechanical Engineers, v. 135, n. 9, p. 091401, 2013.
- KNUPP, D. C. et al. Experimental identification of thermophysical properties in heterogeneous materials with integral transformation of temperature measurements from infrared thermography. *Experimental Heat Transfer*, Informa UK Limited, v. 26, n. 1, p. 1–25, jan. 2013. ISSN 1521-0480.
- LIU, S. et al. Thermal performance evaluation of a distributed regenerative cooling system using supercritical catalytic steam reforming of aviation kerosene for scramjet engine. *Energy*, Elsevier BV, v. 282, p. 129003, nov. 2023. ISSN 0360-5442.
- MACKAY, D. J. *Information theory, inference and learning algorithms*. [S.l.]: Cambridge university press, 2003.
- MASCOUTO, F. d. S. et al. Identificação de falhas em compósitos laminados via transformações integrais com domínio único e inferência bayesiana. Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2019.
- MASCOUTO, F. S. et al. Detection of contact failures employing combination of integral transforms with single-domain formulation, finite differences, and bayesian inference. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 77, n. 6, p. 599–618, 2020.
- MASCOUTO, F. S. et al. Detection of contact failures employing combination of integral transforms with single-domain formulation, finite differences, and bayesian inference. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, Informa UK Limited, v. 77, n. 6, p. 599–618, fev. 2020. ISSN 1521-0634.
- MIKHAILOV, M. D.; OZISIK, M. N. Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion. 1 1984.
- MUTO, M.; BECK, J. L. Bayesian updating and model class selection for hysteretic structural models using stochastic simulation. *Journal of Vibration and Control*, Sage Publications Sage UK: London, England, v. 14, n. 1-2, p. 7–34, 2008.
- NAVEIRA-COTTA, C. P.; COTTA, R. M.; ORLANDE, H. R. Inverse analysis with integral transformed temperature fields: Identification of thermophysical properties in heterogeneous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier BV, v. 54, n. 7–8, p. 1506–1519, mar. 2011. ISSN 0017-9310.

- NAVEIRA-COTTA, C. P. et al. Eigenfunction expansions for transient diffusion in heterogeneous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 52, n. 21-22, p. 5029–5039, 2009.
- NAVEIRA-COTTA, C. P.; ORLANDE, H. R.; COTTA, R. M. Combining integral transforms and bayesian inference in the simultaneous identification of variable thermal conductivity and thermal capacity in heterogeneous media. *Journal of heat transfer*, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 133, n. 11, 2011.
- NAVEIRA-COTTA, C. P. et al. Integral transforms, bayesian inference, and infrared thermography in the simultaneous identification of variable thermal conductivity and diffusivity in heterogeneous media. In: *International Heat Transfer Conference*. [S.l.: s.n.], 2010. v. 49385, p. 341–350.
- OLIVEIRA, J. et al. Passive aircraft cooling systems for variable thermal conditions. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier BV, v. 79, p. 88–97, mar. 2015. ISSN 1359-4311.
- ORLANDE, H. R. Inverse problems in heat transfer: new trends on solution methodologies and applications. *Journal of Heat Transfer*, v. 134, n. 3, p. 031011, 2012.
- ORLANDE, H. R. et al. *Problemas inversos em Transferência de calor*. [S.l.: s.n.], 2011.
- ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. [S.l.]: CRC Press, 2021. ISBN 9781003155157.
- PADILHA, R. S. et al. An analytical method to estimate spatially-varying thermal contact conductances using the reciprocity functional and the integral transform methods: Theory and experimental validation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier BV, v. 100, p. 599–607, set. 2016. ISSN 0017-9310.
- PAULINO, C. D. M.; TURKMAN, M. A. A.; MURTEIRA, B. *Estatística bayesiana*. [S.l.: s.n.], 2018.
- PRAKASH, G.; BALOMENOS, G. A bayesian approach to model selection and averaging of hydrostatic-season-temperature-time model. *Structures*, Elsevier BV, v. 33, p. 4359–4370, out. 2021. ISSN 2352-0124.
- RANGEL, L. d. S. *Modelagem Computacional para Identificação de Danos Estruturais Empregando Transformações Integrais e Inferência Bayesiana*. 2020, 102 p. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) — Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2020.
- SANTOS, M. S. d. *Modelagem Estocástica da Distribuição de Probabilidade da Precipitação Pluvial via Métodos Computacionalmente Intensivos*. 2017, 95 p. Tese (Doutorado em Ciências Climáticas) — Centro de Ciências Exatas e da Terra, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2017.
- SOMASUNDHARAM, S.; REDDY, K. S. Estimation of spatially distributed thermal properties of heterogeneous media with non-intrusive measurement. *Heat Transfer Engineering*, Informa UK Limited, v. 42, n. 1, p. 61–87, nov. 2019. ISSN 1521-0537.

SONG, M. et al. Bayesian model updating and class selection of a wing-engine structure with nonlinear connections using nonlinear normal modes. *Mechanical Systems and Signal Processing*, Elsevier BV, v. 165, p. 108337, fev. 2022. ISSN 0888-3270.

SU, J.; CERQUEIRA, D. R.; WANG, S. Z. Thermal design of multi-layered composite pipelines for deep water oil and gas production. *International Journal of Computer Applications in Technology*, Inderscience Publishers, v. 43, n. 3, p. 248, 2012. ISSN 1741-5047.

WANG, J.; ZABARAS, N. A bayesian inference approach to the inverse heat conduction problem. *International journal of heat and mass transfer*, Elsevier, v. 47, n. 17-18, p. 3927–3941, 2004.

WATANABE, E. *Identificação de Falhas de Contato em Meios Compostos via Inferência Bayesiana e Modelos Reduzidos*. 104 f. p. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) — Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2021.

YAN, Z. et al. A system-level multi-field coupling algorithm for regenerative cooling thrust chamber of a lox/methane rocket engine. *Acta Astronautica*, Elsevier BV, v. 213, p. 588–602, dez. 2023. ISSN 0094-5765.

YUEN, K.-V. Recent developments of bayesian model class selection and applications in civil engineering. *Structural Safety*, Elsevier BV, v. 32, n. 5, p. 338–346, set. 2010. ISSN 0167-4730.

ÖZISIK, M. N.; MURRAY, R. L. On the solution of linear diffusion problems with variable boundary condition parameters. *Journal of Heat Transfer*, ASME International, v. 96, n. 1, p. 48–51, fev. 1974. ISSN 1528-8943.

ÖZISIK, M. N.; ORLANDE, H. R. B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. [S.l.]: Taylor & Francis, 2000.

**APÊNDICE A** – Histogramas e gráficos de correlações entre os parâmetros: Caso 3

Fonte: O autor, 2024.

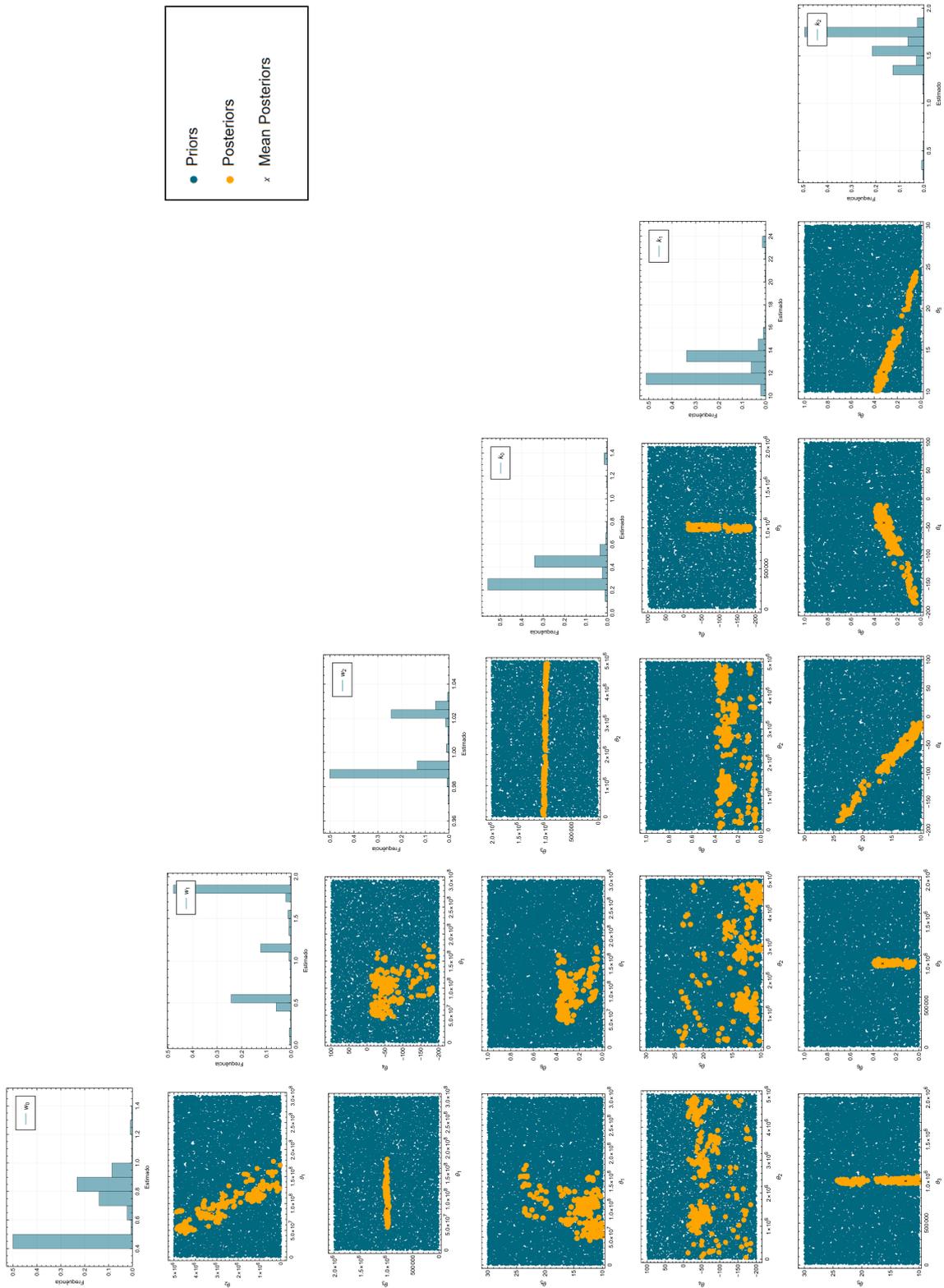


Figura 16 - Histogramas e correlação