

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE TECNOLOGIA E GEOCIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIAS ENERGÉTICAS NUCLEARES (PROTEN)

GISELLE MARIA LOPES LEITE DA SILVA

USO DE MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE EM PROBLEMAS DE HIPERTERMIA CAUSADA POR FONTES DE LASER USADAS NO TRATAMENTO DE TUMORES

RECIFE

2009

USO DE MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE EM PROBLEMAS DE HIPERTERMIA CAUSADA POR FONTES DE LASER USADAS NO TRATAMENTO DE TUMORES

GISELLE MARIA LOPES LEITE DA SILVA

USO DE MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE EM PROBLEMAS DE HIPERTERMIA CAUSADA POR FONTES DE LASER USADAS NO TRATAMENTO DE TUMORES

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, do Departamento de Energia Nuclear da Universidade Federal de Pernambuco, para obtenção do grau de Doutor.

Área de concentração: Dosimetria Instrumental Nuclear

ORIENTADOR: Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima

CO-ORIENTADORA: Prof^a. Dra. Rita de Cássia Fernandes de Lima

RECIFE – PERNAMBUCO - BRASIL

SETEMBRO – 2009

Silva, Giselle Maria Lopes Leite da
Uso de métodos perturbativos para análise de sensibilidade em problemas de hipertermia causada por fontes de laser usadas no tratamento de tumores / Giselle Maria Lopes Leite da Silva. – Recife: O Autor, 2009.
140 folhas: il., fig., tab.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco.
CTG. Tecnologia Energéticas e Nucleares, 2009.

Inclui bibliografia e anexos

- 1. Energia nuclear – Métodos perturbativos.**
- 2. Formalismo diferencial. 3. Hipertermia – Laser.**
- 4. Propriedades termofísicas. I. Título.**

621.039
621.48

CDU (2.ed.)
CDD (22.ed.)

UFPE
3C - 2009 - 180

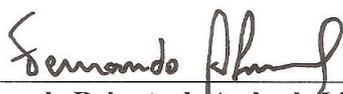
**USO DE MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA ANÁLISE DE
SENSIBILIDADE EM PROBLEMAS DE HIPERTERMIA CAUSADA
POR FONTES DE LASER USADAS NO TRATAMENTO DE TUMORES**

Giselle Maria Lopes Leite da Silva

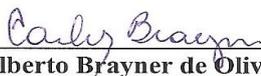
APROVADA EM: 25.09.2009

ORIENTADOR: Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima
CO-ORIENTADORA: Profa. Dra. Rita de Cássia Fernandes de Lima

COMISSÃO EXAMINADORA:



Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima – CRCN-NE/CNEN



Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira – DEN/UFPE



Prof. Dr. Paulo Roberto Maciel Lyra – DEMEC/UFPE



Prof. Dr. Jornandes Dias da Silva – UPE



Prof. Dr. Fábio Santana Magnani – DEMEC/UFPE

Visto e permitida a impressão



Coordenador do PROTEN/DEN/UFPE

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a Deus, a minha mãe e meu avô.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar agradeço a Deus e ao Espírito Santo, pois sem Ele nada poderia ter feito;

À minha família pelo amor, carinho e apoio que me deram todos estes anos. Em especial a minha mãe e meu avô que se dedicaram para que eu chegasse até aqui, mas infelizmente não puderam estar presentes para ver o resultado deste trabalho;

À Professora Rita, pela grande amizade, apoio e compreensão durante todos esses anos de amizade;

Ao Professor Fernando, pela orientação e envolvimento neste trabalho;

Agradeço a Magali pela atenção e disponibilidade com que sempre me tratou durante este período;

Aos amigos e colegas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a conclusão desta tese.

À CAPES pela bolsa concedida para a realização deste trabalho;

USO DE MÉTODOS PERTURBATIVOS PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE EM PROBLEMAS DE HIPERTERMIA CAUSADA POR FONTES DE LASER USADAS NO TRATAMENTO DE TUMORES

Autor: GISELLE MARIA LOPES LEITE DA SILVA

Orientador: Prof. Dr. Fernando Roberto de Andrade Lima

Co-orientador: Prof^a. Dra. Rita de Cássia Fernandes de Lima

RESUMO

Freqüentemente, as técnicas de aquecimento disponíveis para o tratamento terapêutico de determinadas doenças, são capazes de queimar tecidos adjacentes e necessitam de sistemas sofisticados de controle. A distribuição de temperatura dentro do tecido tratado deve ser cuidadosamente controlada para evitar danos nos tecidos adjacentes ao tumor ou para propiciar a adequação do calor depositado. A simulação numérica é uma alternativa para se ter um conhecimento do campo de temperaturas no corpo humano em algumas situações. A análise da transferência de calor será feita através de uma formulação do Método dos Volumes Finitos (MVF) da Equação da Biotransferência de Calor (*BHTE- Bioheat Transfer Equation*) em malhas triangulares não-estruturadas. Uma vez que não existem dados precisa disponíveis na literatura para os diversos parâmetros envolvidos na simulação numérica, análises de sensibilidades são necessárias para identificar a real influência de cada parâmetro nos resultados. Os custos destas análises para esta diversidade de parâmetros justificam o uso de métodos perturbativos, que são usados principalmente quando não há solução analítica para o problema ou quando a solução numérica é muito onerosa. O objetivo deste trabalho consiste em efetuar análises de sensibilidade via formalismos de perturbação, em problemas de hipertermia causada por fontes de laser usadas no tratamento de tumores. O presente trabalho parte de uma análise térmica pré-existente, na qual se estudou um procedimento, onde um tumor de duodeno é aquecido por uma sonda, com uma fonte de laser Nd:YAG. Para isto, os cálculos das análises de sensibilidade, utilizando

os formalismos diferenciais de primeira e segunda ordem, serão realizados numericamente. A condutividade térmica for o parâmetro que apresentou maior sensibilidade ao problema, seguida da massa específica e calor específico. Os métodos perturbativos se mostraram eficientes no cálculo das temperaturas. O método de 2ª ordem apresentou erros relativos menores do que os de 1ª ordem, porém seu custo computacional não justifica o seu uso para este tipo de problema.

Palavras-chave: métodos perturbativos, formalismo diferencial, hipertermia, laser, propriedades termofísicas

THE USE OF THE PERTURBATIVE METHODS FOR THE SENSITIVITY ANALYSIS IN HYPERTHERMIC PROBLEMS CAUSED BY THE LASER SOURCES IN THE TREATMENT OF TUMORS

Author: GISELLE MARIA LOPES LEITE DA SILVA

Adviser: Dsc. Fernando Roberto de Andrade Lima

Co-adviser: Dsc. Rita de Cássia Fernandes de Lima

ABSTRACT

The hyperthermic procedures available for therapeutic treatments of tumors can cause thermal damage in the adjacent living tissues and it is necessary to have an effective control systems. The temperature distribution inside the tissue must be controlled in order to avoid thermal damages to the healthy tissues in the neighborhood of the tumor. Numerical simulation is an alternative way to know the temperature profile in the human body at some situations. The heat transfer analysis will be done by the Finite Volume Method (FVM) using unstructured meshes. Since there are no accurate data in the literature for the several parameters involved in the numerical simulation, a sensitivity analysis is required in order to identify the real influence of each parameter in the results. The computational costs of the sensitivity analysis of several parameters justify the use of the perturbative methods that are adopted mainly when there is no analytical solution for the problem or when the numerical solution is very expensive. The objective of this work is to evaluate the sensitivity analysis using the perturbative methods in hyperthermic problems originated by laser sources used in tumor treatments. The present work uses a previous thermal analysis that have analyzed the use of the laser probe Nd: YAG for the treatment of a duodenum tumor. For this purpose, the sensitivity calculations using the differential formalism of 1st and 2nd order will be done numerically. The thermal conductivity presented the major sen-

sibility in the analyzed problem, followed by the specific mass and specific heat. Both perturbative methods calculated the temperatures with accuracy. The 2nd order method presented relative errors smaller than the 1st one, but its computational costs do not justify its use for this kind of application.

Keywords: perturbative methods, differential approach, hyperthermia, laser, thermophysical properties

LISTA DE FIGURAS

Figura 5.1 – Condições de contorno para o 1º exemplo.....	65
Figura 5.2 – (a) Malha triangular não-estruturada com 194 nós e 334 elementos com o nó 160 em destaque; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $n = 1000\Delta t$	65
Figura 5.3 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura média do 1º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) condutividade térmica	68
Figura 5.4 - Condições de contorno para o 2º exemplo	69
Figura 5.5 – (a) Malha triangular não-estruturada com 403 nós e 730 elementos com os nós 202 e 281 em destaque; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $n = 1200 \Delta t$	69
Figura 5.6 - Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura média do 2º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) condutividade térmica	71
Figura 5.7 – Condições de contorno para o 3º exemplo	72
Figura 5.8 – (a) Malha triangular não-estruturada com 183 nós e 314 elementos com os nós 82 e 173 em destaque; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $n = 2000 \Delta t$	73
Figura 5.10 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura do nó 82 do 3º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) calor específico; (c) condutividade térmica; (d) coeficiente de transferência de calor	78
Figura 5.11 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura do nó 173 do 3º exemplo variando os parâmetros da primeira placa: (a) massa específica; (b) calor específico; (c) condutividade térmica; (d) coeficiente de transferência de calor.....	81
Figura 5.12 – Domínio analisado.....	83
Figura 5.13 – (a) Malha triangular não-estruturada com 2760 nós e 5308 elementos; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $n = 50000 \Delta t$	84
Figura 6.1 - Corte transversal abdominal (Netter & Dalley II, 1997).....	86
Figura 6.2 - Domínio extraído da Figura 6.1 através de um programa de CAD.	89

Figura 6.3 – (a) Malha não-estruturada utilizada para a simulação; (b) Zoom da malha na região de interesse.....	90
Figura 6.4 – Isofaixas de temperaturas para os instantes: (a) $t = 60s$; (b) $t = 120s$	91

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Análise de Sensibilidade para a massa específica (1º exemplo - temperatura média).....	67
Tabela 5.2 – Análise de sensibilidade para a condutividade (1º exemplo – temperatura média).....	68
Tabela 5.3 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (2º exemplo - temperatura média).....	70
Tabela 5.4 - Análise de sensibilidade para a condutividade (2º exemplo – temperatura média).....	70
Tabela 5.5 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (2º exemplo – temperatura média)	71
Tabela 5.6 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (3º exemplo - temperatura média).....	74
Tabela 5.7 - Análise de sensibilidade para o calor específico (3º exemplo – temperatura média).....	74
Tabela 5.8 - Análise de sensibilidade para a condutividade (3º exemplo – temperatura média).....	74
Tabela 5.9 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (3º exemplo – temperatura média)	75
Tabela 5.10– Análise de sensibilidade para a massa específica (3º exemplo - temp local nó 82)	76
Tabela 5.11 – Análise de sensibilidade para o calor específico (3º exemplo - temp local nó 82)	77
Tabela 5.12 – Análise de sensibilidade para a condutividade (3º exemplo - temp local nó 82)	77
Tabela 5.13 – Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (3º exemplo - temperatura local nó 82)	77
Tabela 5.14 – Análise de sensibilidade para a massa específica da primeira placa (3º exemplo - temperatura local nó 173)	79

Tabela 5.15 – Análise de sensibilidade para o calor específico da primeira placa (3° exemplo - temperatura local nó 173)	79
Tabela 5.16 – Análise de sensibilidade para a condutividade da primeira placa (3° exemplo - temperatura local nó 173)	80
Tabela 5.17 – Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (3° exemplo - temperatura local nó 173)	80
Tabela 5.18 – Propriedades termofísicas do olho e do implante	83
Tabela 5.19 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (retina).....	84
Tabela 5.20 - Análise de sensibilidade para a condutividade (retina)	84
Tabela 5.21 - Análise de sensibilidade para taxa de perfusão sanguínea (retina)	85
Tabela 5.22 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (retina).....	85
Tabela 6.1 - Propriedades térmicas para o tumor, tecido e sangue.	88
Tabela 6.2 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 1, t = 18s)	92
Tabela 6.3 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 1, t = 18s)	93
Tabela 6.4 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 1, t = 18s)	93
Tabela 6.5 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 1, t = 18s)	93
Tabela 6.6 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (ponto 1, t = 18s).....	94
Tabela 6.7 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 1, t = 78s)	94
Tabela 6.8 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 1, t = 78s)	95
Tabela 6.9 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 1, t = 78s)	95
Tabela 6.10 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 1, t = 78s)	95
Tabela 6.11 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (ponto 1, t = 78s).....	96
Tabela 6.12 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 2, t = 58s)	96
Tabela 6.13 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 2, t = 58s)	97
Tabela 6.14 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 2, t = 58s).....	97
Tabela 6.15 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 2, t = 58s).....	97
Tabela 6.16 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (ponto 2, t = 58s).....	98

Tabela 6.17 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 2, t = 118s)	98
Tabela 6.18 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 2, t = 118s)	99
Tabela 6.19 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 2, t = 118s)...	99
Tabela 6.20 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 2, t = 118s)	99
Tabela 6.21 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (ponto 2, t = 118s).....	100

LISTA DE SÍMBOLOS

A_I	Área da secção transversal de um volume de controle associado ao nó I [m^2]
c	Calor específico do tecido [$J/kg.K$]
c_s	Calor específico do sangue [$J/kg.K$]
\mathbf{C}	Vetor das condições de contorno do sistema
$C_{IJ_L}^j$	Coefficiente de peso referente ao domínio
$C_{IJ_L}^{j(R)}$	Coefficiente de peso referente a interface entre dois materiais
$\mathbf{D}(\mathbf{w})$	Matriz diagonal do vetor \mathbf{w}
$D_{IJ_L}^j$	Coefficiente de peso referente ao contorno
\mathbf{f}	Vetor das variáveis do sistema
\mathbf{f}^*	Vetor adjunto de \mathbf{f}
g	Termo que representa o termo fonte da equação da biotransferência de calor
h	Coefficiente de transferência de calor [$W/m^2 \text{ } ^\circ C$]
\mathbf{H}	Operador
\mathbf{H}^*	Operador adjunto
I_o	Intensidade do feixe de laser na superfície [W/m^2]
I	Intensidade do feixe de laser [W/m^2]
k	Condutividade térmica [$W/m.K$]
k_t	Condutividade térmica do tecido [$W/m.K$]
\mathbf{m}	Vetor que inclui as operações entre as variáveis do espaço de fases
n_j	Cossenos diretores da normal externa ao domínio
\mathbf{p}	Vetor dos parâmetros de entrada
δp_i	Variação do parâmetro de entrada
$P_1()$	Concomitante bilateral de 1ª ordem
$P_2()$	Concomitante bilateral de 2ª ordem
q	Fluxo de calor convectivo [W/m^2]
q_j	Fluxo de calor convectivo na direção x_j [W/m^2]

\bar{q}_n	Fluxo de calor prescrito [W/m^2]
$q_{IJ_L}^{j(\Omega)}$	Fluxo na aresta IJ_L do domínio, nas direções j [W/m^2]
$q_{IJ_L}^{j(\Gamma)}$	Fluxo na aresta IJ_L do contorno, nas direções j [W/m^2]
$q_{IJ_L}^{j(\Gamma_i)}$	Fluxo na aresta IJ_L das interfaces de materiais, nas direções j [W/m^2]
Q	Taxa volumétrica de geração de calor [W/m^3]
Q_m	Taxa volumétrica de calor devido à geração de calor metabólico [W/m^3]
Q_p	Taxa volumétrica de calor devido à perfusão sanguínea [W/m^3]
r	Posição radial dentro do feixe cilíndrico
\mathbf{r}	Vetor das variáveis do espaço de fases
δR	Variação resultante de perturbações no sistema
$R()$	Funcional resposta
\mathbf{S}	Função utilizada no método perturbativo
S	Sensibilidade adimensional
\mathbf{S}^+	Função utilizada pelo método perturbativo no cálculo do funcional resposta
t	Tempo [s]
Δt	Intervalo de tempo [s]
t^i	Tempo inicial [s]
t^f	Tempo final [s]
T	Temperatura [$^{\circ}C$]
\bar{T}	Temperatura prescrita [$^{\circ}C$]
\bar{T}^i	Temperatura inicial prescrita [$^{\circ}C$]
T_a	Temperatura do sangue arterial [$^{\circ}C$]
T_o	Temperatura inicial
T_{∞}, T_{amb}	Temperatura média do ambiente externo [$^{\circ}C$]
T_{media}	Temperatura média
\mathbf{T}	Intervalo de tempo de integração
V	Produto Área x tempo total de análise

x_j	Variável espacial independente
z	Distância medida a partir da superfície irradiada [m]

Símbolos Gregos

β	Coefficiente de absorção do laser [m^{-1}]
$\delta(x)$	Função delta de Dirac
λ	Comprimento de onda [m]
Γ_C	Porção do contorno sujeita à condição de contorno de Cauchy ou Robin
Γ_D	Porção do contorno sujeita à condição de contorno de Dirichlet
Γ_N	Porção do contorno sujeita à condição de contorno de Neumann
ρ	Massa específica do tecido [kg/m^3]
ρ_s	Massa específica do sangue [kg/m^3]
ω	Taxa volumétrica de perfusão sanguínea [m^3 de sangue/ m^3 de tecido.s]
Ω	Volume de controle
$\Omega^{(k)}$	Operador utilizado no método perturbativo de 2ª ordem
\mathbb{E}	Operador utilizado no método perturbativo de 2ª ordem

Subscritos

a	Sangue arterial
I	Referente ao nó I
IJ_L	Aresta formada pelos nós I e J_L
j	Varia de um ao número de dimensões espaciais
J_L	Referente ao nó J_L
MP	Ponto médio
s	Sangue
$/i$	Derivada de primeira ordem em relação à p_i
$/ij$	Derivada de segunda ordem em relação à p_i e p_j
1	Referente a 1ª ordem
2	Referente a 2ª ordem

Sobrescritos

j	Direção j
n	Passo no tempo
T	Matriz ou vetor transposto
Γ	Localizado no contorno
Ω	Localizado no domínio espacial do problema
*	Adjunto

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	21
1.1 MOTIVAÇÃO.....	21
1.2 OBJETIVOS.....	23
1.3 ORGANIZAÇÃO DO PRESENTE TRABALHO.....	23
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	25
2.1 INTRODUÇÃO.....	25
2.2 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE.....	25
2.3 MÉTODOS PERTURBATIVOS.....	27
2.4 APLICAÇÕES DOS MÉTODOS PERTURBATIVOS.....	29
3. DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO.....	33
3.1 EQUAÇÃO DA BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR.....	33
3.2 TEORIA DA PERTURBAÇÃO – FORMALISMO DIFERENCIAL PARA SISTEMAS LINEARES (1ª ORDEM).....	37
3.3 TEORIA DA PERTURBAÇÃO – FORMALISMO DIFERENCIAL PARA SISTEMAS LINEARES (2ª ORDEM).....	42
4. MODELAGEM DO PROBLEMA.....	48
4.1 APLICAÇÃO DA TEORIA DA PERTURBAÇÃO À EQUAÇÃO DA BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR (1ª E 2ª ORDEM).....	48
4.2 DEDUÇÃO DOS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DE 1ª E 2ª ORDEM.....	54
4.3 MODELAGEM NUMÉRICA.....	57
4.3.1 Discretização dos concomitantes lineares.....	59
4.3.2 Discretização das funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$	60
4.3.3 Discretização dos coeficientes de sensibilidade.....	61
4.4 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL.....	62
5. VERIFICAÇÃO DO PROGRAMA COMPUTACIONAL.....	64
5.1 PLACA DELGADA COM GERAÇÃO DE ENERGIA.....	64

5.2	PLACA DELGADA SEM GERAÇÃO DE CALOR E CONDIÇÃO DE CONTORNO DE ROBIN (CAUCHY).....	68
5.3	PLACA DELGADA COMPOSTA COM GERAÇÃO INTERNA DE CALOR..	72
5.4	ANÁLISE TÉRMICA NO OLHO HUMANO COM A PRESENÇA DE IMPLANTES DO TIPO EPIRETINAL.....	81
6.	PROBLEMA ANALISADO.....	86
6.1	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	86
6.2	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	92
7.	CONCLUSÕES.....	102
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	104
	ANEXO A.....	109
A.1	OBTENÇÃO DO OPERADOR ADJUNTO (H^*) E DO CONCOMITANTE BILINEAR DE 1ª ORDEM [$P_1(T^*, T_{ij})$].....	109
A.2	OBTENÇÃO DO OPERADOR ADJUNTO (H^*) E DO CONCOMITANTE BILINEAR DE 2ª ORDEM [$P_2(T^*, T_{ij})$].....	111
	ANEXO B.....	114
B.1	DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A MASSA ESPECÍFICA ($p_i = \rho$).....	114
B.2	DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA O CALOR ESPECÍFICO ($p_i = c$).....	119
B.3	DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A CONDUTIVIDADE TÉRMICA ($p_i = k$).....	124
B.4	DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA O COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ($p_i = h$).....	129
B.5	DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A TAXA DE PERFUSÃO SANGÜÍNEA ($p_i = \omega$).....	133
	ANEXO C.....	138

1. INTRODUÇÃO

1.1. MOTIVAÇÃO

Simulações computacionais na área de biotransferência de calor vêm sendo usadas com frequência para dar apoio e mais segurança a diversos procedimentos médicos, especificamente aqueles que envolvem radiações ionizantes ou hipertermia. Uma modelagem precisa de tais problemas envolve dificuldades, principalmente devido à falta de informações e confiabilidade acerca dos parâmetros termofísicos dos tecidos envolvidos e acerca das taxas volumétricas de perfusão sangüínea em tecidos, especialmente os neoplásicos. Além disso, o crescimento de tumores se dá de forma totalmente desordenada e os valores encontrados na literatura para a taxa volumétrica de perfusão sangüínea não podem ser considerados exatos, levando à imprecisão das temperaturas simuladas. Como a maior parte dos domínios a serem simulados envolve geometrias complexas, malhas não-estruturadas são utilizadas e a equação diferencial que rege o problema é discretizada através do método dos volumes finitos, para a obtenção das temperaturas nos tecidos alvos e circunvizinhos. A técnica utilizada permite a simulação de tumores de qualquer forma e local, desde que se disponha de uma imagem real.

Procedimentos médicos, inclusive cirúrgicos, que utilizam laser, têm como principal fator limitante, o aumento de temperatura no tecido vivo. Tal aumento pode causar danos irreversíveis ao tecido, chegando até à sua evaporação. A hipertermia pode ser o próprio processo terapêutico em si ou uma decorrência de outro processo, tal como ablação ou cirurgia envolvendo laser. O objetivo de qualquer tratamento por hipertermia é elevar a temperatura no local desejado acima de um valor terapêutico (Rivolta et al., 1999). Procedimentos médicos que utilizem a hipertermia necessitam de conhecimento preciso sobre o campo de temperaturas produzido. Para os usuários do equipamento responsável pelo aquecimento é essencial saber prever, medir e interpretar corretamente as respostas térmicas e vasculares ao aquecimento.

Existem diversas técnicas de aquecimento disponíveis para combater tecidos tumorais, tais como: sementes ferromagnéticas, radiação eletromagnética incluindo radiofre-

qüência, microondas e ultrassom. Frequentemente estas técnicas são capazes de queimar tecidos adjacentes e necessitam de sistemas sofisticados de controle (Rivolta,1999). Além disto, diversos fatores, como a presença de grandes vasos nas vizinhanças do tumor, podem desviar o calor de seu alvo primário, pois podem produzir gradientes elevados de temperatura em tecidos aquecidos, levando a temperaturas inadequadas durante a hipertermia. Outro exemplo é que, devido à vascularização complexa do tumor, o efeito convectivo do sangue pode desperdiçar uma quantidade significativa de calor, limitando os benefícios do tratamento. Pelos motivos expostos, a distribuição de temperatura dentro de tecido tratado deve ser cuidadosamente controlada para evitar danos nos tecidos adjacentes ao tumor ou para propiciar a adequação do calor depositado.

Experimentos *in vivo* podem ser realizados em animais, mas não dão boa margem de segurança nem garantem que os mesmos resultados sejam obtidos em seres humanos. As dificuldades encontradas e riscos experimentais são muito grandes. Por outro lado, experimentos *in vitro* deixam de considerar muitos elementos importantes, tais como a circulação sanguínea. A simulação numérica é então uma alternativa para se ter um conhecimento do campo de temperaturas no corpo humano em diversas situações. Hoje em dia, diversas ferramentas numéricas e computacionais, utilizadas na engenharia, vêm sendo largamente utilizadas na simulação de tais procedimentos com o intuito de calcular o campo de temperaturas, a fim de guiar o médico mais precisamente antes de uma intervenção.

A Equação da Biotransferência de Calor (“*Bioheat Transfer Equation – BHTE*”) é uma equação de condução de calor, com termo específico de geração de calor devida à perfusão sanguínea. Ela pode ser utilizada para analisar o campo de temperaturas durante qualquer procedimento hipertérmico (Dilller,1982; Shitzer, 1992; Charny, 1982).

A fim de otimizar e agilizar a obtenção de resultados computacionais confiáveis, análises de sensibilidade se fazem necessárias (Gandini, 1987; Andrade Lima et al., 1995; Albuquerque et al., 2000) na análise dos procedimentos descritos anteriormente. Os custos de análise de sensibilidade para esta diversidade de parâmetros justificam o uso de métodos perturbativos, que são usados principalmente quando não há solução analítica para o problema ou quando a solução numérica é muito onerosa, o que corresponde a maioria dos casos reais.

1.2. OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo principal efetuar análises de sensibilidade de 2ª ordem em problemas de hipertermia causada por fontes de laser usadas no tratamento de tumores. Esta análise será feita através de formalismos de perturbação onde será desenvolvida uma ferramenta numérica computacional para calcular os coeficientes de sensibilidade de interesse.

1.3. ORGANIZAÇÃO DO PRESENTE TRABALHO

O presente trabalho de tese está dividido em capítulos para seu melhor entendimento. No Capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica sobre os temas estudados para a elaboração deste trabalho: a hipertermia em tumores malignos e os métodos perturbativos.

No Capítulo 3 é feita a descrição do modelo físico-matemático utilizado, apresentando a Equação da Biotransferência de Calor e suas características de aplicação. Neste capítulo também é descrita a Teoria da Perturbação para o formalismo diferencial aplicado a sistemas lineares (de 1ª ordem) e não-lineares (de 2ª ordem).

No Capítulo 4, é apresentada a modelagem do problema, ou seja, a teoria da perturbação é aplicada à Equação da Biotransferência de Calor, utilizando-se o formalismo diferencial para sistemas de 1ª e 2ª ordens. Em seguida, é apresentada a dedução dos coeficientes de sensibilidade para dois funcionais resposta analisados: temperatura média e temperatura local. Além disto, a modelagem numérica é apresentada juntamente com uma descrição da implementação computacional.

No Capítulo 5, apresenta-se a validação da ferramenta desenvolvida no Capítulo 4, através de problemas de transferência de calor obtidos na literatura, para os quais são conhecidas suas soluções analíticas ou numéricas.

No Capítulo 6, é apresentada a análise de sensibilidade do problema analisado com a descrição do problema e as discussões sobre os resultados obtidos.

O Capítulo 7 traz as conclusões obtidas e em seguida são apresentadas as referências bibliográficas.

Por fim, os anexos A, B e C apresentam a dedução detalhada das equações apresentadas nos Capítulos 3 e 4.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. INTRODUÇÃO

Conforme citado no capítulo anterior, este trabalho tem como objetivo efetuar análises de sensibilidade em problemas de hipertermia causada por fontes de laser usadas no tratamento de tumores. Guimarães (2003) e Lima et al. (2005) fizeram um extenso levantamento bibliográfico sobre a hipertermia para tratamento de tumores malignos com fontes de laser. Neste capítulo será apresentada uma breve revisão bibliográfica sobre os métodos perturbativos e algumas de suas principais aplicações.

2.2. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Os métodos de análise de sensibilidade podem ser classificados como:

- matemáticos;
- estatísticos;
- gráficos.

Os métodos matemáticos calculam a sensibilidade de uma resposta em função da variação de um parâmetro de entrada. Esses métodos determinam o impacto de um intervalo de variação nos valores da entrada causa nos valores da saída. Eles podem ser usados para verificação e validação, além de identificar parâmetros de entrada que requerem maior aquisição de dados ou pesquisa.

Os métodos estatísticos envolvem simulações nos quais os dados de entrada são distribuições de probabilidade. Calculam o efeito das variações nos parâmetros de entrada na distribuição de saída e permitem identificar o efeito das interações entre múltiplas entradas. A variação e a probabilidade relativa das entradas podem ser propagadas através de técnicas como simulações de Monte Carlo, por amostragem hipercúbica de Latin, entre outras. Os métodos estatísticos incluem análises de regressão, análises de variação, métodos de

superfícies de resposta, teste de sensibilidade de amplitude de Fourier e índice de informações mútuas.

Os métodos gráficos geralmente são usados para dar a indicação visual do quanto a saída é afetada por uma variação na entrada e podem ser usados como complementos dos métodos matemáticos e estatísticos.

Frey & Patil (2002) fizeram uma revisão dos tipos de métodos de análise de sensibilidade disponíveis. Dentre os métodos matemáticos é possível destacar dois métodos muito utilizados:

- sensibilidade do range nominal (“*Nominal range sensitivity*”);
- técnica de autodiferenciação (AD).

O método de sensibilidade do range nominal também é conhecido como análise local de sensibilidade ou análise de limites e é aplicável a modelos determinísticos. O método avalia o efeito nos parâmetros de saída decorrentes de variações individuais em apenas um parâmetro de entrada de cada vez. A variação do parâmetro de saída em função da variação do parâmetro de entrada é a sensibilidade do modelo em relação a este parâmetro de entrada. A sensibilidade pode ser expressa como uma variação percentual, positiva ou negativa, da solução nominal. Apresenta como vantagens sua simplicidade e melhor comportamento para modelos lineares. Porém, apresenta dificuldades em detectar as relações entre os diversos parâmetros de entrada e a menor precisão ao tratar de modelos não lineares.

A técnica de auto-diferenciação (AD) consiste em um procedimento automatizado para o cálculo da sensibilidade local de diversos modelos. Neste caso, um código computacional calcula as derivadas parciais de primeira ordem dos parâmetros de saída com relação a pequenas variações nos parâmetros de entrada. Os valores das derivadas parciais são uma medida da sensibilidade local.

As técnicas de diferenciação encontram aplicação em modelos que envolvem cálculos diferenciais numéricos complexos tais como derivadas parciais, equações integrais e séries matemáticas.

A maioria dos métodos baseados na diferenciação, tais como métodos diferenciais numéricos, possuem algumas limitações: baixa precisão nos resultados; alto custo com

esforço humano e tempo; dificuldade na formulação matemática e na implementação de programas computacionais. Para superar esses inconvenientes, várias técnicas de AD foram desenvolvidas. Dentre as mais populares estão a abordagem da variável adjunta e as técnicas de diferenciação direta.

A abordagem da variável adjunta utiliza pequenas perturbações do contorno enquanto que a diferenciação direta é baseada na solução das equações de sensibilidade para obter os coeficientes de sensibilidade. Os métodos diferenciais dos coeficientes de sensibilidade mais populares são as técnicas de diferenciação direta e da variável adjunta. Esses métodos são classificados como métodos analíticos (Gao & He, 2005). Dentre os métodos que utilizam a variável adjunta e a diferenciação direta se encontram os métodos perturbativos, que serão descritos mais detalhadamente a seguir.

2.3. MÉTODOS PERTURBATIVOS

Uma das metodologias utilizadas atualmente em cálculos de sensibilidade consiste na execução dos códigos computacionais repetidas vezes para definir o comportamento da resposta em função de um parâmetro de entrada, ou seja, para construir a superfície de resposta. Porém, devido ao grande número de parâmetros que possam influenciar a resposta de interesse e à complexidade dos modelos requeridos nos cálculos, o estudo de sensibilidade se torna lento, oneroso e muitas vezes inviável.

A utilização dos métodos perturbativos permite a redução de custos computacionais relativos aos cálculos de sensibilidade e, com isto, aumenta a eficiência da análise. Eles calculam a sensibilidade de uma resposta em relação aos parâmetros sem a necessidade de estabelecer um deles previamente para análise. Estes métodos são rápidos e eficientes devido a maior facilidade com que se apresenta o sistema de equações a ser resolvido para cada resposta analisada. Porém, são restritos a análises das respostas de comportamento linear nas vizinhanças de um ponto específico calculado. Este problema pode ser contornado utilizando esquemas de altas ordens. Contudo, a teoria da perturbação pode ser aplicada satisfatoriamente a diversos problemas de engenharia e física para análises de sensibilidade.

O método foi proposto inicialmente por Wigner em 1945 (apud GANDINI, 1987) para estudar a reatividade de diversos materiais. Esta primeira formulação, chamada CPT (*Conventional Perturbation Theory*), era baseada nos conceitos da mecânica quântica.

A metodologia CPT faz uso do conceito de função adjunta. Durante muito tempo esta função foi considerada e usada meramente como um artifício matemático. Em 1950, Lewins (apud GANDINI, 1987; GONÇALVES et al., 2002) identificou explicitamente a função adjunta como a função importância associada a uma resposta ou funcional dado.

Kadomtzero (apud GANDINI, 1987; GONÇALVES et al., 2002) fez importantes contribuições introduzindo o conceito da função importância para partículas radioativas e relacionando a função importância com a função de Green. Ele obteve relações semelhantes às obtidas por Morse e Fishbach (apud GANDINI, 1987) que relacionaram a função adjunta e a função de Green em um sistema mecânico dissipativo; e também às obtidas por Pontryagin et al., que introduziram as equações adjuntas lineares para as equações governantes de um sistema (apud TITO, 2001).

A partir da década de 60, juntamente com a introdução do conceito de importância e o desenvolvimento dos métodos matemáticos de análise, houve o desenvolvimento dos métodos perturbativos para a análise dos núcleos de reatores, blindagem, evolução dos núclídeos e termodrâmica. Inicialmente, o desenvolvimento ocorreu no domínio linear (de ordem 1ª ou maiores) e em seguida no campo não-linear. Adotando técnicas variacionais, Lewins estendeu o formalismo perturbativo incluindo problemas não-lineares (GONÇALVES et al., 2002).

As formulações perturbativas propostas pelos diversos autores podem ser divididas em três categorias de acordo com a aproximação adotada em sua dedução. Greenspan demonstrou que todos estes formalismos resultam em expressões semelhantes para os coeficientes de sensibilidade (apud GANDINI, 1997; GONÇALVES et al., 2002). Estas categorias são:

- Método GPT (*Generalized Perturbation Theory*): trata-se de uma aproximação heurística que faz uso exclusivo do princípio de conservação da função importância. Adotado inicialmente por Usachev e extensamente desenvolvido por Gandini (GANDINI, 1987; 1997).

- Método variacional: adotado por Lewins, em 1965, Pomraning, em 1967, e Stacey, no início da década de 70. O método interpreta fisicamente o fluxo adjunto como uma função importância e tem como característica a minimização do funcional de interesse (TITO, 2001; GONÇALVES et al., 2002).
- Método diferencial: baseado no uso de funções adjuntas e numa diferenciação formal do funcional resposta considerado. Proposto por Oblow, em 1978, e extensamente desenvolvido por Cacuci, em 1980 (apud GANDINI, 1987; 1997).

2.4. APLICAÇÕES DOS MÉTODOS PERTURBATIVOS

A teoria da perturbação tem exercido um importante papel desde o início dos estudos da física de reatores nucleares. Nessa área se encontram as principais aplicações dos métodos perturbativos.

Em 1975, Gandini desenvolveu uma metodologia perturbativa (HGPT – *Heuristic Generalized Perturbation Theory*) para determinar a evolução da densidade de núcleos pesados (GANDINI, 1997). Kallfeltz (apud GANDINI, 1997) utilizou a metodologia HGPT para cálculos do campo de nêutrons. Em 1982, Gandini desenvolveu uma metodologia baseada no formalismo GPT para tratar problemas não lineares. As primeiras aplicações do formalismo GPT em análises de sensibilidade em problemas termohidráulicos de reatores nucleares foram feitas por Andrade Lima et al., em 1984 e 1985 (apud ANDRADE LIMA et al., 1998). Baudron et al. (1998) fez uso do método heurístico HGPT, desenvolvido por Gandini (1987; 1997), no estudo da difusão tri dimensional em um reator do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*).

A aplicação dos métodos diferenciais no campo da termohidráulica foi inicialmente proposta por Oblow em 1978 (apud BALIÑO et al., 2001). Ele considerou um exemplo simples que consistia em um canal com um elemento de combustível e realizou os cálculos de sensibilidade das respostas de interesse para o projeto e segurança do projeto, tais como, temperatura máxima do elemento combustível e do seu revestimento. O formalismo diferencial foi comparado com a técnica da superfície de resposta e os resultados confirmaram a eficiência e a economia computacional do método. Em 1979, Weber (apud

TITO, 2001) aplicou o formalismo diferencial a problemas relevantes não-lineares em um canal de reator nuclear. Em 1980, Cacuci (apud TITO, 2001) estabeleceu um formalismo diferencial mais rigoroso para sistemas de equações não lineares. Neste trabalho, os autores mostraram a equivalência entre os formalismos variacional e diferencial (apud ANDRADE LIMA et al., 1998).

O formalismo matricial é uma variante do formalismo diferencial aplicado a sistemas discretos, e foi utilizado por Oliveira, em 1988, para fazer a análise de sensibilidade de dois canais acoplados em paralelo de uma instalação alimentada por um reator nuclear PWR operando em condições nominais (apud ANDRADE LIMA, 1998). Belém, em 1993 (apud TITO, 2001), aplicou o formalismo matricial para análise do comportamento termohidráulico do canal quente de um reator PWR.

Ainda na área de reatores nucleares, Guido et al. (1991) analisaram as oscilações de densidade em sistemas de canais paralelos utilizando métodos perturbativos. E, recentemente, Gonçalves et al. (2002) utilizaram o método variacional para cálculos do transporte de nêutrons para uma fonte arbitrária. Kobayashi (2005) determinou os coeficientes de sensibilidade, através do método GPT, para a taxa de multiplicação de nêutrons em um reator de fissão nuclear referente a mudanças na secção transversal e nas fontes externas de calor.

Pelloni & Coddington (2006) fizeram uma comparação entre a teoria da perturbação e o método HGPT na análise de reatores subcríticos para processos baseados em aceleradores de íons pesados (ADS – *Accelerator Driven Systems*). Fegghi et al. (2007) propuseram um novo método como uma alternativa para os métodos perturbativos em problemas de geometria complexa. Eles utilizaram o conceito de função importância no transporte de neutrões em reatores de fissão e aplicaram o método de Monte Carlo para calcular a função adjunta.

Os formalismos da teoria da perturbação possuem poucas aplicações em outras áreas. Na área de mecânica dos fluidos, Baliño et al. (2001) aplicaram o método perturbativo diferencial na análise de sensibilidade de problemas de golpe de aríete em trabalhos hidráulicos.

Tito (2001) fez uso do método diferencial na análise de sensibilidade na difusão de calor em uma aleta de um elemento combustível nuclear. O autor relata algumas aplicações dos métodos perturbativos no estudo de física dos solos, destacando trabalhos de Lira, entre 1994 e 1998, onde o mesmo fez análises de sensibilidade em um modelo de transferência de soluto através dos solos e um estudo da dinâmica da água nos solos.

Ainda segundo Tito (2001), o formalismo GPT também possui aplicações na área de controle de processos, tais como, em problemas de otimização de sistemas não-lineares e processo de neutralização ácido forte/base forte, sujeito a controladores do tipo PI (proporcional-integral) não linear.

Uma aplicação interessante dos métodos perturbativos foi feita por Campisi & La Bella (1985), na qual realizaram um estudo através da teoria da perturbação, onde foi possível desenvolver uma ferramenta computacional de grande utilidade para analisar como a distribuição da população e a taxa de crescimento da mesma podem influenciar nas mudanças de parâmetros demográficos fundamentais.

Em aplicações recentes, Gimenez et al. (2003) utilizaram o método diferencial na análise de sensibilidade das equações de transporte de aerossóis, ou seja, quando finas partículas estão dispersas em um meio gasoso. Veronis et al. (2004) apresentaram uma análise de sensibilidade de um dispositivo de cristal fotônico. Utilizando o conceito de função adjunta e técnicas da teoria da perturbação, eles calcularam a sensibilidade dos parâmetros de transmissão de dispositivos nanofotônicos ressonantes.

Farias (2007) também utilizou o método diferencial para a análise de sensibilidade do modelo fluidodinâmico de um *riser*, tubulação utilizada na indústria do petróleo para transporte de gás, óleo e gasóleo resultante de craqueamento catalítico. Foi analisada a concentração média do catalisador sólido ao longo do *riser* em função das velocidades dos fluidos e frações volumétricas do gás e do sólido ao longo do *riser*. Uchikawa (2008), por sua vez, aplicou os métodos diferenciais de 1ª e 2ª ordem na análise de uma célula combustível, que são dispositivos capazes de converter a energia química proveniente do hidrogênio diretamente em energia elétrica.

A utilização dos métodos perturbativos em aplicações biomédicas ainda é pouco usual. Apesar da grande importância e da necessidade de análises de sensibilidade em

diversos ramos das ciências biomédicas, estes cálculos ainda são feitos, em sua grande maioria, através do método direto. Porém, foi possível encontrar estudos que fizessem uso dos métodos perturbativos. Nestorov et al. (1997) utilizaram o formalismo matricial para estudar a distribuição cinética de nove tipos de ácidos barbitúricos no sangue arterial e em quatorze tecidos diferentes após a administração intravenosa e como eles afetavam a fisiologia do corpo. Através do uso da teoria da perturbação, Yao et al. (2004) fizeram um estudo relacionando a distribuição da velocidade axial e de temperatura na artéria, e como estes parâmetros afetam na pulsação cardíaca.

Porém não foram encontrados trabalhos que fizessem uso dos métodos perturbativos em problemas de hipertermia. A hipertermia é um método muito utilizado no tratamento de diversas enfermidades, tais como, tratamento de tumores malignos e cirurgias refrativas oculares. Devido à importância deste tipo de tratamento para a medicina atualmente, torna-se importante o desenvolvimento de técnicas que controlem adequadamente os efeitos de hipertermia a fim de se obter melhores resultados sem contudo danificar os tecidos vizinhos à área tratada.

Guimarães (2003) e Silva (2004) desenvolveram ferramentas computacionais capazes de estimar as temperaturas alcançadas pelos tecidos tratados devido a fontes externas de calor. Porém, ainda existem grandes incertezas nos parâmetros termofísicos dos tecidos utilizados nas simulações. Análises de sensibilidades são importantes, portanto, para determinar a influência de cada parâmetro no resultado final da simulação.

3. DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

3.1. EQUAÇÃO DA BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR

O processo físico a ser aqui analisado é governado pela Equação da Biotransferência de calor (BHTE - “*Bioheat Transfer Equation*”), que é uma equação de condução de calor, com um termo específico de geração de calor devida à perfusão sangüínea, Q_p , e outro, Q_m , devido ao calor metabólico. Tal equação, para um meio homogêneo e isotrópico, é mostrada abaixo,

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k_t \nabla^2 T + Q_p + Q_m + Q \quad (3.1)$$

onde:

- k_t = Condutividade térmica do tecido [$W/m^\circ C$];
- ρ = Massa específica do tecido [kg/m^3];
- c = Calor específico do tecido [$J/kg^\circ C$];
- T = Temperatura [$^\circ C$];
- t = Tempo [s];
- Q_p = Taxa volumétrica de geração de calor devido à perfusão sangüínea [W/m^3];
- Q_m = Taxa volumétrica de geração de calor metabólico [W/m^3];
- Q = Taxa volumétrica de geração de calor sobre o domínio [W/m^3].

O termo de geração de calor metabólico é desprezado, pois, geralmente, este é muito menor que o calor externo depositado (Sturesson & Andersson-Engels, 1995).

A fonte de calor devido à perfusão é dada por Q_p , e representa um sumidouro de calor devido à remoção por advecção de calor efetuada pelo sangue através da vascularização capilar presente nos tecidos vivos. O termo é representado por (Diller, 1992):

$$Q_p = \omega \rho_s c_s (T_a - T) \quad (3.2)$$

onde:

- ω = Taxa volumétrica de perfusão sanguínea [m^3 de sangue/ m^3 de tecido.s];
- ρ_s = Massa específica do sangue [kg/m^3];
- c_s = Calor específico do sangue [$J/kg^\circ C$];
- T_a = Temperatura do sangue arterial entrando no tecido [$^\circ C$];
- T = Temperatura local do tecido [$^\circ C$].

A taxa volumétrica de perfusão sanguínea, ω , é específica para cada tipo de tecido, sendo que nos tumores as taxas de perfusão média são menores do que nos tecidos normais. Além disso, a taxa de perfusão em um tumor animal diminui com o seu crescimento (Jain, 1985). A obtenção do valor da perfusão em pequenos volumes de tecido tem sido estudada por muitos anos, pois este é um parâmetro fundamental para melhorar o conhecimento das fisiologias patológica e normal, assim como de diagnósticos e da conduta de muitos problemas médicos (Bowman, 1985).

O termo de fonte Q pode ser devido a qualquer meio de aquecimento, como sementes ferromagnéticas e radiação eletromagnética, incluindo radiofrequência, microondas, ultrassom e laser. Quando fontes de laser são usadas, supõe-se como uma primeira aproximação, que a luz penetre no tecido sem sofrer espalhamento e que a taxa local de absorção de energia radiante é proporcional à intensidade incidente (lei da absorção de Beer). Devido a este fato, um feixe de laser cilíndrico, homogêneo e de raio r , está sujeito a um decaimento exponencial, tanto da intensidade quanto da taxa de absorção ao longo de uma direção de propagação (z), à medida que a luz passa através de um meio homogêneo. Então a intensidade do feixe é dada por:

$$I(r, z) = I_o(r) e^{-\beta z} \quad (3.3)$$

onde:

- r = Posição radial dentro do feixe cilíndrico;
- z = Distância medida a partir da superfície irradiada;
- β = Coeficiente de absorção (função do tipo de laser e do tecido considerado) [m^{-1}];
- I_o = Intensidade do feixe de laser na superfície [W/m^2].

A taxa volumétrica de geração de calor devida à fonte de laser, $Q(r, z)$, é, portanto, dada por (Welch, 1985):

$$Q(r, z) = \beta I(r, z) = \beta I_o(r) e^{-\beta z} \quad (3.4)$$

Quanto à intensidade incidente, será utilizado neste trabalho o padrão “spot” ou disco, no qual a intensidade I_o é constante e independente de r .

Partindo-se da lei da conservação da energia, pode-se derivar de forma mais genérica, a equação diferencial parcial que governa a biotransferência de calor em regime transitório num meio contínuo estacionário:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + Q \quad \text{em} \quad \Omega \times \mathbf{T} \quad (3.5)$$

onde, ρ é a massa específica, c é o calor específico, T é a temperatura, q_j é o fluxo de calor na direção x_j e dado pela Lei de Fourier e Q representa os termos de fonte ou sumidouro de calor volumétrico. O domínio espacial do problema é representado por Ω , com x_j sendo a variável espacial independente e j variando de um ao número de dimensões espaciais.

$\mathbf{T} = [t^i, t^f]$ representa o intervalo de tempo de integração.

A equação governante do problema é a equação da biotransferência de calor de Penes (BHTE), descrita no item anterior. Para a análise bidimensional, serão utilizadas coordenadas cartesianas e a equação a seguir pode ser obtida a partir da Eq. (3.5) com a utilização da Lei de Fourier para o fluxo de calor condutivo: $q = -k \partial T / \partial x$.

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q \quad (3.6)$$

A forma mais adequada, porém, para a descrição da formulação do Método dos Volumens Finitos é a Eq. (3.5) escrita em termos dos fluxos.

Por simplicidade, o meio é considerado ortotrópico com ρ, c, k_j constantes e a Eq. (3.5) representa uma equação diferencial parcial linear de segunda ordem, parabólica e não-homogênea.

A Eq. (3.5) representa um problema que está sujeito a condições iniciais e de contorno. As condições de contorno de interesse podem ser de diferentes tipos:

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_D \text{ X T} \quad (3.7)$$

onde Γ_D representa uma porção do contorno submetida à condição de contorno de Dirichlet.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$-q_j n_j = \bar{q}_n \quad \text{em } \Gamma_N \text{ X T} \quad (3.8)$$

onde n_j são os cossenos diretores da normal externa ao domínio e Γ_N representa uma porção do contorno submetida à condição de contorno de Neumann.

c) Condição de contorno de Cauchy, ou de Robin, ou mista:

$$-q_j n_j = \bar{q}_n + h(T - T_{amb}) \quad \text{em } \Gamma_C \text{ X T} \quad (3.9)$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_{amb} é a temperatura média do ambiente e Γ_C representa uma porção do contorno submetida à condição de contorno de Cauchy.

Finalmente, uma distribuição inicial da temperatura \bar{T}^i é conhecida para um estágio de tempo inicial t^i , e a condição inicial é expressa por:

$$T = \bar{T}^i \quad em \quad \Omega \quad e \quad t = t^i \quad (3.10)$$

As Equações (3.5) a (3.10) descrevem completamente o modelo matemático proposto, o qual governa a condução de calor em um meio homogêneo. A modelagem matemática do problema e a respectiva formulação numérica através do Método dos Volumes Finitos em malhas não-estruturadas foram descritas em detalhes por Guimarães (2003), Lyra et al. (2004; 2005) e Silva (2004).

3.2. TEORIA DA PERTURBAÇÃO – FORMALISMO DIFERENCIAL PARA SISTEMAS LINEARES (1ª ORDEM)

A teoria da perturbação pode ser aplicada a fim de realizar análises de sensibilidades a um determinado problema. Este problema analisado descreve um sistema de K equações em geral não lineares acopladas, que pode ser escrita formalmente como (Andrade Lima & Blanco, 1994):

$$\mathbf{m}(\mathbf{f}(\mathbf{r}), \mathbf{p}) = \mathbf{0} \quad (3.11)$$

onde:

- m** = Vetor que inclui as operações entre as variáveis do espaço de fases;
- f** = Vetor das variáveis de estado do sistema;
- r** = Vetor das variáveis do espaço de fases (variáveis de espaço e tempo);
- p** = Vetor dos parâmetros de entrada;
- 0** = Vetor nulo.

As condições de contorno do sistema dadas pela Eq. (3.11) podem ser escritas formalmente como:

$$\mathbf{C}(\mathbf{f}(\mathbf{r}^s), \mathbf{p}) = \mathbf{0} \quad (3.12)$$

onde \mathbf{r}^s define um ponto da superfície de contorno do espaço de fases.

Para a análise de sensibilidade, um funcional resposta $R(\mathbf{f}(\mathbf{r}), \mathbf{p})$ é definido por:

$$R(\mathbf{f}(\mathbf{r}), \mathbf{p}) = \langle \mathbf{S}^+(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rangle \quad (3.13)$$

onde a integração $\langle \rangle$ é calculada em todo o espaço de fases e \mathbf{S}^+ é uma função que pode ser identificada a partir da expressão conhecida do funcional resposta analisado, como por exemplo, temperatura média, temperatura local, etc.

Em uma análise de sensibilidade, a questão consiste em avaliar a variação da resposta δR resultantes das perturbações δp_i ($i = 1, 2, \dots, I$) nos parâmetros de entrada do sistema. Estes valores podem ser usados não apenas para estimar as variações de R devido a variações em p_i , mas também para classificar por ordem de importância os dados de entrada e calcular as incertezas de R devido às incertezas dos parâmetros (Cacuci et al., 1980). Para determinar as derivadas dR/dp_i é necessário expandir a equação da perturbação dada por $\mathbf{m}'(\mathbf{f}', \mathbf{p}') = \mathbf{0}$.

A variação de R , obtida a partir da Eq. (3.13), é dada por:

$$\delta R = \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\langle \mathbf{S}_i^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + \langle \mathbf{S}^+ \cdot \mathbf{f}_{/i} \rangle \right] \quad (3.14)$$

onde,

$$\mathbf{S}_{/i}^+ = \frac{\partial \mathbf{S}^+}{\partial p_i} \text{ e } \mathbf{f}_{/i}^+ = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} \quad (3.15)$$

Para obter δR é necessário avaliar $\mathbf{f}_{/i}$. A equação perturbada ($\mathbf{m}'(\mathbf{f}', \mathbf{p}') = \mathbf{0}$) é expandida até primeira ordem em torno de uma solução de referência \mathbf{f} :

$$\delta \mathbf{m} = \mathbf{m}'(\mathbf{f}', \mathbf{p}') - \mathbf{m}(\mathbf{f}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial p_i} + \mathbf{H} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} \right] = \mathbf{0} \quad (3.16)$$

onde ,

$$\mathbf{H} = \frac{\bar{\partial} \mathbf{m}}{\partial \mathbf{f}} = \begin{bmatrix} \frac{\bar{\partial} m_1}{\partial f_1} & \frac{\bar{\partial} m_1}{\partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial} m_1}{\partial f_K} \\ \frac{\bar{\partial} m_2}{\partial f_1} & \frac{\bar{\partial} m_2}{\partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial} m_2}{\partial f_K} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\bar{\partial} m_K}{\partial f_1} & \frac{\bar{\partial} m_K}{\partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial} m_K}{\partial f_K} \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

no qual, o operador $\frac{\bar{\partial}}{\partial f_i}$ denota uma derivada de Frechet (Gandini, 1987) (ver Anexo C).

Para que a equação perturbada ($\mathbf{m}'(\mathbf{f}', \mathbf{p}') = \mathbf{0}$) seja válida e dado que as perturbações δp_i , consideradas independentes, são arbitrárias, é necessário que se satisfaça a seguinte condição:

$$\mathbf{H} \mathbf{f}_{/i} = \mathbf{S}_{(i)} \quad (3.18)$$

onde,

$$\mathbf{S}_{(i)} = -\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial p_i} \quad (3.19)$$

A condição de contorno para a Eq. (3.18) pode ser derivada, de forma análoga, a partir da Eq. (3.12), obtendo-se:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p_i} + \frac{\bar{\partial} \mathbf{C}}{\partial \mathbf{f}} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} = 0 \quad (\mathbf{r} = \mathbf{r}^s) \quad (3.20)$$

O termo $\mathbf{f}_{/i}$ pode ser obtido através das Eqs. (3.18) e (3.20). Este termo, por sua vez, é substituído na Eq. (3.14) para a obtenção da variação procurada δR . Porém, este procedimento não é utilizado, pois, apesar de a Eq. (3.18) ser linear (\mathbf{H} depende de \mathbf{f} , e não de $\mathbf{f}_{/i}$), ela apresenta o inconveniente de depender do parâmetro p_i , devendo ser resolvida I vezes. Para superar tais inconvenientes, recorre-se ao uso dos formalismos da teoria da perturbação. No presente trabalho, será utilizado o formalismo diferencial, descrito a seguir:

➤ *Formalismo diferencial*

O formalismo diferencial faz uso do sistema adjunto, o qual permanece linear e apresenta a vantagem de não depender de p_i . Este formalismo será descrito a seguir.

Define-se o operador \mathbf{H}^* , adjunto de \mathbf{H} , pela expressão:

$$\langle \mathbf{f}_{/i} \mathbf{H}^* \mathbf{f}^* \rangle = \langle \mathbf{f}^* \mathbf{H} \mathbf{f}_{/i} \rangle + P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \quad (3.21)$$

onde \mathbf{f}^* é o vetor adjunto de $\mathbf{f}_{/i}$ e $P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ é o concomitante bilinear de \mathbf{f}^* e $\mathbf{f}_{/i}$ avaliado no contorno do espaço de fases.

É possível escrever o sistema adjunto ao sistema dado pelas Eqs. (3.18) e (3.20) como:

$$\mathbf{H}^* \mathbf{f}^* = \mathbf{S}^+ \quad (3.22)$$

e

$$\mathbf{C}^*(\mathbf{f}^*) = \mathbf{0} \quad (3.23)$$

onde a escolha conveniente das condições de contorno, dadas pela Eq. (3.23), permite calcular o concomitante $P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ a partir dos valores conhecidos de $\mathbf{f}_{/i}$ avaliados no contorno do espaço de fases.

Então, usando a Eq. (3.18), é possível reescrever a Eq. (3.21) como:

$$\langle \mathbf{f}_{/i} \mathbf{S}^+ \rangle = \langle \mathbf{f}^* \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \quad (3.24)$$

Substituindo a Eq. (3.24) na Eq. (3.14), tem-se que:

$$\delta R = \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + \langle \mathbf{f}^* \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \right] \quad (3.25)$$

O procedimento para calcular a variação da resposta δR de 1ª ordem pode ser resumido no seguinte algoritmo:

- 1 – Identificar o sistema de equações que caracterizam o problema (Eqs. (3.11) e (3.12));
- 2 – Determinar a solução do sistema de equações do problema analisado;
- 3 – Determinar as condições de contorno e inicial da equação derivada do sistema através de derivação das condições da equação principal;
- 4 – Identificar os parâmetros de entrada do sistema relevantes para a análise de sensibilidade;
- 5 – Determinar o operador \mathbf{H} através da Eq. (3.17);
- 6 – Determinar a função $S_{(i)}$ dada pela Eq. (3.19);
- 7 – Determinar o operador adjunto \mathbf{H}^* e o concomitante bilinear $P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$, pela Eq. (3.21), através de operações de integração por partes;
- 8 – Determinar as condições de contorno e final da equação adjunta de modo a simplificar o cálculo do concomitante bilinear;
- 9 – Definir o funcional resposta desejado para análise;
- 10 – Determinar a função S^+ , através da Eq. (3.13), e sua derivada de 1ª ordem;
- 11 – Determinar a solução do sistema adjunto dado pelas Eq. (3.22) e (3.23) no mesmo intervalo de tempo do problema analisado;
- 12 – Calcular o valor do concomitante $P(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ através da expressão encontrada no item (7) e das condições de contorno e inicial da equação derivada e condições de contorno e final da equação adjunta;
- 13 – Calcular os valores de δR para cada variação δp_i pela Eq. (3.25).

3.3. TEORIA DA PERTURBAÇÃO – FORMALISMO DIFERENCIAL PARA SISTEMAS NÃO-LINEARES (2ª ORDEM)

Os formalismos da teoria da sensibilidade para sistemas não-lineares são bem descritos por Gandini (1987) e Cacuci et al. (1980). Oblow (1978) descreve a teoria da sensibilidade para problemas em reatores termoidráulicos.

Considerando o sistema de equações não-lineares dado pela Eq. (3.11) e um funcional resposta definido pela Eq. (3.13), para se obter a variação do funcional resposta em razão de uma variação nos parâmetros de entrada é necessário expandir a equação perturbada de forma semelhante a Eq. (3.16), porém desta vez expandindo-se até segunda ordem em torno de uma solução de referência \mathbf{f} , obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{m} = \mathbf{m}'(\mathbf{f}', \mathbf{p}') - \mathbf{m}(\mathbf{f}, \mathbf{p}) = & \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial p_i} + \mathbf{H} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} \right] + \\ & + \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^I \delta p_i \delta p_j \left[\frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial p_i \partial p_j} + \Xi_i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_j} + \Xi_j \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} + \sum_{k=1}^K \mathbf{D} \left(\frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial p_j} \right) \cdot \mathbf{\Omega}^{(k)} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} + \right. \\ & \left. + \mathbf{H} \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial p_i \partial p_j} \right] = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Para que a equação perturbada seja válida e considerando que as perturbações δp_i são arbitrárias, é necessário que se satisfaçam as seguintes condições:

$$\mathbf{H} \mathbf{f}_{/i} = \mathbf{S}_{(i)} \quad e \quad \mathbf{H} \mathbf{f}_{/ij} = \mathbf{S}_{(ij)} \quad (3.27)$$

onde o termo $S_{(i)}$ é dado pela Eq. (3.19) e $S_{(ij)}$ é dado por:

$$\mathbf{S}_{(ij)} = - \left[\frac{\partial^2 \mathbf{m}}{\partial p_i \partial p_j} + \Xi_i \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_j} + \Xi_j \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} + \sum_{k=1}^K \mathbf{D} \left(\frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial p_j} \right) \cdot \mathbf{\Omega}^{(k)} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} \right] \quad (3.28)$$

O sistema de primeira ordem já foi definido anteriormente (Eqs. (3.18) a (3.20)). As condições de contorno para o sistema de segunda ordem podem ser obtidas a partir de derivação do sistema de 1ª ordem.

$$\frac{\partial^2 \mathbf{C}}{\partial p_i \partial p_j} + \frac{\bar{\partial}^2 \mathbf{C}}{\partial p_j \partial \mathbf{f}} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial p_i} + \frac{\bar{\partial} \mathbf{C}}{\partial \mathbf{f}} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{f}}{\partial p_i \partial p_j} = 0 \quad (3.29)$$

Os operadores Ξ_i e $\Omega^{(k)}$ são dados por:

$$\Omega^{(k)} = \begin{bmatrix} \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial f_1^{(k)} \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial f_1^{(k)} \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial f_1^{(k)} \partial f_K} \\ \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial f_2^{(k)} \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial f_2^{(k)} \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial f_2^{(k)} \partial f_K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial f_K^{(k)} \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial f_K^{(k)} \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial f_K^{(k)} \partial f_K} \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

e

$$\Xi_i = \begin{bmatrix} \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial p_i \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial p_i \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial p_i \partial f_K} \\ \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial p_i \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial p_i \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_2}{\partial p_i \partial f_K} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial p_i \partial f_1} & \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial p_i \partial f_2} & \dots & \frac{\bar{\partial}^2 m_K}{\partial p_i \partial f_K} \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

onde,

K = total de variáveis de estado do sistema;

k = índice sobrescrito (k) se refere às posições do vetor variáveis de estado do sistema.

A expressão $\mathbf{D} \left(\frac{\partial \mathbf{f}^{(k)}}{\partial p_j} \right)$ representa a matriz diagonal:

$$\mathbf{D}(\mathbf{w}) = \text{diag} \left[\frac{\partial \mathbf{f}^{(1)}}{\partial p_j} \quad \frac{\partial \mathbf{f}^{(2)}}{\partial p_j} \quad \dots \quad \frac{\partial \mathbf{f}^{(K)}}{\partial p_j} \right] \quad (3.32)$$

Considerando os seguintes funcionais resposta:

$$R_i = \langle \mathbf{S}^+ \mathbf{f}_{/i} \rangle \quad e \quad R_{ij} = \langle \mathbf{S}^+ \mathbf{f}_{/ij} \rangle \quad (3.33)$$

A variação da resposta δR resultante das perturbações $\delta p_i (i=1, 2, \dots, I)$ nos parâmetros de entrada do sistema, expandida até segunda ordem, de acordo com a Eq. (3.26), é dada então por:

$$\delta R = \sum_{i=1}^I \delta p_i [\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + \langle \mathbf{S}^+ \cdot \mathbf{f}_{/i} \rangle] + \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^I \delta p_i \delta p_j [\langle \mathbf{S}_{/ij}^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + 2\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot \mathbf{f}_{/j} \rangle + \langle \mathbf{S}^+ \cdot \mathbf{f}_{/ij} \rangle] \quad (3.34)$$

onde, por definição, tem-se que:

$$R_i = \langle \mathbf{S}^+ \mathbf{f}_{/i} \rangle \quad e \quad R_{ij} = \langle \mathbf{S}^+ \mathbf{f}_{/ij} \rangle \quad (3.35)$$

$$\mathbf{S}_{/i}^+ = \frac{\partial \mathbf{S}^+}{\partial p_i} \quad e \quad \mathbf{S}_{/ij}^+ = \frac{\partial^2 \mathbf{S}^+}{\partial p_i \partial p_j} \quad (3.36)$$

➤ *Formalismo diferencial*

Define-se o operador \mathbf{H}^* , adjunto de \mathbf{H} , pelas expressões:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{f}_{/i} \mathbf{H}^* \mathbf{f}^* \rangle &= \langle \mathbf{f}^* \mathbf{H} \mathbf{f}_{/i} \rangle + P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \\ \langle \mathbf{f}_{/ij} \mathbf{H}^* \mathbf{f}^* \rangle &= \langle \mathbf{f}^* \mathbf{H} \mathbf{f}_{/ij} \rangle + P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij}) \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde \mathbf{f}^* é o vetor adjunto de $\mathbf{f}_{/i}$ e de $\mathbf{f}_{/ij}$, $P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ e $P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij})$ são os concomitantes bilinear avaliados no contorno do espaço de fases. O sistema adjunto é dado pelas Eq. (3.22) e (3.23).

Usando-se a Eq. (3.22), as Eqs. (3.38) podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{f}_{/i} \mathbf{S}^+ \rangle &= \langle \mathbf{f}^* \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \\ \langle \mathbf{f}_{/ij} \mathbf{S}^+ \rangle &= \langle \mathbf{f}^* \mathbf{S}_{(ij)} \rangle + P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij})\end{aligned}\quad (3.38)$$

Substituindo-se as Eqs. (3.38) na Eq. (3.34), tem-se a variação do funcional resposta devido às variações dos parâmetros de entrada para sistemas não lineares de 2ª ordem:

$$\begin{aligned}\delta R &= \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + \langle \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i}) \right] + \\ &+ \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^I \delta p_i \delta p_j \left[\langle \mathbf{S}_{/ij}^+ \cdot \mathbf{f} \rangle + 2 \langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot \mathbf{f}_{/j} \rangle + \langle \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{S}_{(ij)} \rangle + P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij}) \right]\end{aligned}\quad (3.39)$$

O procedimento para calcular a variação da resposta δR de 2ª ordem pode ser resumido no seguinte algoritmo:

- 1 – Identificar o sistema de equações que caracterizam o problema (Eqs. (3.11) e (3.12));
- 2 – Determinar a solução do sistema de equações do problema analisado;
- 3 – Determinar o sistema de equações derivadas de 1ª ordem e as suas condições de contorno e inicial através de derivação do sistema de equações principal;
- 4 – Determinar as condições de contorno e inicial do sistema de equações derivadas de 2ª ordem através de derivação do sistema de equações principal;
- 5 – Determinar a solução do sistema de equações derivadas;
- 6 – Identificar os parâmetros de entrada do sistema relevantes para a análise de sensibilidade;

- 7 – Determinar o operador \mathbf{H} através da Eq. (3.17);
- 8 – Determinar as funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ dadas, respectivamente, pelas Eqs. (3.19) e (3.28);
- 9 – Determinar os operadores Ξ_i e $\Omega^{(k)}$ dados, respectivamente, pelas Eq. (3.30) e (3.31);
- 10 – Definir o funcional resposta desejado para análise;
- 11 – Determinar a função S^+ , através da Eq. (3.13), e suas derivadas de 1ª e 2ª ordens;
- 12 – Determinar o operador adjunto \mathbf{H}^* e os concomitantes bilineares $P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ e $P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij})$, pela Eq. (3.38), através de operações de integração por partes;
- 13 – Determinar as condições de contorno e final da equação adjunta de modo a simplificar o cálculo do concomitante bilinear;
- 14 – Determinar a solução do sistema adjunto dado pelas Eq. (3.22) e (3.32) no mesmo intervalo de tempo do problema analisado;
- 15 – Calcular o valor dos concomitantes $P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ e $P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij})$ através da expressão encontrada no item (10) e das condições de contorno e inicial das equações derivadas, de 1ª e 2ª ordens, e condições de contorno e final da equação adjunta;
- 16 – Calcular os valores de δR para cada variação δp_i pela Eq.(3.39).

4. MODELAGEM DO PROBLEMA

6.1. APLICAÇÃO DA TEORIA DA PERTURBAÇÃO À EQUAÇÃO DA BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR (1ª E 2ª ORDEM)

A fim de aplicar o formalismo descrito no Capítulo 3 (itens 3.2 e 3.3), pode-se reescrever a Eq. (3.6) explicitando o termo de geração de calor:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) + k \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) + \omega \rho_s c_s (T_a - T) + Q \quad (4.1)$$

É possível ainda reescrever a Eq. (3.1), de forma a mais adequada para a aplicação do formalismo de perturbação, como:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial T}{\partial x_n} \right) - \omega \rho_s c_s T + g \quad (4.2)$$

onde x_n é a coordenada independente espacial (x,y) e o termo g é dado por:

$$g = Q + \omega \rho_s c_s T_a = \beta I_o e^{-\beta z} + \omega \rho_s c_s T_a \quad (4.3)$$

A Equação (4.2) está sujeita a condições de contorno e inicial. As condições de contorno de interesse, já apresentadas no Capítulo 3, podem ser:

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$T = \bar{T} \quad \text{em } \Gamma_D \quad \mathbf{X} \quad \mathbf{T} \quad (3.7)$$

b) Condição de contorno de Neumann:

$$-q_j n_j = \bar{q}_n \quad \text{em } \Gamma_N \text{ X } \mathbf{T} \quad (3.8)$$

onde n_j são os cossenos diretores da normal externa ao domínio.

c) Condição de contorno de Cauchy, ou de Robin, ou mista:

$$-q_j n_j = \bar{q}_n + h(T - T_{amb}) \quad \text{em } \Gamma_C \text{ X } \mathbf{T} \quad (3.9)$$

A condição inicial é dada por:

$$T = \bar{T}^i \quad \text{em } \Omega \text{ e } t = t^i \quad (3.10)$$

Em primeiro lugar, é necessário identificar as variáveis usadas na dedução do formalismo. O vetor das variáveis de estado é composto pela temperatura, ou seja,

$$\mathbf{f} = [T] \quad (4.4)$$

O vetor do espaço de fases e o vetor dos parâmetros de entrada são dados por:

$$\mathbf{r} = [\Omega, t] \quad \text{e} \quad \mathbf{p} = [\rho, c, k, \omega, h] \quad (4.5)$$

onde, $V = A \cdot t_{total}$, no qual t_{total} é o tempo total analisado. Todos os parâmetros foram previamente descritos no Capítulo 3 e representa as maiores incertezas do problema.

O vetor \mathbf{m} , definido pela Eq. (3.11), inclui as operações entre as variáveis do espaço de fases e é dado por:

$$m(T, p) = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial T}{\partial x_n} \right) + \omega \rho_s c_s T - g = 0 \quad (4.6)$$

O operador \mathbf{H} , dado pela Eq. (3.17), para o problema analisado é:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{\bar{\partial} m}{\partial f} = \frac{\bar{\partial} m}{\partial T} = \frac{\bar{\partial}}{\partial T} \left[\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial T}{\partial x_n} \right) + \omega \rho_s c_s T - g \right] \\ \mathbf{H} &= \rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \end{aligned} \quad (4.7)$$

O símbolo de posição (\cdot) indica que a derivada obtida é um operador e não um valor escalar (ver Anexo C). Como o vetor de variáveis \mathbf{f} ($f = [T]$) do sistema possui apenas uma posição, o termo k é igual à unidade, então: $f^{(k)} = [T]$.

O operador $\mathbf{\Omega}^{(k)}$ (Eq. (3.30)) é dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega}^{(1)} &= \left[\frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial f_1 \partial f_1} \right] = \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial f^2} = \frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial T^2} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial m}{\partial T} \right) = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial T} \\ \mathbf{\Omega}^{(1)} &= \frac{\partial}{\partial T} \left[\rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

E o operador $\mathbf{\Xi}_i$ (Eq. (3.31)), dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Xi}_i &= \left[\frac{\bar{\partial}^2 m_1}{\partial p_i \partial f_1} \right] = \frac{\partial^2 m}{\partial p_i \partial T} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{\partial m}{\partial T} \right) = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial p_i} \\ \mathbf{\Xi}_i &= \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

Então, é possível determinar a função $\mathbf{S}_{(i)}$ (Eq. (3.19)) como:

$$S_{(i)} = -\frac{\partial m}{\partial p_i} = -\frac{\partial}{\partial p_i} \left[\rho c \frac{\partial T}{\partial t} - k \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial T}{\partial x_n} \right) + \omega \rho_s c_s T - g \right] \quad (4.10)$$

$$S_{(i)} = -\frac{\partial(\rho c)}{\partial p_i} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial p_i} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial p_i} T + \frac{\partial g}{\partial p_i}$$

Como, para este trabalho, o interesse é determinar a sensibilidade devido à variação de apenas um parâmetro por vez, assume-se que $p_i = p_j$. Portanto, a função $S_{(ij)}$ (Eq. (3.28)) é dada por:

$$S_{(ij)} = -\left[\frac{\partial^2 m}{\delta p_i \delta p_j} + \Xi_i \frac{\partial f}{\partial p_j} + \Xi_j \frac{\partial f}{\partial p_i} + \sum_{k=1}^K D \left(\frac{\partial f^{(k)}}{\partial p_j} \right) \Omega^{(k)} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right]$$

$$S_{(ij)} = -\frac{\partial^2 m}{\delta p_i \delta p_j} - \Xi_i \frac{\partial T}{\partial p_j} - \Xi_j \frac{\partial T}{\partial p_i} - D \left(\frac{\partial T^{(1)}}{\partial p_j} \right) \Omega^{(1)} \frac{\partial T}{\partial p_i} \quad (4.11)$$

$$S_{(ij)} = -\frac{\partial^2(\rho c)}{\partial p_i^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial^2 k}{\partial p_i^2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial^2(\omega \rho_s c_s)}{\partial p_i^2} T + \frac{\partial^2 g}{\partial p_i^2} - 3 \frac{\partial(\rho c)}{\partial p_i} \frac{\partial T_{/i}}{\partial t} +$$

$$+ 3 \frac{\partial k}{\partial p_i} \left(\frac{\partial^2 T_{/i}}{\partial x_n^2} \right) - 3 \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial p_i} T_{/i}$$

O operador adjunto H^* pode ser obtido da Eq. (3.37) e a sua dedução detalhada está apresentada no Anexo A. Realizando operações de integração por partes, é possível determinar o operador adjunto e os concomitantes $P_1(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/i})$ e $P_2(\mathbf{f}^*, \mathbf{f}_{/ij})$ (vide Anexo A).

$$H^* = -\rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \quad (4.12)$$

$$P_1(T^*, T_{/i}) = -\int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/i})_0^f d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} - T_{/i} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (4.13)$$

$$P_2(T^*, T_{/ij}) = - \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/ij})_0^{t_f} d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} - T_{/ij} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (4.14)$$

Os concomitantes são calculados no contorno do espaço de fases. Desta forma, para determinar seus valores são necessárias as condições de contorno e inicial da equação derivada e as condições de contorno e final da equação adjunta.

A equação adjunta (vide Eq. (3.22)) é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^* T^* &= S^+ \\ -\rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} &= k \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} \right) - \omega \rho_s c_s T^* + S^+ \end{aligned} \quad (4.15)$$

A fim de simplificar o cálculo dos concomitantes lineares, admite-se que as condições finais e de contorno da equação adjunta são:

$$T^*(\Omega, t_f) = 0 \quad (4.16)$$

$$T^*(\Gamma, t) = 0 \quad (4.17)$$

As equações derivadas (vide Eq. (3.27)) são dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} T_{/i} = S_{(i)} &\Rightarrow \rho c \frac{\partial T_{/i}}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T_{/i}}{\partial x_n^2} \right) - \omega \rho_s c_s T_{/i} + S_{(i)} \\ e \\ \mathbf{H} T_{/ij} = S_{(ij)} &\Rightarrow \rho c \frac{\partial T_{/ij}}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T_{/ij}}{\partial x_n^2} \right) - \omega \rho_s c_s T_{/ij} + S_{(ij)} \end{aligned} \quad (4.18)$$

As condições das equações derivadas são obtidas derivando-se as condições dadas pelas Eqs. (3.7) a (3.9).

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} T_{/i} &= \bar{T}_{/i} \\ T_{/ij} &= \bar{T}_{/ij} \end{aligned} \quad \text{em } \Gamma_D \mathbf{X} \mathbf{T} \quad (4.19)$$

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dp_i}(q_j n_j) &= \bar{q}_{n/i} \\ -\frac{d^2}{dp_i dp_j}(q_j n_j) &= \bar{q}_{n/ij} \end{aligned} \quad \text{em } \Gamma_N \mathbf{X} \mathbf{T} \quad (4.20)$$

onde n_j são os cossenos diretores da normal externa ao domínio.

c) Condição de contorno de Cauchy, ou de Robin, ou mista:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dp_i}(q_j n_j) &= \bar{q}_{n/i} + \frac{d}{dp_i}[h(T - T_{amb})] \\ -\frac{d}{dp_i dp_j}(q_j n_j) &= \bar{q}_{n/ij} + \frac{d}{dp_i dp_j}[h(T - T_{amb})] \end{aligned} \quad \text{em } \Gamma_C \mathbf{X} \mathbf{T} \quad (4.21)$$

As condições iniciais são:

$$\begin{aligned} T_{/i}(\Omega, 0) &= \bar{T}_{/i}^i \\ T_{/ij}(\Omega, 0) &= \bar{T}_{/ij}^i \end{aligned} \quad (4.22)$$

Substituindo as condições dadas pelas Eq. (4.19) e (4.22), nas Eq. (4.13) e (4.14), é possível obter as seguintes expressões para os concomitantes bilineares:

$$P_1(T^*, T_{/i}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/i})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/i} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (4.23)$$

$$P_2(T^*, T_{/ij}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/ij})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/ij} k \frac{\partial T^*}{\partial x} \right) d\Gamma dt \quad (4.24)$$

6.2. DEDUÇÃO DOS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DE 1ª E 2ª ORDEM

Neste trabalho, serão avaliados dois funcionais respostas: a temperatura média e a temperatura local. O funcional resposta correspondente à temperatura média é dado por.

$$R = T_{media}(\Omega, t) = \iiint \frac{1}{A \cdot t_{total}} T d\Omega dt = \iiint \frac{1}{V} T dV = \left\langle \frac{1}{V} T \right\rangle = \langle S^+ T \rangle \quad (4.25)$$

onde, $V = A \cdot t_{total}$, no qual t_{total} é o tempo total analisado. Para avaliar a variação da resposta δR , dada pela Eq. (3.25) de 1ª ordem e a Eq. (3.39) de 2ª ordem, é necessário determinar as derivadas de 1ª e 2ª ordens do termo S^+ em função dos parâmetros de entrada p_i :

$$S^+ = \frac{1}{V} \quad \Rightarrow \quad S_{/i}^+ = \begin{cases} 0 & \text{se } p_i \neq V \\ -1/V^2 & \text{se } p_i = V \end{cases} \quad (4.26)$$

e,

$$S_{/ij}^+ = \begin{cases} 0 & \text{se } p_i \neq p_j \neq V \\ 2/V^3 & \text{se } p_i = p_j = V \end{cases} \quad (4.27)$$

O funcional resposta correspondente à temperatura local num ponto de coordenadas (x_o, y_o) e em um determinado instante $t = t_o$:

$$R = T_{media}(\Omega_o, t_o) = \iiint T(\Omega, t) \delta(\Omega - \Omega_o) \delta(t - t_o) d\Omega dt = \langle S^+ T \rangle \quad (4.28)$$

logo,

$$S^+ = \delta(\Omega - \Omega_o) \delta(t - t_o) = \begin{cases} 1 & \text{se } \Omega = \Omega_o, t = t_o \\ 0 & \text{se } \Omega \neq \Omega_o, t \neq t_o \end{cases} \quad (4.29)$$

onde as funções $\delta(\Omega - \Omega_o)$ e $\delta(t - t_o)$ representam as funções delta de Dirac em torno do pontos Ω_o e t_o , respectivamente.

Por se tratar de uma constante, as derivadas de 1ª e 2ª ordens são nulas para qualquer parâmetro analisado.

$$S_{/i}^+ = S_{/ij}^+ = 0 \quad (4.30)$$

A variação da resposta δR resultantes das perturbações $\delta p_i (i = 1, 2, \dots, I)$ nos parâmetros de entrada do sistema para o formalismo de 1ª ordem é dado pela Eq. (3.25) reescrita em função da variável temperatura:

$$\delta R = \sum_{i=1}^I \delta p_i \left[\langle S_{/i}^+ \cdot T \rangle + \langle T^* S_{(i)} \rangle + P_1(T^*, T_{/i}) \right] \quad (4.31)$$

Onde todos os termos da equação são conhecidos:

- T = Campo de temperaturas (Eq. (4.2) a (3.10));
- δp_i = Variação do parâmetro de entrada analisado;

- S_{li}^+ = Dado pela Eq. (4.26) para o funcional temperatura média;
 = Dado pela Eq. (4.30) para o funcional temperatura local;
 T^* = Campo de temperaturas adjuntas;
 $T_{/i}$ = Temperatura derivada de 1ª ordem;
 $S_{(i)}$ = Dado pela Eq. (4.10);
 $P_1(T^*, T_{/i})$ = Concomitante bilinear de 1ª ordem dado pela Eq. (4.13);

A variação da resposta δR para o formalismo de 2ª ordem é dado pela Eq. (3.40) reescrita em função da variável temperatura:

$$\begin{aligned}
 \delta R = & \sum_{i=1}^I \delta p_i [\langle \mathbf{S}_{li}^+ \cdot T \rangle + \langle T^* \cdot \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P_1(T^*, T_{/i})] + \\
 & + \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^I \delta p_i \delta p_j [\langle \mathbf{S}_{lij}^+ \cdot T \rangle + 2\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot T_{/j} \rangle + \langle T^* \cdot \mathbf{S}_{(ij)} \rangle + P_2(T^*, T_{/ij})]
 \end{aligned} \tag{4.32}$$

Onde todos os termos da equação são conhecidos:

- T = Campo de temperaturas (Eq. (4.2) a (3.10));
 $\delta p_i, \delta p_j$ = Variação do parâmetro de entrada analisado;
 S_{li}^+ = Dado pela Eq. (4.26) para o funcional temperatura média;
 = Dado pela Eq. (4.30) para o funcional temperatura local;
 S_{lij}^+ = Dado pela Eq. (4.27) para o funcional temperatura média;
 = Dado pela Eq. (4.30) para o funcional temperatura local;
 T^* = Campo de temperaturas adjuntas;
 $T_{/i}$ = Campo de temperaturas derivadas de 1ª ordem;
 $T_{/ij}$ = Temperatura derivada de 2ª ordem;
 $S_{(i)}$ = Dado pela Eq. (4.10);
 $S_{(ij)}$ = Dado pela Eq. (4.11);
 $P_1(T^*, T_{/i})$ = Concomitante bilinear de 1ª ordem dado pela Eq. (4.13);
 $P_2(T^*, T_{/ij})$ = Concomitante bilinear de 2ª ordem dado pela Eq. (4.14);

Para este trabalho foram escolhidos os seguintes parâmetros para realização das análises de sensibilidade: massa específica, calor específico, condutividade térmica, coeficiente de transferência de calor e taxa de perfusão sanguínea. As deduções dos coeficientes de sensibilidade de 1ª e 2ª ordens para estes parâmetros estão descritas no Anexo B.

6.3. MODELAGEM NUMÉRICA

A formulação numérica adotada para discretização da Equação da Biotransferência de Calor foi apresentada por Lyra et al. (2002), Guimarães (2003) e Lyra et al. (2004) que utilizaram o Método dos Volumes Finitos com volume de controle do tipo “median dual” em malhas não-estruturadas. A equação é escrita em termos do fluxo (3.5) e integrada em torno de um volume de controle arbitrário:

$$\int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Omega} \frac{\partial q_j}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} Q d\Omega \quad (4.33)$$

Aplicando o teorema da divergência no primeiro termo do lado direito da equação, tem-se que:

$$\int_{\Omega} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Gamma} q_j n_j d\Gamma + \int_{\Omega} Q d\Omega \quad (4.34)$$

Para obter a formulação numérica, via MVF, a partir da Eq. (4.34), procede-se inicialmente a discretização do domínio. As integrais sobre o volume na Eq. (4.34) são calculadas para cada volume de controle associado ao nó I da malha como:

$$\rho c \int_{\Omega_I} \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega \cong \rho c \frac{\partial T_I}{\partial t} A_I \cong \rho c \frac{\partial \hat{T}_I}{\partial t} A_I \quad (4.35)$$

$$\int_{\Omega_I} Q d\Omega \cong Q_I A_I$$

onde A_I é a área do volume de controle ao redor do nó I , T_I e Q_I representam, respectivamente, a temperatura calculada numericamente e o termo fonte, para o nó I .

A integral sobre o contorno presente na mesma equação é calculada sobre o contorno do volume de controle associado ao nó I , usando uma representação da malha por arestas,

$$\int_{\Gamma_I} q_j n_j d\Gamma \cong \sum_L C_{IJ_L}^j q_{IJ_L}^{j(\Omega)} + \sum_L D_{IJ_L}^j q_{IJ_L}^{j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{IJ_L}^{j(R_k)} q_{IJ_L}^{j(\Gamma_I)} \quad (4.36)$$

Os termos $q_{IJ_L}^{j(\Omega)}$, $q_{IJ_L}^{j(\Gamma)}$ e $q_{IJ_L}^{j(\Gamma_I)}$ representam, respectivamente, os fluxos nas arestas IJ_L do domínio e contorno externo, no contorno externo e nas interfaces entre materiais. Os coeficientes peso $C_{IJ_L}^j$, $D_{IJ_L}^j$ e $C_{IJ_L}^{j(R_k)}$ representam as componentes do vetor área normais à superfície do volume de controle e que devem multiplicar o fluxo associado à aresta IJ_L para obter a contribuição do fluxo de calor desta aresta para o nó I . Os coeficientes $C_{IJ_L}^j$ são calculados para todas as arestas da malha; os coeficientes $D_{IJ_L}^j$ são calculados apenas para as arestas do contorno; enquanto que os coeficientes $C_{IJ_L}^{j(R_k)}$ são calculados para as arestas de interface.

A discretização no tempo é feita através de uma formulação explícita (“Euler forward”), onde as temperaturas dos nós vizinhos a I são avaliadas no instante anterior, ou seja, já são conhecidas. A formulação discreta da Eq.

(4.33) fica:

$$\rho c \frac{T_I^{n+1} - T_I^n}{\Delta t} A_I = - \left(\sum_L C_{IJ_L}^j q_{IJ_L}^{j(\Omega)} + \sum_L D_{IJ_L}^j q_{IJ_L}^{j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{IJ_L}^{j(R_k)} q_{IJ_L}^{j(\Gamma_I)} \right) + Q_I A_I \quad (4.37)$$

O primeiro termo do lado direito da equação quantifica o fluxo que atravessa as interfaces do volume de controle associado ao nó I . O segundo termo quantifica o fluxo a-

través das arestas do contorno, e o terceiro termo, quantifica o fluxo através das interfaces entre materiais diferentes.

O cálculo dos termos de fluxos constantes na Eq. (4.37), bem como a discretização do termo de fonte térmica, estão descritos detalhadamente em Lyra et al, (2002) e Guimarães, (2003).

As equações, derivada de 1ª ordem e adjunta, são discretizadas através da mesma metodologia. As formas discretas das equações são dadas, respectivamente, por:

$$\rho c \frac{T_{/iI}^{n+1} - T_{/iI}^n}{\Delta t} A_I = - \left(\sum_L C_{II_L}^j q_{/iII_L}^{j(\Omega)} + \sum_L D_{II_L}^j q_{/iII_L}^{j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{II_L}^{j(R_k)} q_{/iII_L}^{j(\Gamma_k)} \right) + \left(-\omega \rho_s c_s T_{/i} + S_{(i)} \right)_I A_I \quad (4.38)$$

e

$$-\rho c \frac{T_I^{*n+1} - T_I^{*n}}{\Delta t} A_I = - \left(\sum_L C_{II_L}^j q_{II_L}^{*j(\Omega)} + \sum_L D_{II_L}^j q_{II_L}^{*j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{II_L}^{j(R_k)} q_{II_L}^{*j(\Gamma_k)} \right) + \left(-\omega \rho_s c_s T^* + S^+ \right)_I A_I \quad (4.39)$$

Vale ressaltar que o termo de acúmulo na equação adjunta (Eq. (4.39)) é negativo, o que implica que, neste caso, a resolução temporal do problema é feita a partir do instante final até o instante inicial.

4.3.1 Discretização dos concomitantes lineares

Os concomitantes são avaliados no contorno do espaço de fases. A integral sobre o contorno, presente nas Eq. (4.23) e (4.24), é calculada sobre o contorno do volume de controle associado ao nó I , usando uma representação da malha por arestas.

$$P_1(T^*, T_{/i}) = \sum_I \left(T_I^* \rho c T_{/iI} \right)_{t=0} A_I + \sum_L \left(-T_{/iII_L} k \frac{\partial T_{II_L}^*}{\partial x_n} \right) D_{II_L}^j \Delta t + \quad (4.40)$$

e

$$P_2(T^*, T_{ij}) = \sum_I (T_I^* \rho c T_{ijI})_{t=0} A_I + \sum_L \left(-T_{ijU_L} k \frac{\partial T_{U_L}^*}{\partial x_n} \right) D_{U_L}^j \Delta t + \quad (4.41)$$

onde n_j são os cossenos diretores da normal externa ao domínio, a temperatura na aresta é dada pela média das temperaturas nodais, ou seja, $T_{U_L} = (T_I + T_{J_L})/2$. Do mesmo modo, o gradiente na aresta é dada pela média dos gradientes nodais. O somatório em I compreende todos os nós da malha, enquanto que o somatório em L compreende todas as arestas do contorno externo e da interface e o coeficiente $D_{U_L}^j$ representa o vetor área normal a superfície analisada.

4.3.2 Discretização das funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ dependem do parâmetro analisado e a dedução destas funções para cada parâmetro se encontra no Anexo B.

Para a massa específica, as funções discretizadas para cada nó I podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} S_{(\rho)I} &= -c \frac{T_I^{n+1} - T_I^n}{\Delta t} \\ S_{(\rho\rho)I} &= -3c \frac{T_{/ \rho I}^{n+1} - T_{/ \rho I}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (4.42)$$

Para o calor específico, tem-se que:

$$\begin{aligned} S_{(c)I} &= -\rho \frac{T_I^{n+1} - T_I^n}{\Delta t} \\ S_{(cc)I} &= -3\rho \frac{T_{/ c I}^{n+1} - T_{/ c I}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Para a condutividade térmica, tem-se que:

$$\begin{aligned}
 S_{(k)I} &= - \left(\sum_L C_{U_L}^j q_{U_L}^{j(\Omega)} + \sum_L D_{U_L}^j q_{U_L}^{j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{U_L}^{j(R_k)} q_{U_L}^{j(\Gamma_k)} \right) \\
 S_{(kk)I} &= - \left(\sum_L C_{U_L}^j q_{/i U_L}^{j(\Omega)} + \sum_L D_{U_L}^j q_{/i U_L}^{j(\Gamma)} + \sum_{k=1}^2 \sum_L C_{U_L}^{j(R_k)} q_{/i U_L}^{j(\Gamma_k)} \right)
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

Neste caso os fluxos devem ser calculados considerando $k = 1$.

Considerando o coeficiente de transferência de calor, estas funções são nulas. Para a taxa de perfusão sanguínea, tem-se que:

$$\begin{aligned}
 S_{(\omega)I} &= \rho_s c_s (T_a - T_I) \\
 S_{(\omega\omega)I} &= -3\rho_s c_s T_{/ \omega I}
 \end{aligned} \tag{4.45}$$

4.3.3 Discretização dos coeficientes de sensibilidade

Os coeficientes de sensibilidade são avaliados em todo o domínio, portanto, devem-se discretizar as integrações de domínio representadas pelos colchetes nas Eq. (4.31) e (3.39).

As equações discretizadas podem ser escritas como:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i} = \left[\sum_I (S_{/i I}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* S_{(i)I}) A_I \Delta t + P(T^*, T_{/i}) \right] \tag{4.46}$$

e

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta R}{\delta p_i} &= \left[\sum_I (S_{/i I}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* S_{(i)I}) A_I \Delta t + P(T^*, T_{/i}) \right] + \\
 &+ \frac{1}{2!} \delta p_j \left[\sum_I (S_{/ij I}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I 2(S_{/ij I}^+ \cdot T_{jI}) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* \cdot S_{(ij)I}) A_I \Delta t + P_2(T^*, T_{/ij}) \right]
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

É importante observar que para o caso da condutividade térmica, a discretização dos termos $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ já considera a integração no domínio espacial, portanto a discretização dos coeficientes de sensibilidade é escrita como:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i} = \sum_t \left[\sum_I (S_{/iI}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* S_{(i)I}) \Delta t + P(T^*, T_{/i}) \right] \quad (4.48)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\delta R}{\delta p_i} = \sum_t \left\{ \left[\sum_I (S_{/iI}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* S_{(i)I}) \Delta t + P(T^*, T_{/i}) \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2!} \delta p_j \left[\sum_I (S_{/ijI}^+ \cdot T_I) A_I \Delta t + \sum_I 2(S_{/ijI}^+ \cdot T_{jI}) A_I \Delta t + \sum_I (T_I^* \cdot S_{(ij)I}) \Delta t + P_2(T^*, T_{/ij}) \right] \right\} \quad (4.49) \end{aligned}$$

6.4. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Para o cálculo da solução numérica do problema analisado foi utilizada a ferramenta computacional desenvolvida por Guimarães (2003). Para o cálculo da solução numérica da equação derivada e adjunta foi adotada a mesma modelagem numérica e o algoritmo correspondente está descrito em Guimarães (2003) e Silva (2004).

Foi desenvolvida uma ferramenta computacional para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade de 1ª e 2ª ordens. A etapa de análise de sensibilidade propriamente dita pode ser descrita pelo algoritmo a seguir:

- 1 – Cálculo da solução numérica da equação principal (Eq. (3.1));
- 2 – Cálculo da função $S_{(i)}$ (Eq. (4.10));
- 3 – Impressão das temperaturas de todos os nós da malha em todos os passos de tempo;
- 4 – Impressão dos valores da função $S_{(i)}$;
- 5 – Cálculo da solução numérica da equação derivada de 1ª ordem (Eq. (4.18));
- 6 – Cálculo da função $S_{(ij)}$ (Eq. (4.11));

- 7 – Impressão das temperaturas derivadas de todos os nós da malha em todos os passos de tempo;
- 8 – Impressão dos valores da função $S_{(ij)}$;
- 9 – Cálculo da solução numérica da equação adjunta (Eq. (4.15));
- 10 – Impressão das temperaturas adjuntas de todos os nós da malha em todos os passos de tempo;
- 11 – Leitura dos dados calculados de temperatura e função $S_{(i)}$;
- 12 – Leitura dos dados calculados de temperatura adjunta e função $S_{(ij)}$;
- 13 – Leitura dos dados calculados de temperatura derivada de 1ª ordem;
- 14 – Cálculo dos concomitantes bilineares de 1ª e 2ª ordens (Eq. (4.23) e (4.24));
- 15 – Cálculo dos coeficientes de sensibilidade de 1ª e 2ª ordens (Eq. (4.31) e (3.39));
- 16 – Impressão dos resultados.

5. VERIFICAÇÃO DO PROGRAMA COMPUTACIONAL

Este capítulo é destinado a apresentar alguns exemplos que demonstrem as habilidades do esquema numérico proposto descrito no Capítulo 4 e validem o sistema computacional desenvolvido. O primeiro exemplo apresenta um problema simples, sem geração de calor, que permite verificar a implementação das condições de contorno de Dirichlet e Neumann. O segundo, também sem geração de calor, avalia as condições de contorno de Dirichlet, Neumann e Cauchy. O terceiro exemplo avalia uma placa composta por dois materiais submetida a geração de calor. Para todos estes exemplos são feitas análises de sensibilidade para temperatura média e temperatura local. Por último, é feita uma aplicação em um exemplo biomecânico que considera um implante retiniano no olho humano, considerando a temperatura média como funcional analisado.

5.1. PLACA DELGADA COM GERAÇÃO DE ENERGIA

O primeiro exemplo analisa o perfil de temperatura em uma placa delgada com 5,0 m de altura e 5,0 m de largura com geração de calor e inicialmente a $T_0 = 0,0^\circ\text{C}$. O calor é gerado na placa a uma taxa volumétrica constante de $g = 2,4 \text{ W/m}^3$. A condutividade térmica do material é $k = 15,1 \text{ W/m}^\circ\text{C}$, sua massa específica é $\rho = 8055,0 \text{ kg/m}^3$ e seu calor específico, $c = 480,0 \text{ J/kg K}$ (Incropera & DeWitt, 1998). As superfícies em $x = 0,0$, $y = 0,0$ e $y = 5,0 \text{ m}$ são mantidas isoladas, e a superfície em $x = 5,0 \text{ m}$ é mantida a temperatura constante $T = 0^\circ\text{C}$.

A Figura 5.1 apresenta as condições de contorno do problema e na Figura 5.2 está representada a malha não-estruturada utilizada na análise numérica e as isofoixas de temperatura indicando a distribuição de temperatura da placa. Para a solução numérica, foi utilizada uma malha triangular isotrópica não estruturada com 194 nós e 334 elementos com base no estudo de convergência realizado por Silva (2004). Considerando o critério de estabilidade, o intervalo de tempo (Δt) adotado para o problema foi de $3 \times 10^3 \text{ s}$.

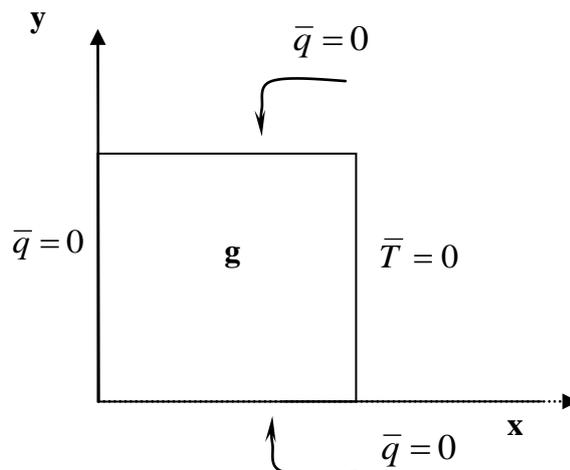


Figura 5.1 – Condições de contorno para o 1º exemplo

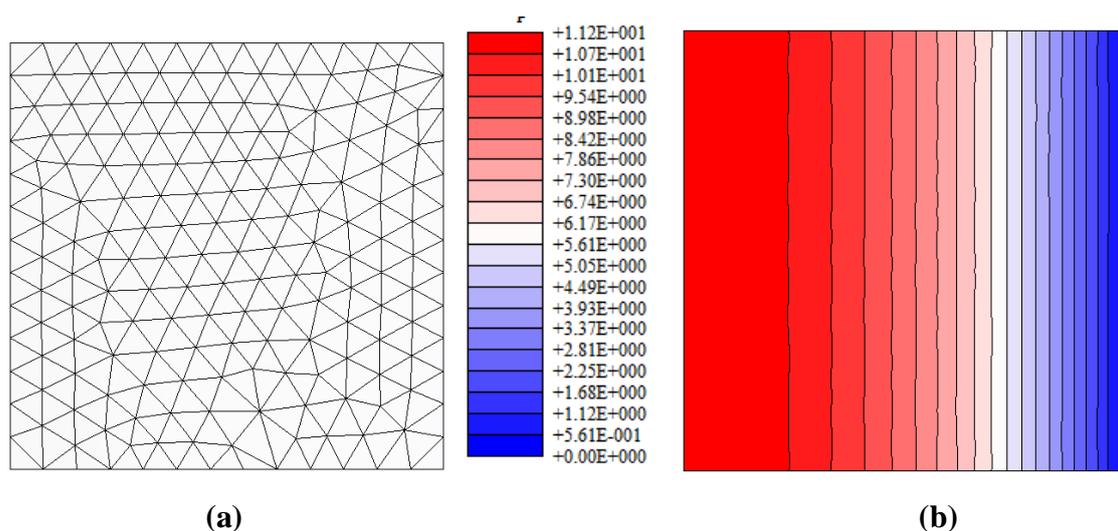


Figura 5.2 – (a) Malha triangular não-estruturada com 194 nós e 334 elementos com o nó 160 em destaque; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $1000 \Delta t$

A Tabela 5.1 e a Tabela 5.2 mostram a análise de sensibilidade para a temperatura média da placa em regime transiente no instante $t = 1000 \Delta t$. O instante de tempo escolhido para a análise foi escolhido aleatoriamente. Os valores em negrito indicam os valores de referência. As temperaturas para o método direto são obtidas executando o programa computacional para cada valor de interesse dos parâmetros analisados.

Considerando as expressões das variações da resposta δR dadas pelas Eqs. (4.31) e (4.32) e que as análises serão realizadas variando apenas um parâmetro de cada vez ($p_i = p_j$), temos que os coeficientes de sensibilidade são dados por:

$$\frac{\delta R}{\delta p_i} = \sum_{i=1}^l [\langle S_{li}^+ \cdot T \rangle + \langle T^* \cdot \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P_1(T^*, T_{/i})] \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta R}{\delta p_i} = & \sum_{i=1}^l [\langle \mathbf{S}_{li}^+ \cdot T \rangle + \langle T^* \cdot \mathbf{S}_{(i)} \rangle + P_1(T^*, T_{/i})] + \\ & + \frac{1}{2!} \sum_i^l \delta p_i [\langle \mathbf{S}_{lii}^+ \cdot T \rangle + 2\langle \mathbf{S}_{/i}^+ \cdot T_i \rangle + \langle T^* \cdot \mathbf{S}_{(ii)} \rangle + P_2(T^*, T_{/ii})] \end{aligned} \quad (5.2)$$

Para comparar os resultados, é calculada a sensibilidade para cada parâmetro, que corresponde ao coeficiente de sensibilidade adimensional:

$$S = \frac{\delta R}{\delta p_i} \times \frac{p_{ref}}{R_{ref}} \times 100\% \quad (5.3)$$

onde S é a sensibilidade; p_{ref} é o valor do parâmetro de referência; R_{ref} é o valor do funcional resposta (temperatura média ou local) de referência; e o termo $\delta R / \delta p_i$ pode ser calculado com os valores obtidos pelo método direto ou pelas Eq. (5.1) ou (5.2) para os métodos perturbativos de 1ª e 2ª ordem, respectivamente. As temperaturas obtidas através dos métodos perturbativos de 1ª e 2ª ordens são calculadas através da seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \frac{(R - R_{ref})}{(p - p_{ref})} &= \frac{S}{100\%} \times \frac{R_{ref}}{p_{ref}} \\ R &= R_{ref} + \frac{S}{100\%} \times \frac{R_{ref}}{p_{ref}} \times (p - p_{ref}) \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde R é o valor da temperatura calculada para o novo valor analisado do parâmetro p .

Foi realizada uma comparação entre os valores obtidos através do método direto e dos métodos perturbativos de 1ª e 2ª ordem (Figura 5.3).

Comparando os resultados do método direto e do método perturbativo de 1ª ordem, o maior erro relativo encontrado foi de 0,43% para uma diferença máxima de 10% no valor da massa específica. Para o método perturbativo de 2ª ordem, o erro máximo foi de 0,18%. Neste caso, o método perturbativo de 2ª ordem apresentou melhores resultados para as estimativas de temperatura média. Para a condutividade térmica, os erros relativos para ambos os métodos perturbativos foram muito semelhantes (máximos de 2,92% e 2,95% para 1ª e 2ª ordem, respectivamente). Neste caso, o método de 2ª ordem não apresentou vantagens em relação ao de 1ª ordem.

Com relação à massa específica, a sensibilidade foi de 68,71%. Para a condutividade a sensibilidade foi de 33,83% respectivamente. A massa específica, portanto, apresenta maior sensibilidade no problema do que a condutividade.

Tabela 5.1 – Análise de Sensibilidade para a massa específica (1º exemplo - temperatura média)

Massa específica (kg/m³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
7249,50	- 10	4,8951	4,8740	0,43	4,9040	0,18
7652,25	- 5	4,7273	4,7222	0,11	4,7296	0,05
8055,00	-	4,5703	4,5703	-	4,5703	-
8457,75	+ 5	4,4232	4,4184	0,11	4,4259	0,06
8860,50	+ 10	4,2851	4,2665	0,44	4,2964	0,26

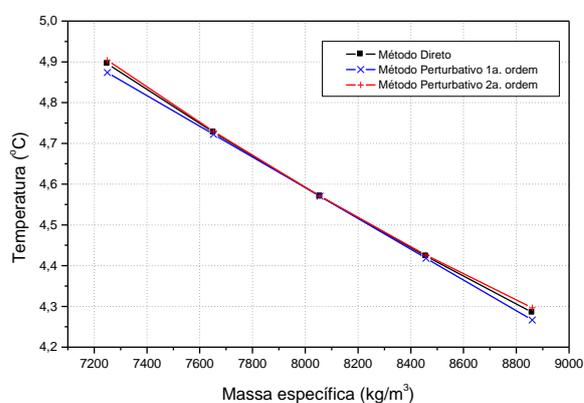
MD = método direto

MP = método perturbativo

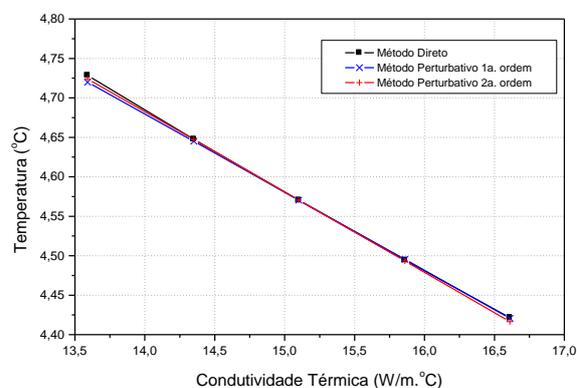
Δ (%) = Variação percentual do parâmetro

Tabela 5.2 – Análise de sensibilidade para a condutividade (1º exemplo – temperatura média)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
13,59	- 10	4,7284	4,7198	0,18	4,7242	0,09
14,35	- 5	4,6476	4,6450	0,05	4,6472	0,01
15,10	-	4,5703	4,5703	-	4,5703	-
15,86	+ 5	4,4943	4,4955	0,03	4,4933	0,02
16,61	+ 10	4,4216	4,4207	0,02	4,4163	0,12



(a)



(b)

Figura 5.3 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura média do 1º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) condutividade térmica

5.2. PLACA DELGADA SEM GERAÇÃO DE CALOR E CONDIÇÃO DE CONTORNO DE ROBIN (OU CAUCHY)

O segundo exemplo apresenta o perfil de temperatura em uma placa delgada similar à placa do 1º exemplo, porém sem a geração de calor. As novas condições de contorno estão descritas na Figura 5.4. A superfície em $x = 0,0$ é mantida isolada; a superfície em $x = 5,0$ m está sujeita a troca de calor por convecção com o meio ambiente; as superfícies em $y = 0,0$ e $5,0$ m são mantidas a $T = 50^\circ\text{C}$ e $T = 0^\circ\text{C}$, respectivamente. Para a solução numérica, foi utilizada uma malha triangular isotrópica não-estruturada com 403 nós e 730 ele-

mentos com base no estudo de convergência realizado por Silva (2004). Esta malha e as isofaixas de temperatura indicando a distribuição de temperatura da placa estão representadas na Figura 5.5. Considerando o critério de estabilidade, o intervalo de tempo (Δt) adotado para o problema foi de $1,5 \times 10^3$ s.

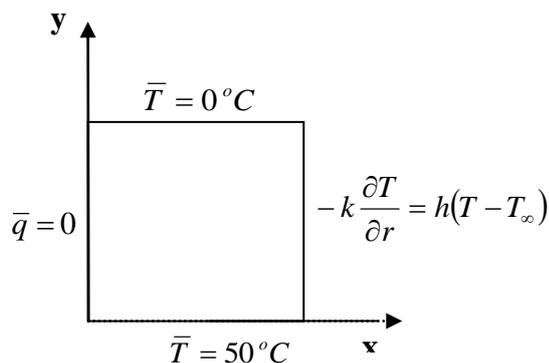


Figura 5.4 - Condições de contorno para o 2º exemplo

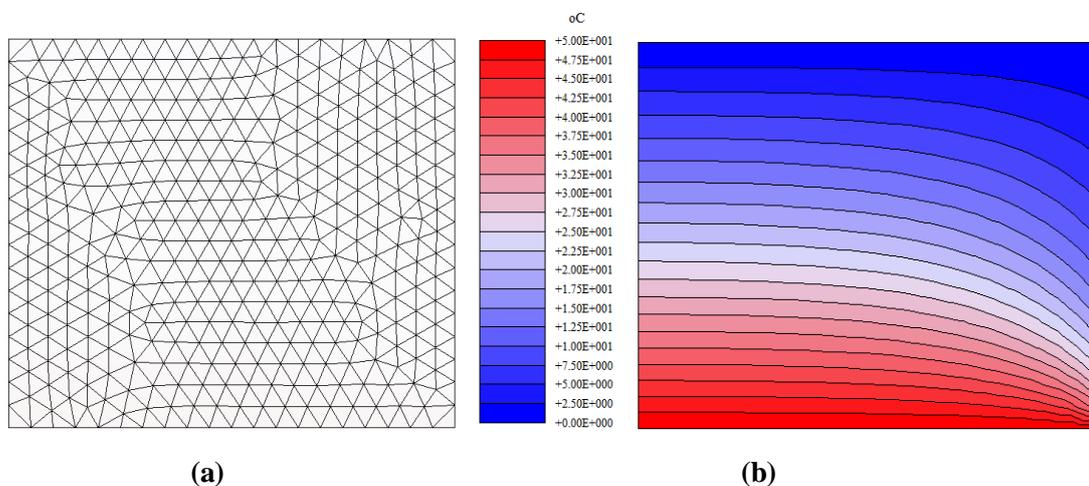


Figura 5.5 – (a) Malha triangular não-estruturada com 403 nós e 730 elementos; (b) Isofaixas de temperatura com escala em (°C) para o instante $n = 1200 \Delta t$

A Tabela 5.3, a Tabela 5.4 e a Tabela 5.5 mostram as análises de sensibilidade para a temperatura média da placa em regime transiente no instante $t = 1200 \Delta t$ (instante de tempo escolhido aleatoriamente). Foram realizadas comparações entre os resultados obtidos através do método direto e os métodos perturbativos de 1ª e 2ª ordem para a massa especí-

fica, condutividade térmica e coeficiente de transferência de calor. As sensibilidades foram: 13,91% para a massa específica; 19,91% para a condutividade; e 5,54% para o coeficiente de transferência de calor. Logo, a condutividade apresentou maior sensibilidade em relação aos demais, o que se confirma por apresentar os maiores erros relativos.

Com relação à massa específica, os erros relativos máximos encontrados foram de 0,18% para a 1ª ordem e de 0,17% para 2ª ordem. Os erros para a condutividade foram de 2,00% e 1,99% para 1ª e 2ª ordens, respectivamente. Para o coeficiente de transferência de calor, os erros máximos para 1ª e 2ª ordens são de 0,56% para ambos.

Tabela 5.3 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (2º exemplo – temp. média)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
7249,50	- 10	19,7285	19,7585	0,15	19,7577	0,15
7652,25	- 5	19,5928	19,6080	0,08	19,6076	0,08
8055,00	-	19,4575	19,4575	-	19,4575	-
8457,75	+ 5	19,3227	19,3070	0,08	19,3074	0,08
8860,50	+ 10	19,1884	19,1566	0,17	19,1574	0,16

Tabela 5.4 - Análise de sensibilidade para a condutividade (2º exemplo – temperatura média)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
13,59	- 10	19,0514	19,1566	0,55	19,1239	0,38
14,35	- 5	19,2638	19,3070	0,22	19,3028	0,20
15,10	-	19,4575	19,4575	-	19,4575	-
15,86	+ 5	19,6395	19,6080	0,16	19,6243	0,08
16,61	+ 10	19,8067	19,7585	0,24	19,7911	0,08

**Tabela 5.5 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (2º exemplo
– temperatura média)**

Coef. de transferência de calor ($W/m^2 \cdot ^\circ C$)	Δ (%)	MD ($^\circ C$)	MP – 1ª ordem ($^\circ C$)	Erro (%)	MP – 2ª ordem ($^\circ C$)	Erro (%)
9,00	- 10	19,5679	19,5374	0,16	19,5393	0,15
9,50	- 5	19,5114	19,4975	0,07	19,4984	0,07
10,00	-	19,4575	19,4575	-	19,4575	-
10,50	+ 5	19,4061	19,4176	0,06	19,4166	0,05
11,00	+ 10	19,3570	19,3776	0,11	19,3757	0,10

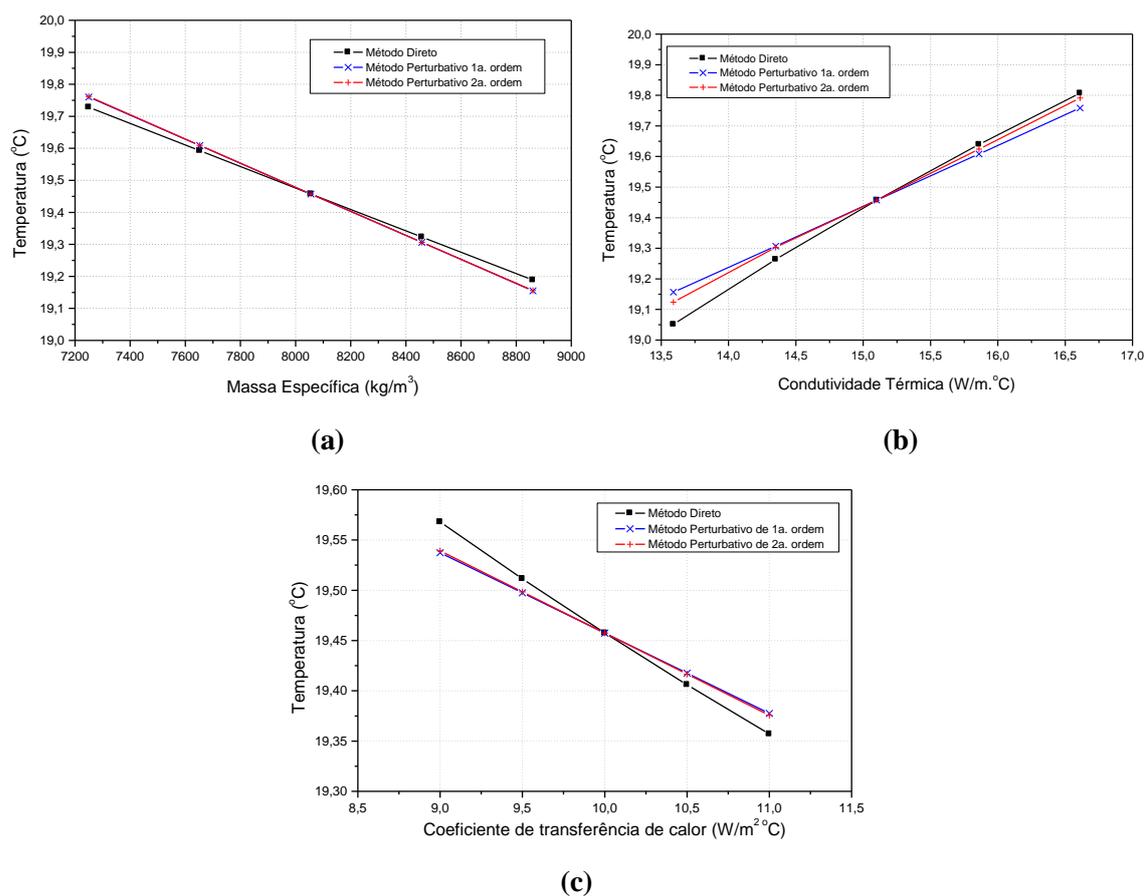


Figura 5.6 - Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura média do 2º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) condutividade térmica; (c) coef. de transf. de calor

5.3. PLACA DELGADA COMPOSTA COM GERAÇÃO INTERNA DE CALOR

Este exemplo foi adaptado de Incropera & DeWitt (1998) e analisa o perfil de temperatura em uma placa infinita delgada composta por dois materiais de 6,0 mm de altura. A primeira placa é feita de dióxido de urânio (UO_2) com 6,0 mm de largura com geração de calor a uma taxa volumétrica constante de $g = 2 \times 10^8 \text{ W/m}^3$. A segunda placa é feita de um material isolante com 3,0 mm de largura e está exposto a um ambiente de temperatura $T_\infty = 27^\circ\text{C}$. O coeficiente de transferência de calor com o ambiente é de $h = 2000 \text{ W/m}^2\text{C}$. A condutividade térmica do UO_2 é $k_1 = 2 \text{ W/m}^\circ\text{C}$, sua massa específica é $\rho_1 = 10500 \text{ kg/m}^3$ e seu calor específico, $c_1 = 1033 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$. A condutividade térmica do isolante é $k_2 = 25 \text{ W/m}^\circ\text{C}$, sua massa específica é $\rho_2 = 6504 \text{ kg/m}^3$ e seu calor específico, $c_2 = 1422 \text{ J/kg}^\circ\text{C}$. A Figura 5.7 apresenta as condições de contorno do problema e na Figura 5.8 está representada a malha não estruturada utilizada na análise numérica e as isofaixas de temperatura indicando a distribuição de temperatura da placa. Para a solução numérica, foi utilizada uma malha triangular isotrópica não-estruturada com 183 nós e 314 elementos. Considerando o critério de estabilidade, o intervalo de tempo (Δt) adotado para o problema foi de $2 \times 10^{-2} \text{ s}$ e o tempo total analisado de 100s ($t = 5000 \Delta t$) para a temperatura, escolhido aleatoriamente.

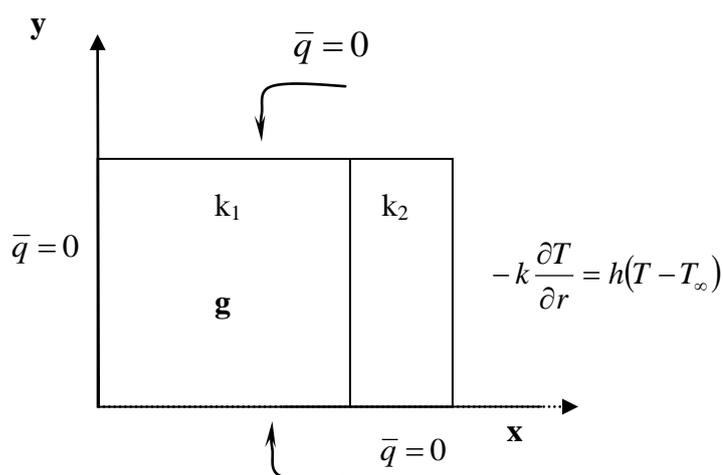


Figura 5.7 – Condições de contorno para o 3º exemplo

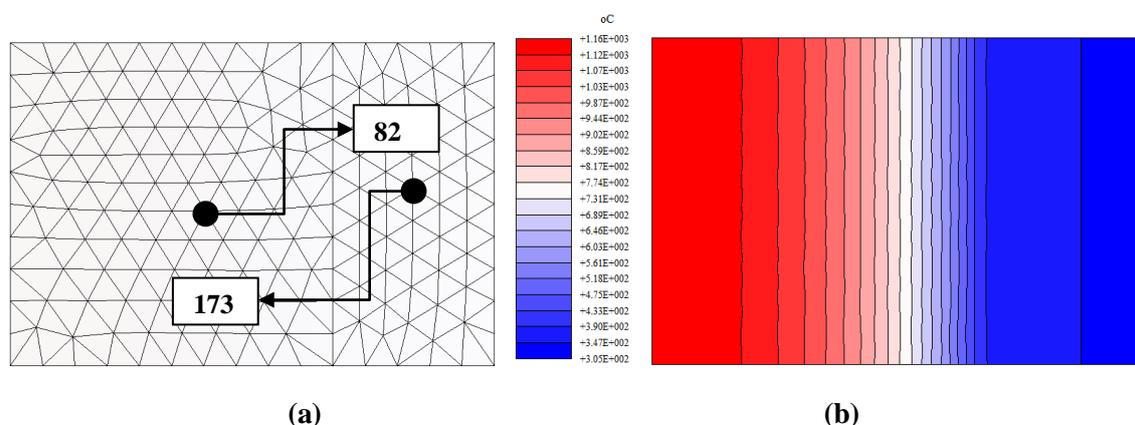


Figura 5.8 – (a) Malha triangular não-estruturada com 183 nós e 314 elementos com os nós 82 e 173 em destaque; (b) Isofaixas de temperatura com escala em ($^{\circ}\text{C}$) para $t = 2000 \Delta t$

A Tabela 5.5, a Tabela 5.7, a Tabela 5.8 e a Tabela 5.9 mostram a análise de sensibilidade para a temperatura média da primeira. Foi realizada uma comparação entre os valores obtidos através do método direto e dos métodos perturbativos de 1^a e 2^a ordem (Figura 5.9).

Comparando os resultados obtidos para a massa específica, considerando variações máximas de 1% no seu valor, os erros máximos foram de 0,08% para a 1^a ordem e de 0,25% para a 2^a ordem. Para o calor específico, considerando variações máximas de 10% no seu valor, os erros máximos foram de 1,33% para a 1^a ordem e de 1,13% para a 2^a ordem.

Para uma diferença máxima de 10% no valor da condutividade térmica, os resultados dos métodos perturbativos de 1^a e 2^a ordem foram muito semelhantes, com erro máximo de 1,58% para ambos os métodos. Em relação ao coeficiente de transferência de calor, diferença máxima de 10% no valor do parâmetro, o erro máximo para o método perturbativo de 1^a ordem foi de 1,04%. Para o método perturbativo de 2^a ordem, o erro máximo foi de 0,08%. Neste caso, o método de 2^a ordem reduziu o erro relativo numa proporção muito maior que nos demais casos apresentados. Não foi possível explicar esta diferença.

Para este exemplo, as sensibilidades são: 33,70% para a massa específica; 38,35% para o calor específico; 15,79% para a condutividade; e 9,71% para o coeficiente de trans-

ferência de calor. Os parâmetros de maior sensibilidade para o problema são o calor específico e a massa específica.

Tabela 5.6 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (3º exemplo – temp. média)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
9450,00	- 10	1022,4424	1023,3047	0,08	1023,3089	0,08
9975,00	- 5	1002,1466	1003,2983	0,11	1003,2994	0,12
10500,00	-	983,2920	983,2920	-	983,2920	-
11025,00	+ 5	965,7355	963,2856	0,25	963,2867	0,25
11550,00	+ 10	949,3517	943,2793	0,64	943,2835	0,64

Tabela 5.7 - Análise de Sensibilidade para o calor específico (3º exemplo – temp. média)

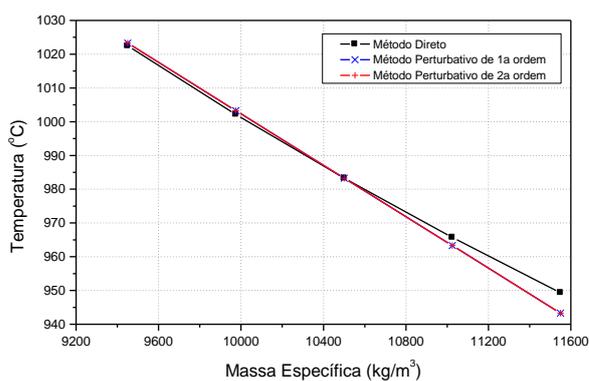
Calor específico (J/kg . °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
929,70	- 10	1022,4424	1023,3047	0,08	1023,3051	0,08
981,35	- 5	1002,1466	1003,2983	0,11	1003,2984	0,11
1033,00	-	983,2920	983,2920	-	983,2920	-
1084,65	+ 5	965,7355	963,2856	0,25	963,2857	0,25
1136,30	+ 10	949,3517	943,2793	0,64	943,2797	0,64

Tabela 5.8 - Análise de sensibilidade para a condutividade (3º exemplo – temperatura média)

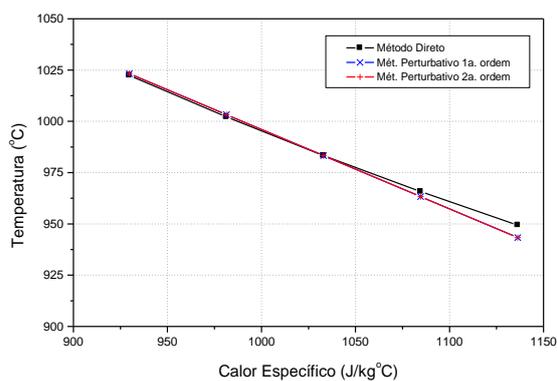
Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1,80	- 10	999,1899	993,4920	0,57	995,0644	0,41
1,90	- 5	991,0553	988,3920	0,27	989,1782	0,19
2,00	-	983,2920	983,2920	-	983,2920	-
2,10	+ 5	975,8734	978,1920	0,24	977,4058	0,16
2,20	+ 10	968,7756	973,0920	0,45	971,5196	0,28

**Tabela 5.9 - Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (3º exemplo
– temperatura média)**

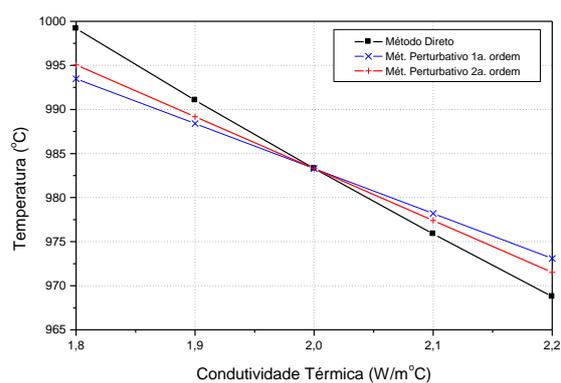
Coef. de transferência de calor (W/m ² .°C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1800,00	- 10	993,7775	983,4403	1,04	994,5426	0,08
1900,00	- 5	988,3684	983,3662	0,51	988,9173	0,06
2000,00	-	983,2920	983,2920	-	983,2920	-
2100,00	+ 5	978,5196	983,2178	0,48	977,6667	0,09
2200,00	+ 10	974,0254	983,1436	0,94	972,0414	0,20



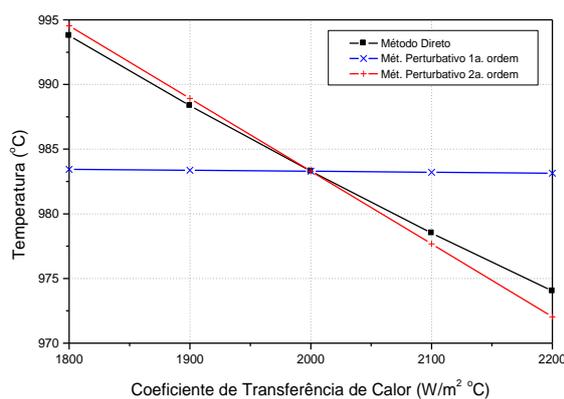
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.9 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura média do 3º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) calor específico; (c) condutividade térmica; (d) coeficiente de transferência de calor

Quando a temperatura local foi o funcional considerado, consideraram-se dois pontos: o nó 82 pertencente à primeira placa e o nó 173 localizado na segunda placa (Figura 5.8). As análises foram realizadas no instante $t = 2000\Delta t$, escolhido de forma aleatória.

A Tabela 5.10 mostra a análise de sensibilidade para a temperatura local no nó 82, considerando variações de $\pm 10\%$ na massa específica da primeira placa. Os resultados do método perturbativo de 1ª ordem para a massa específica apresentaram erro relativo máximo de 3,97%. Para o método de 2ª ordem, o maior erro foi de 0,66%. Quando o parâmetro variado é o calor específico (Tabela 5.11), os erros máximos foram de 3,96% e 3,92% para a 1ª e 2ª ordem, respectivamente.

Com relação à condutividade (Tabela 5.12), ambos os métodos apresentaram resultados semelhantes com erros máximos de 1,56%. Para a análise variando o coeficiente de transferência de calor (Tabela 5.13), o método de 1ª ordem apresentou bons resultados com erro relativo máximo de 0,70%, enquanto que o de 2ª ordem apresentou erro máximo de 0,58%. A Figura 5.10 apresenta os gráficos comparativos para as análises de sensibilidade da massa específica, do calor específico, da condutividade e do coeficiente de transferência de calor.

As sensibilidades do problema são: 40,19% para a massa específica e o calor específico; 15,64% para a condutividade; e 6,91% para o coeficiente de transferência de calor. Foi possível observar que a massa específica e o calor específico são os parâmetros que apresentaram maior sensibilidade.

Tabela 5.10 – Análise de sensibilidade para a massa específica (3º exemplo - temp local nó 82)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
9450,00	- 10	1046,9800	1005,4011	3,97	1031,5449	1,47
9975,00	- 5	1025,0200	1005,1156	1,94	1018,1874	0,67
10500,00	-	1004,8300	1004,8300	-	1004,8300	-
11025,00	+ 5	986,2120	1004,5444	1,86	991,4726	0,53
11550,00	+ 10	968,9880	1004,2589	3,64	978,1151	0,94

Tabela 5.11 – Análise de sensibilidade para o calor específico (3º exemplo – temp. local nó 82)

Calor específico (J/kg . °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
929,70	- 10	1046,9800	1005,5586	3,96	1005,9399	3,92
981,35	- 5	1025,0200	1005,1943	1,93	1005,3850	1,92
1033,00	-	1004,8300	1004,8300	-	1004,8300	-
1084,65	+ 5	986,2120	1004,4657	1,85	1004,2750	1,83
1136,30	+ 10	968,9880	1004,1014	3,62	1003,7201	3,58

Tabela 5.12 – Análise de sensibilidade para a condutividade (3º exemplo – temp. local nó 82)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1,80	- 10	1020,9500	1005,3610	1,53	1005,3278	1,53
1,90	- 5	1012,6900	1005,0955	0,75	1005,0872	0,75
2,00	-	1004,8300	1004,8300	-	1004,8300	-
2,10	+ 5	997,3450	1004,5645	0,72	1004,5562	0,72
2,20	+ 10	990,1970	1004,2990	1,42	1004,2658	1,42

Tabela 5.13 – Análise de sensibilidade para o coeficiente de transferência de calor (3º exemplo - temperatura local nó 82)

Coef. de transfe- rência de calor (W/m². °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1800,00	- 10	1011,9400	1020,8152	0,88	1006,0713	0,58
1900,00	- 5	1008,3000	1012,8226	0,45	1005,4506	0,28
2000,00	-	1004,8300	1004,8300	-	1004,8300	-
2100,00	+ 5	1001,5400	996,8374	0,47	1004,2094	0,27
2200,00	+ 10	998,4040	988,8448	0,96	1003,5887	0,52

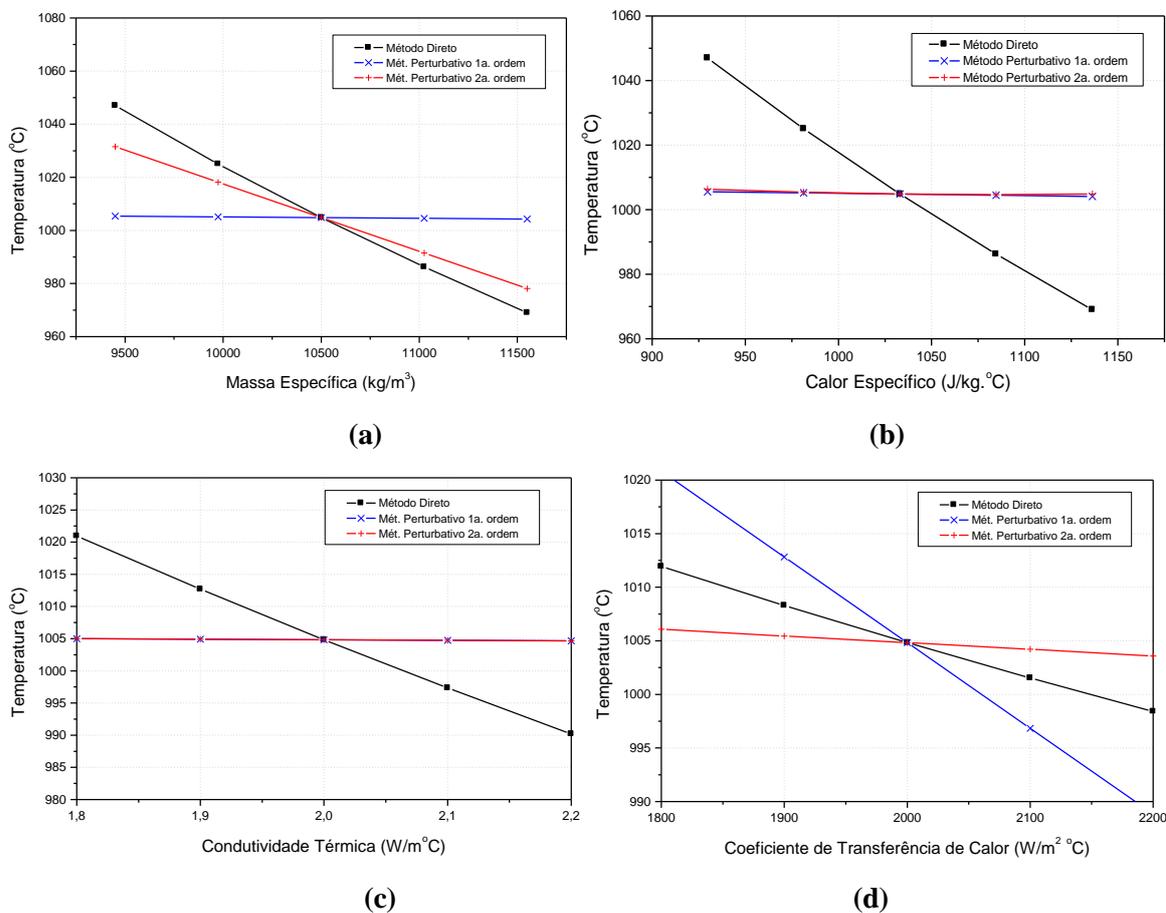


Figura 5.10 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura do nó 82 do 3º exemplo em relação à: (a) massa específica; (b) calor específico; (c) condutividade térmica; (d) coeficiente de transferência de calor

Considerando como funcional resposta a temperatura do nó 173 que está localizado na segunda placa, as análises foram feitas variando as propriedades físicas da primeira placa.

Variando as propriedades da primeira placa, obtêm-se as análises descritas na Tabela 5.14, Tabela 5.15, Tabela 5.16 e Tabela 5.17, respectivamente, para a massa específica, calor específico, condutividade térmica e coeficiente de transferência de calor. Para a massa específica (variação de 1,0%), o erro máximo do método de 1ª ordem foi de 0,23% e para o método de 2ª ordem foi de 0,02%. Para o calor específico, o erro máximo do método de 1ª ordem foi de 2,35%. Os resultados de 2ª ordem apresentaram erro máximo de 2,14%.

Para a variação da condutividade térmica, o erro máximo foi de 3,16% para os dois métodos.

Com relação ao coeficiente de transferência de calor, o erro máximo para o método de 1ª ordem foi de 5,74%. O método de 2ª ordem apresentou erro máximo de 5,01. A Figura 5.11 apresenta os gráficos comparativos para as análises de sensibilidade do nó 173 considerando variações nas propriedades da primeira placa.

Para o nó 173, as sensibilidades são: 22,24% para a massa específica; 23,24% para o calor específico; 29,97% para a condutividade; e 58,79% para o coeficiente de transferência de calor. Logo, o parâmetro que tem maior sensibilidade é o coeficiente de transferência de calor.

Tabela 5.14 – Análise de sensibilidade a massa específica da primeira placa (3º exemplo - temperatura local nó 173)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
10395,00	- 10	356,9580	356,1398	0,23	356,9004	0,02
10447,50	- 5	356,5580	356,1509	0,11	356,5312	0,01
10500,00	-	356,1620	356,1620	-	356,1620	-
10552,50	+ 5	355,7700	356,1731	0,11	355,7928	0,01
10605,00	+ 10	355,3810	356,1842	0,23	355,4236	0,01

Tabela 5.15 – Análise de sensibilidade para o calor específico da primeira placa (3º exemplo - temperatura local nó 173)

Calor específico (J/kg . °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
929,70	- 10	364,8690	356,3122	2,35	357,0723	2,14
981,35	- 5	360,3000	356,2371	1,13	356,6172	1,02
1033,00	-	356,1620	356,1620	-	356,1620	-
1084,65	+ 5	352,4010	356,0869	1,05	355,7068	0,94
1136,30	+ 10	348,9720	356,0118	2,02	355,2517	1,80

Tabela 5.16 – Análise de sensibilidade para a condutividade da primeira placa (3º exemplo - temperatura local nó 173)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1,80	- 10	345,2570	356,1826	3,16	356,1828	3,16
1,90	- 5	350,8250	356,1723	1,52	356,1724	1,52
2,00	-	356,1620	356,1620	-	356,1620	-
2,10	+ 5	361,2840	356,1517	1,42	356,1517	1,42
2,20	+ 10	366,2070	356,1414	2,75	356,1415	2,75

Tabela 5.17 – Análise de sensibilidade o coeficiente de transferência de calor (3º exemplo - temperatura local nó 173)

Coef. de transfe- rência de calor (W/m². °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1800,00	- 10	377,8110	356,1235	5,74	358,8824	5,01
1900,00	- 5	366,6310	356,1428	2,86	357,5222	2,48
2000,00	-	356,1620	356,1620	-	356,1620	-
2100,00	+ 5	346,3440	356,1812	2,84	354,8018	2,44
2200,00	+ 10	337,1230	356,2005	5,66	353,4416	4,84

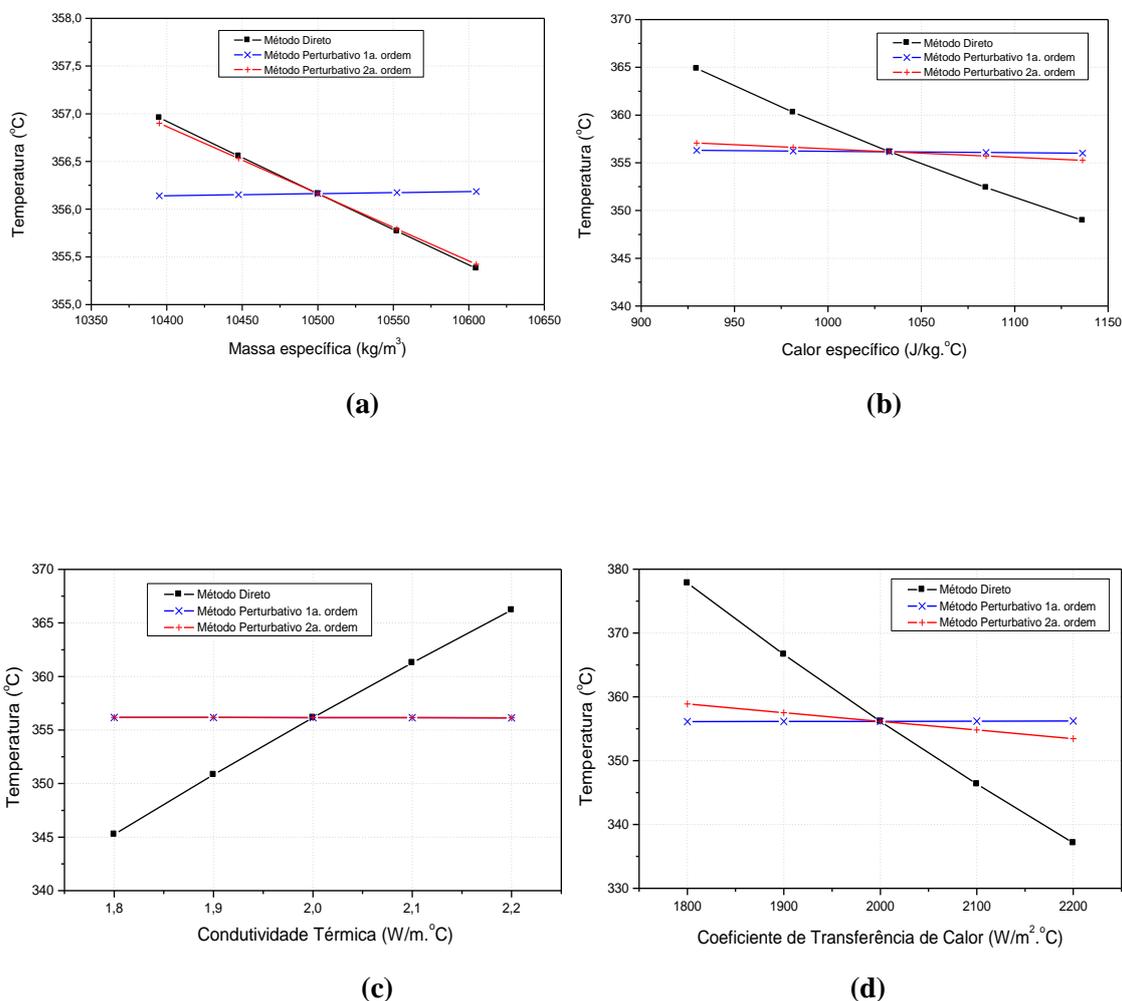


Figura 5.11 – Comparação entre os Métodos Direto e Perturbativos para a temperatura do nó 173 do 3º exemplo variando os parâmetros da primeira placa: **(a)** massa específica; **(b)** calor específico; **(c)** condutividade térmica; **(d)** coeficiente de transferência de calor

5.4. ANÁLISE TÉRMICA NO OLHO HUMANO COM A PRESENÇA DE IMPLANTE RETINIANO DO TIPO EPIRETINAL

Este exemplo analisa a temperatura média na retina em função de um aquecimento provocado pela presença de um implante na retina. Silva (2004) fez análises numéricas dos perfis de temperatura no olho humano com e sem a presença de implantes na retina do tipo subretinal e epirretinal.

Estes implantes são pequenos *chips*, dotados de eletrodos capazes de estimular eletricamente áreas em torno do implante e, assim, ativar o sistema visual. Estes meios foram recentemente desenvolvidos com o objetivo de restaurar o sistema visual de pessoas que sofrem de doenças degenerativas da retina, tais como a retinose pigmentar (RP) e a degeneração macular (AMD). Ambas provocam a degeneração das células fotorreceptoras tornando, assim, o sistema visual insensível à luz (Peachey & Chow, 1999).

O olho será representado por cinco regiões de propriedades termofísicas diferentes: a córnea, o humor aquoso, a lente, o humor vítreo e a retina (Figura 5.12).

As condições de contorno e condições iniciais são:

I. Transferência de calor por convecção entre superfície da córnea e o ambiente externo;

II. Transferência de calor por convecção entre a retina e o coróide para simular a perfusão sanguínea;

III. Temperatura inicial do olho será considerada igual a $36,5^{\circ}\text{C}$.

Os valores das propriedades termofísicas dos tecidos envolvidos no problema estão descritos na Tabela 5.18. Os valores dos coeficientes de transferência de calor adotados foram de $20 \text{ W/m}^2\cdot^{\circ}\text{C}$ entre a córnea e o meio ambiente; e de $65 \text{ W/m}^2\cdot^{\circ}\text{C}$ entre a retina e o corpo humano (Guimarães, 2003).

Para esta análise será considerado que a retina possui um dispositivo, do tipo epirretinal, cujo material é o silício e que libera impulsos elétricos continuamente. A potência máxima dissipada na retina é de 46 mW (Silva, 2004).

Para a análise numérica, foi adotada uma malha triangular não-estruturada com 2760 nós e 5308 elementos que está apresentada pela Figura 5.13 com a localização do implante em destaque e as isofaixas de temperatura obtidas pelo cálculo direto para o instante $t = 50\,000 \Delta t$, escolhido de forma aleatória. Esta malha foi adotada baseada no estudo de convergência realizado por Silva (2004). O intervalo de tempo adotado foi de $1,7 \times 10^{-6} \text{ s}$.

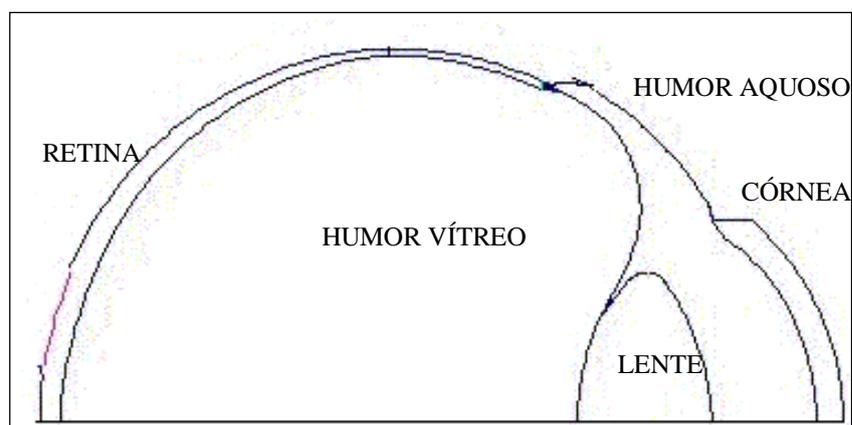


Figura 5.12 – Domínio analisado

Tabela 5.18 – Propriedades termofísicas do olho e do implante

<i>Tecido</i>	k (W/m°C) ^(a)	ρ (kg/m ³) ^(a)	c (J/kg°C) ^(a)	ω (s ⁻¹) ^(b)
Córnea	0,580	1050	4178	---
Humor aquoso	0,580	1000	3997	---
Cristalino	0,400	1050	3000	---
Humor vítreo	0,603	1000	4178	---
Retina	0,628	1000	4190	0,012
Silício	148,0	2330	712	---

^(a)Silva (2004)

As sensibilidades dos parâmetros para a temperatura média da retina são muito pequenas: 0,0066% para a massa específica; 0,0005% para a condutividade; 0,0003% para a perfusão; e de 0,0051% para o coeficiente de transferência de calor. As análises de sensibilidade devidas às variações de parâmetros da retina: massa específica, condutividade térmica, taxa de perfusão sanguínea e coeficiente de transferência de calor são apresentadas pela Tabela 5.19, pela Tabela 5.20 e pela Tabela 5.21, respectivamente.

Os resultados mostram que ambos os métodos perturbativos de 1ª e 2ª ordens apresentam erros relativos pequenos quando comparados com o método direto. Os pequenos valores dos coeficientes demonstram a pequena influência destes parâmetros na solução final do problema, fato esperado através da observação dos resultados do método direto.

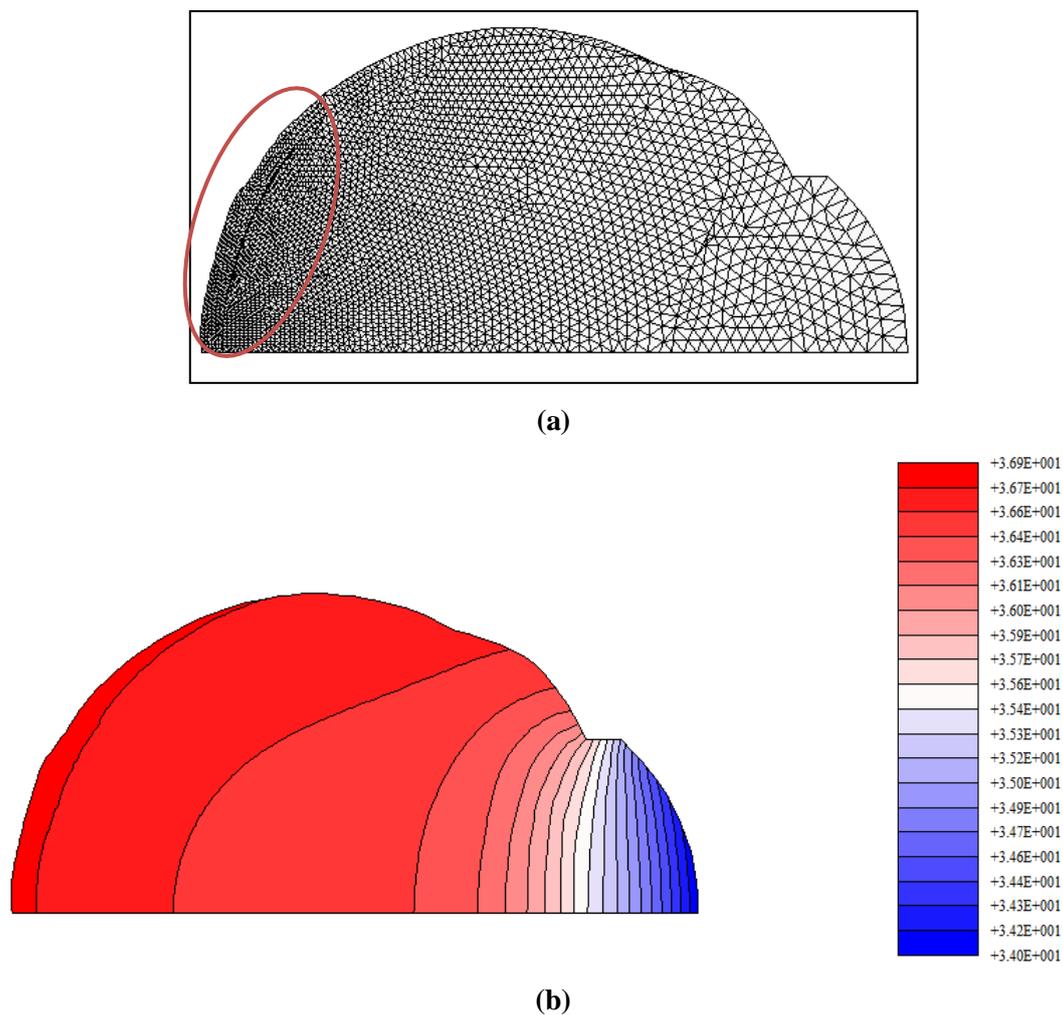


Figura 5.13 – (a) Malha triangular não-estruturada com 2760 nós e 5308 elementos; (b) Isofaixas de temperatura com escala em ($^{\circ}\text{C}$) para o instante $n = 50000 \Delta t$

Tabela 5.19 - Análise de sensibilidade para a condutividade (retina)

Condutividade (W/m. $^{\circ}\text{C}$)	Δ (%)	MD ($^{\circ}\text{C}$)	MP – 1 ^a ordem ($^{\circ}\text{C}$)	Erro (%)	MP – 2 ^a ordem ($^{\circ}\text{C}$)	Erro (%)
0,565	- 10	36,7276	36,7274	0,0004	36,7275	0,0004
0,597	- 5	36,7276	36,7275	0,0002	36,7275	0,0002
0,628	-	36,7276	36,7276	-	36,7276	-
0,659	+ 5	36,7276	36,7277	0,0002	36,7277	0,0002
0,691	+ 10	36,7276	36,7278	0,0004	36,7278	0,0005

Tabela 5.20 - Análise de sensibilidade para taxa de perfusão sanguínea (retina)

Taxa de perfusão (s ⁻¹)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,0108	- 10	36,7276	36,7270	0,0017	36,7270	0,0017
0,0114	- 5	36,7276	36,7273	0,0008	36,7273	0,0008
0,0120	-	36,7276	36,7276	-	36,7276	-
0,0126	+ 5	36,7276	36,7279	0,0008	36,7279	0,0008
0,0132	+ 10	36,7276	36,7282	0,0017	36,7282	0,0017

Tabela 5.21 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (retina)

Coef. de transf. De calor (W/m ² .°C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
63,70	- 2	36,7276	36,7277	0,0003	36,7277	0,0003
64,35	- 1	36,7276	36,7276	0,0002	36,7276	0,0001
65,00	-	36,7276	36,7276	-	36,7276	-
65,65	+ 1	36,7276	36,7276	0,0002	36,7276	0,0001
66,30	+ 2	36,7276	36,7275	0,0003	36,7275	0,0003

De acordo com os resultados obtidos, o método perturbativo de 1ª ordem se mostrou satisfatório na determinação das temperaturas dos exemplos mostrados em função de variações nos diversos parâmetros. Os resultados se mostraram coerentes e com pequenos erros relativos. Foi possível observar que o método apresenta erros maiores para as análises de temperatura local do que para as de temperatura média. Este fato está de acordo com o esperado uma vez que demonstra a maior instabilidade das respostas quando se analisa a temperatura local. Comparando os erros relativos entre os diferentes parâmetros analisados, é possível estimar quais parâmetros tem maior influência nos resultados da resposta do problema.

Para o método perturbativo de 2ª ordem, foi possível observar que este apresenta maior sensibilidade a grandes variações nos parâmetros, porém os erros relativos foram menores que os de 1ª ordem na maioria dos casos analisados. Para determinados parâmetros como a condutividade, os erros para os dois métodos foram semelhantes.

6. PROBLEMA ANALISADO

Este capítulo é destinado a apresentar análises de sensibilidade em um problema de hipertermia causada por uma fonte de laser no tratamento de um tumor de duodeno. Este problema foi analisado por Guimarães (2003), onde foram feitas as simulações numéricas dos perfis de temperatura resultantes desta fonte de laser. Para isto foi utilizada uma ferramenta computacional desenvolvida com base em uma formulação numérica via método dos volumes finitos em malhas não estruturadas.

6.1. DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O problema consiste de um corte transversal do abdômen na região do duodeno onde está localizado um tumor não-operável de aproximadamente 2 cm de diâmetro. Este tumor será aquecido por uma sonda de laser Nd:YAG.

A Figura 6.14 mostra o corte transversal do abdômen e os tecidos que compõem a região de interesse: o tumor, um par de grandes vasos sanguíneos (a veia cava inferior, a aorta abdominal) e alguns tecidos e órgãos (pâncreas, estômago, rins, etc.).

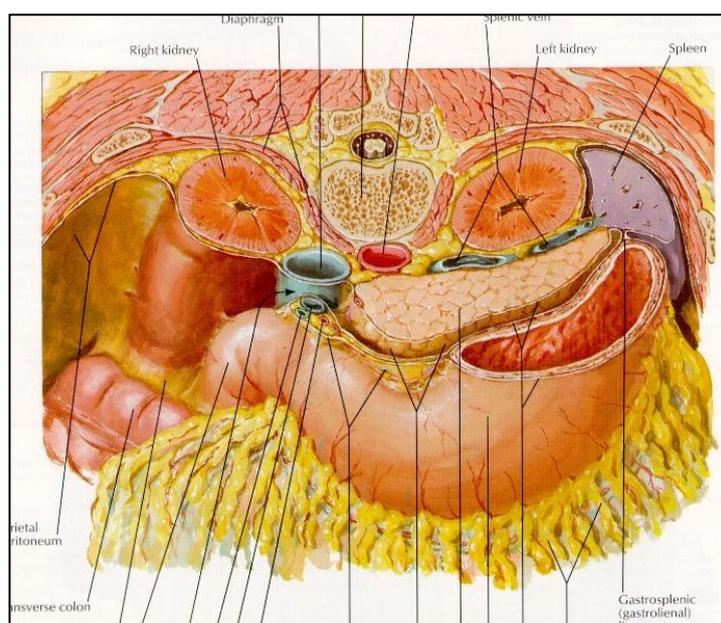


Figura 6.14 - Corte transversal abdominal (Netter & Dalley II, 1997).

Para simular a aplicação de laser no tumor localizado no duodeno e para considerar a presença de dois grandes vasos sanguíneos na proximidade, algumas hipóteses simplificadoras foram feitas. As principais hipóteses consideradas foram:

- I. A região próxima ao tumor é constituída de um único tecido, ou seja, as propriedades térmicas consideradas são de um único órgão;
- II. O maior órgão próximo ao tumor é o pâncreas. Considerou-se por simplicidade que o mesmo ocupe toda a região marcada como tecido, na Figura 6.15 a seguir;
- III. Para os parâmetros termofísicos, como ρ , c e do termo de perfusão sanguínea (exceto a condutividade), do pâncreas, foram tomados os valores correspondentes ao fígado;
- IV. Para o tumor, foram consideradas as propriedades como sendo de um tumor hepático;
- V. Foi considerado que o paciente foi submetido à dieta zero (estômago vazio) e que o fluxo de ar que passa pelo estômago é laminar;
- VI. Nos vasos sanguíneos, o escoamento do sangue é considerado laminar com número de Nusselt (Nu) igual a 3,66 (Incropera & Witt, 1996).

As condições de contorno e condições iniciais são:

- I. Nos vasos sanguíneos será considerada troca de calor por convecção. A temperatura do sangue é considerada igual a 37°C;
- II. No estômago e nas bordas do tumor será considerada troca de calor por convecção com o ar, a 37°C;
- III. Nos demais contornos a temperatura será considerada fixa e igual a 37°C;
- IV. Como condição inicial, será considerada que toda a região analisada estará a 37°C.

O tecido e o tumor apresentam fonte térmica distribuída sobre todo o domínio devido à perfusão sanguínea (fluxo sanguíneo). As propriedades adotadas são descritas na Tabela 6.22.

Os coeficientes de transferência de calor da veia cava e da aorta são, respectivamente, $h_c = 59,716 \text{ W/m}^2 \text{ K}$ e $h_a = 73,996 \text{ W/m}^2 \text{ K}$, calculados pelo uso do

número de Nusselt, considerando escoamento laminar. Os diâmetros da veia cava e aorta são, respectivamente, 2,85cm e 2,3cm (Milnor, 1990). De modo semelhante, foi calculado o coeficiente de transferência de calor para o estômago como $h_e = 9,415 W/m^2 K$ (Guimarães, 2003).

Tabela 6.22 - Propriedades térmicas para o tumor, tecido e sangue.

Tecido Propriedades	Tumor (Rivolta et al., 1999)	Tecido (Duck, 1997; Skinner et al., 1998)	Sangue (Rivolta et al., 1999)
Condutividade Térmica	$k_{tumor} = 0,7 W/m K$	$k = 0,588 W/m K$	$k_s = 0,465 W/m K$
Densidade Mássica	$\rho_{tumor} = 1040 kg/m^3$	$\rho = 1050 kg/m^3$	$\rho_s = 1060 kg/m^3$
Calor Específico	$c_{tumor} = 3900 J/kg K$	$c = 3600 J/kg K$	$c_s = 3643 J/kg K$
Perfusão Sangüínea	$\omega_{tumor} = 3,99 \times 10^{-3} s^{-1}$	$\omega = 1,77 \times 10^{-2} s^{-1}$	----

O laser utilizado durante a hipertermia foi o Nd:YAG, cujo comprimento de onda é de $\lambda = 1064 nm$ com um feixe de diâmetro 2mm (Welch, 1985). De acordo com as simplificações feitas, o coeficiente de absorção do laser utilizado foi o correspondente ao fígado, ou seja, $\beta = 1250 m^{-1}$ (Welch, 1985). Com base nos dados disponíveis na literatura (Fanta et al., 1989; Sultan et al., 1989; Ghilain et al., 1994), a potência do laser utilizada foi de 100W. A intensidade resultante do feixe é obtida através da razão entre a potência e a área do feixe sendo, portanto, $I_0 = 3,18 \times 10^7 W/m^2$. O termo de geração de calor devido à fonte de laser é descrito na próxima secção.

O domínio escolhido para ser analisado foi obtido a partir da Figura 6.14 através de um programa de CAD. A Figura 6.15 mostra o domínio de interesse após a adoção das hipóteses simplificadoras detalhadas anteriormente. Os pontos 1, 2 e 3 representam os pontos de aplicação do laser.

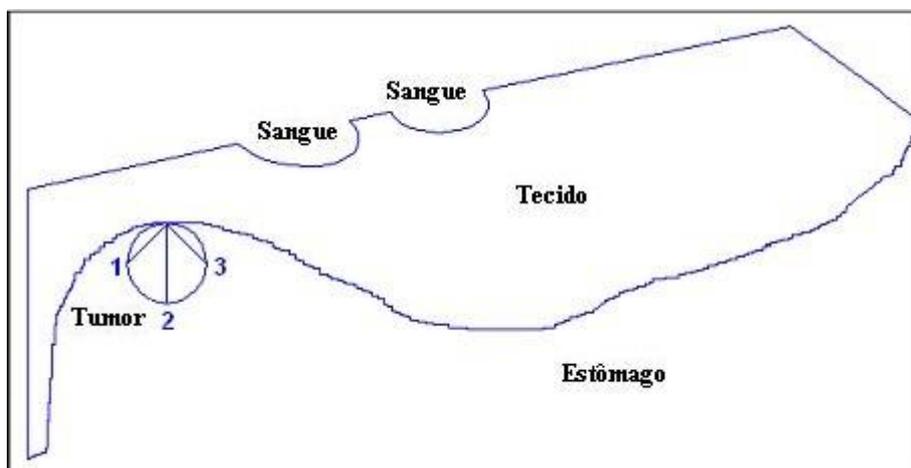


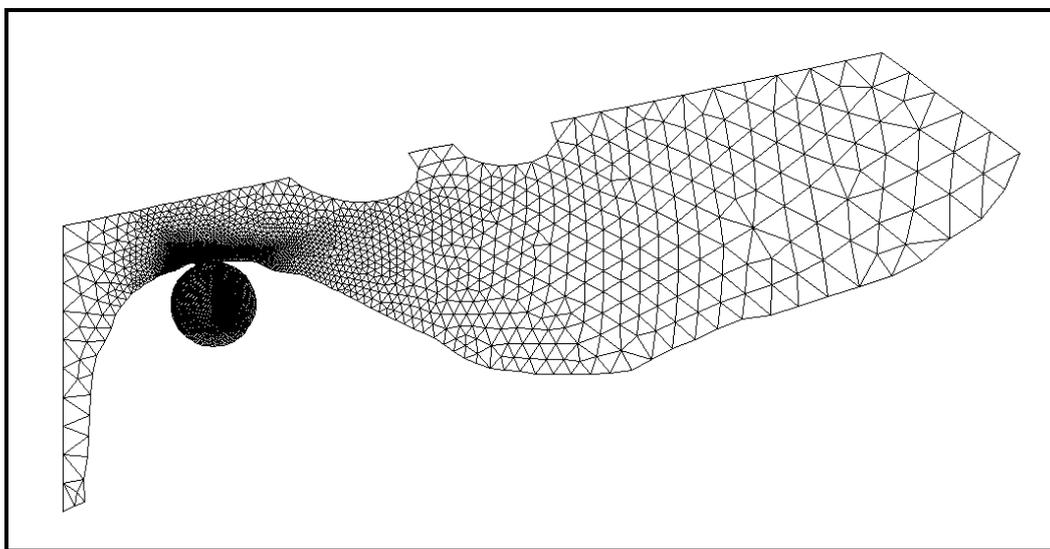
Figura 6.15 - Domínio extraído da Figura 6.14 através de um programa de CAD.

Para a análise numérica, foi uma malha triangular não-estruturada com 4304 nós e 8273 elementos, que está apresentada pela Figura 6.16. A malha adotada foi baseada no estudo de convergência realizado por Guimarães (2003). O intervalo de tempo adotado foi de 0,05 s.

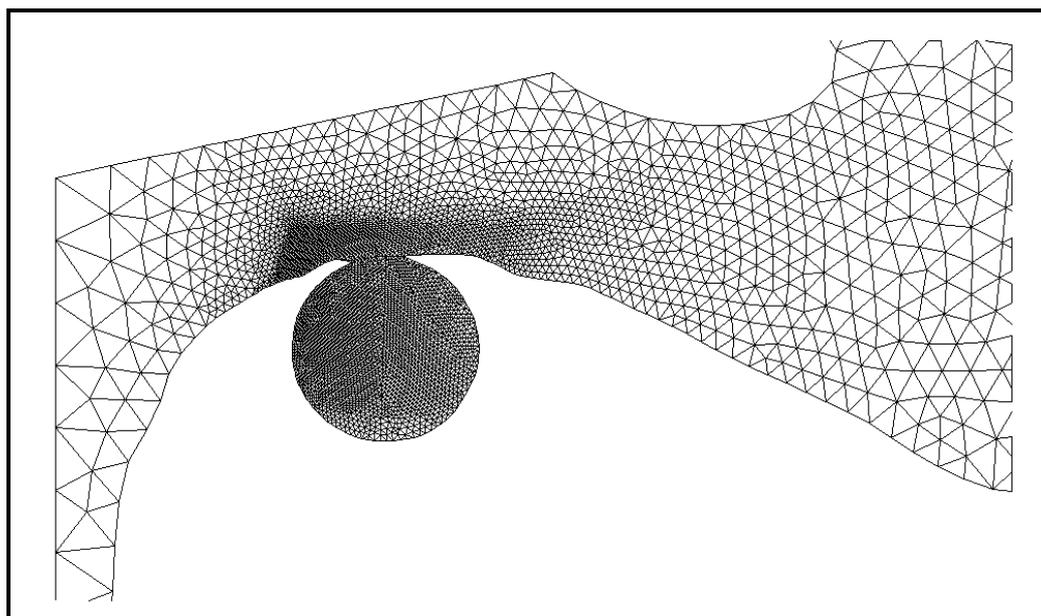
O exemplo analisado é puramente acadêmico, mas os critérios utilizados foram retirados de casos clínicos apresentados na literatura (Daikuzono et al., 1988; Ishikawa et al., 2002). Desta forma a aplicação do laser Nd:YAG feita sobre a superfície do tumor na região do duodeno, seguiu o procedimento conforme apresentado a seguir:

- I. A sessão de aplicação do laser é composta por dois ciclos;
- II. Em cada ciclo, cada ponto passa 18 segundos recebendo o feixe de laser;
- III. Há um intervalo de 2 segundos ao se passar de um ponto de aplicação do laser para o ponto seguinte;
- IV. Entre os ciclos há também, um intervalo de 2 segundos.

A Figura 6.4 mostra as isofaixas de temperatura nos instantes $t = 60s$ e $t = 120s$, que correspondem ao término do primeiro e segundo ciclo de aplicação, respectivamente.



(a)



(b)

Figura 6.16 – (a) Malha não-estruturada utilizada para a simulação; (b) *Zoom* da malha na região de interesse.

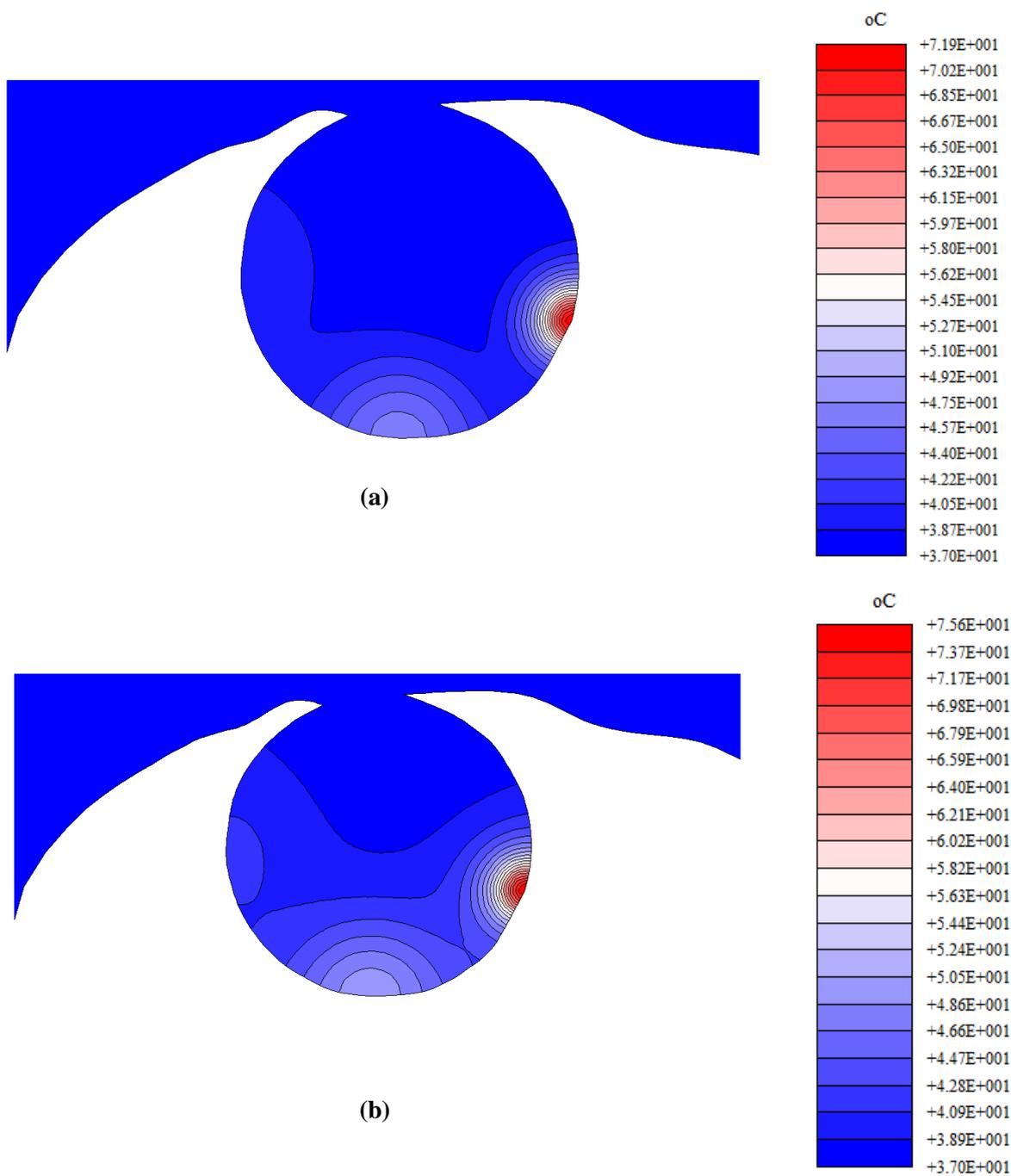


Figura 6.17 – Isofaixas de temperaturas para os instantes: (a) $t = 60\text{s}$; (b) $t = 120\text{s}$.

6.2. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As análises de sensibilidade foram feitas para um ponto sem aplicação de laser (próximo ao 1º ponto de aplicação do laser) e para o 3º ponto de aplicação, que serão denominados Ponto 1 e Ponto 2, respectivamente. Os instantes escolhidos para as análises correspondem ao final de cada aplicação do laser para cada ponto, ou seja, nos instantes $t = 18s$ e $78s$ para o ponto 1, e nos instantes $t = 58s$ e $118s$ para o ponto 2. Estes instantes foram escolhidos por serem os instantes de maior temperatura nos pontos durante cada aplicação.

O objetivo desta análise de sensibilidade é determinar a influência de cada parâmetro termofísico na resposta final do problema, uma vez que existe uma grande incerteza nos valores destes parâmetros. Em alguns casos, não existe disponível na literatura as propriedades de alguns tecidos, como foi o caso do presente problema, em que foi necessário utilizar as propriedades do pâncreas para a maior parte dos tecidos analisados. Portanto as análises aqui apresentadas foram realizadas em relação aos parâmetros de maiores incertezas: massa específica, calor específico, condutividade térmica, perfusão sanguínea e coeficiente de transferência de calor (entre o tumor e o estômago).

As sensibilidades para o Ponto 1 no instante $t = 18s$ (primeiro ciclo de aplicação) são: 15,80% para a massa específica e o calor específico; 11,15% para a condutividade; 0,85% para a perfusão; e 0,54% para o coeficiente de transferência de calor. As respectivas análises de sensibilidade são apresentadas pela Tabela 6.2, Tabela 6.3, Tabela 6.4, Tabela 6.5 e Tabela 6.6.

Tabela 6.23 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 1, $t = 18s$)

Massa específica (kg/m^3)	Δ (%)	MD ($^{\circ}C$)	MP – 1ª ordem ($^{\circ}C$)	Erro (%)	MP – 2ª ordem ($^{\circ}C$)	Erro (%)
1029,60	- 1,0	52,8677	52,7857	0,16	52,7927	0,14
1034,80	- 0,5	52,8258	52,7849	0,08	52,7884	0,07
1040,00	-	52,7841	52,7841	-	52,7841	-
1045,20	+ 0,5	52,7426	52,7833	0,08	52,7798	0,07
1050,40	+ 1,0	52,7014	52,7825	0,15	52,7755	0,14

MD = método direto; MP = método perturbativo; Δ (%) = Variação percentual do parâmetro

Tabela 6.24 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 1, t = 18s)

Calor específico (J/kg. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
3861,00	- 1,0	52,8677	52,7783	0,17	52,8758	0,02
3880,50	- 0,5	52,8258	52,7812	0,08	52,8299	0,01
3900,00	-	52,7841	52,7841	-	52,7841	-
3919,50	+ 0,5	52,7426	52,7870	0,08	52,7383	0,01
3939,00	+ 1,0	52,7014	52,7899	0,17	52,6924	0,02

Tabela 6.25 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 1, t = 18s)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,63	- 10	53,4887	52,8261	1,24	52,8311	1,23
0,67	- 5	53,0784	52,8051	0,51	52,8076	0,51
0,70	-	52,7841	52,7841	-	52,7841	-
0,74	+ 5	52,4089	52,7631	0,68	52,7606	0,67
0,77	+ 10	52,1397	52,7421	1,16	52,7371	1,15

Tabela 6.26 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 1, t = 18s)

Perfusão (s ⁻¹)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,00359	- 10	52,8290	52,7864	0,08	52,7864	0,08
0,00379	- 5	52,8065	52,7853	0,04	52,7853	0,04
0,00399	-	52,7841	52,7841	-	52,7841	-
0,00419	+ 5	52,7617	52,7829	0,04	52,7829	0,04
0,00439	+ 10	52,7393	52,7818	0,08	52,7818	0,08

Tabela 6.27 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (ponto 1, t = 18s)

Coef. de transferência de calor (W/m ² . °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
8,4740	- 10	52,8125	52,7944	0,03	52,7943	0,03
8,9447	- 5	52,7983	52,7892	0,02	52,7892	0,02
9,4155	-	52,7841	52,7841	-	52,7841	-
9,8863	+ 5	52,7699	52,7790	0,02	52,7790	0,02
10,3571	+ 10	52,7558	52,7738	0,03	52,7739	0,03

As sensibilidades considerando a temperatura do ponto 1 no instante t = 78s (segundo ciclo de aplicação) são: 15,26% para a massa específica e o calor específico; 13,02% para a condutividade; 1,81% para a perfusão; 0,82% para o coeficiente de transferência de calor. As respectivas análises de sensibilidade são apresentadas pelas Tabela 6.7, Tabela 6.8, Tabela 6.9, Tabela 6.10 e Tabela 6.11.

Tabela 6.28 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 1, t = 78s)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1029,60	- 1,0	54,9961	54,9118	0,15	54,9238	0,13
1034,80	- 0,5	54,9540	54,9119	0,08	54,9180	0,07
1040,00	-	54,9121	54,9121	-	54,9121	-
1045,20	+ 0,5	54,8705	54,9123	0,08	54,9062	0,07
1050,40	+ 1,0	54,8292	54,9124	0,15	54,9004	0,13

Tabela 6.29 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 1, t = 78s)

Calor específico	Δ (%)	MD	MP – 1ª ordem	Erro	MP – 2ª ordem	Erro
------------------	-------	----	---------------	------	---------------	------

(J/kg. °C)		(°C)	(°C)	(%)	(°C)	(%)
3861,00	- 1,0	54,9961	54,8990	0,18	55,0683	0,13
3880,50	- 0,5	54,9540	54,9055	0,09	54,9902	0,07
3900,00	-	54,9121	54,9121	-	54,9121	-
3919,50	+ 0,5	54,8705	54,9187	0,09	54,8340	0,07
3939,00	+ 1,0	54,8292	54,9252	0,18	54,7559	0,13

Tabela 6.30 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 1, t = 78s)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,63	- 10	55,7760	54,9533	1,48	54,9597	1,46
0,67	- 5	55,2695	54,9327	0,61	54,9359	0,60
0,70	-	54,9121	54,9121	-	54,9121	-
0,74	+ 5	54,4634	54,8915	0,79	54,8883	0,78
0,77	+ 10	54,1462	54,8709	1,34	54,8645	1,33

Tabela 6.31 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 1, t = 78s)

Perfusão (s ⁻¹)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,00359	- 10	55,0128	54,9173	0,17	54,9173	0,17
0,00379	- 5	54,9623	54,9147	0,09	54,9147	0,09
0,00399	-	54,9121	54,9121	-	54,9121	-
0,00419	+ 5	54,8624	54,9095	0,09	54,9095	0,09
0,00439	+ 10	54,8131	54,9069	0,17	54,9069	0,17

Tabela 6.32 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (ponto 1, t = 78s)

Coef. de trans-	Δ (%)	MD	MP – 1ª ordem	Erro	MP – 2ª ordem	Erro
-----------------	--------------	----	---------------	------	---------------	------

transferência de calor (W/m ² . °C)		(°C)	(°C)	(%)	(°C)	(%)
8,47395	- 10	54,9572	54,9201	0,07	54,9203	0,07
8,94473	- 5	54,9346	54,9161	0,03	54,9162	0,03
9,41550	-	54,9121	54,9121	-	54,9121	-
9,88628	+ 5	54,8897	54,9081	0,03	54,9081	0,03
10,35705	+ 10	54,8673	54,9041	0,07	54,9043	0,07

As sensibilidades considerando a temperatura do ponto 2 no instante $t = 58s$ (primeiro ciclo de aplicação) são: 5,90% para a massa específica e o calor específico; 72,14% para a condutividade; 0,83% para a perfusão; 0,97% para o coeficiente de transferência de calor. As respectivas análises de sensibilidade são apresentadas pela Tabela 6.12, pela Tabela 6.13, pela Tabela 6.14, pela Tabela 6.15 e pela Tabela 6.16.

Tabela 6.33 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 2, $t = 58s$)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
1029,60	- 1,0	142,3630	142,2941	0,05	142,3194	0,03
1034,80	- 0,5	142,3210	142,2870	0,02	142,2997	0,01
1040,00	-	142,2800	142,2800	-	142,2800	-
1045,20	+ 0,5	142,2380	142,2730	0,02	142,2603	0,02
1050,40	+ 1,0	142,1970	142,2659	0,05	142,2406	0,03

Tabela 6.34 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 2, $t = 58s$)

Calor específico (J/kg. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
3861,00	- 1,0	142,3630	142,3208	0,03	141,6094	0,53
3880,50	- 0,5	142,3210	142,3004	0,01	142,1226	0,14
3900,00	-	142,2800	142,2800	-	142,2800	-
3919,50	+ 0,5	142,2380	142,2596	0,02	142,0817	0,11
3939,00	+ 1,0	142,1970	142,2392	0,03	141,5278	0,47

Tabela 6.35 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 2, t = 58s)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,63	- 10	152,6680	146,0388	4,34	146,3101	4,16
0,67	- 5	146,4910	144,1594	1,59	144,2950	1,50
0,70	-	142,2800	142,2800	-	142,2800	-
0,74	+ 5	137,1480	140,4006	2,37	140,2650	2,27
0,77	+ 10	133,6180	138,5212	3,67	138,2499	3,47

Tabela 6.36 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 2, t = 58s)

Perfusão (s ⁻¹)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,00359	- 10	142,3970	142,2860	0,08	142,2860	0,08
0,00379	- 5	142,3380	142,2830	0,04	142,2830	0,04
0,00399	-	142,2800	142,2800	-	142,2800	-
0,00419	+ 5	142,2210	142,2770	0,04	142,2770	0,04
0,00439	+ 10	142,1630	142,2740	0,08	142,2741	0,08

Tabela 6.37 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (ponto 2, t = 58s)

Coef. de transferência de calor (W/m ² . °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
8,47395	- 10	142,4170	142,1190	0,21	142,1183	0,21
8,94473	- 5	142,3490	142,1995	0,11	142,1993	0,11
9,41550	-	142,2800	142,2800	-	142,2800	-
9,88628	+ 5	142,2110	142,3605	0,11	142,3603	0,11
10,35705	+ 10	142,1430	142,4410	0,21	142,4403	0,21

As sensibilidades considerando a temperatura do ponto 3 no instante $t = 118s$ (segundo ciclo de aplicação) são; 5,88% para a massa específica e o calor específico; 71,85% para a condutividade; 1,53% para a perfusão; 1,19% para o coeficiente de transferência de calor. As respectivas análises de sensibilidade são apresentadas pelas Tabela 6.17, Tabela 6.18, Tabela 6.19, Tabela 6.20 e Tabela 6.21.

Tabela 6.38 - Análise de Sensibilidade para a massa específica (ponto 2, $t = 118s$)

Massa específica (kg/m ³)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
936,00	- 1,0	146,3130	146,2414	0,05	146,2644	0,03
988,00	- 0,5	146,2710	146,2347	0,02	146,2462	0,02
1040,00	-	146,2280	146,2280	-	146,2280	-
1092,00	+ 0,5	146,1850	146,2213	0,02	146,2098	0,02
1144,00	+ 1,0	146,1420	146,2146	0,05	146,1916	0,03

Tabela 6.39 - Análise de sensibilidade para calor específico (ponto 2, $t = 118s$)

Calor específico	Δ (%)	MD	MP – 1ª ordem	Erro	MP – 2ª ordem	Erro
------------------	-------	----	---------------	------	---------------	------

(J/kg. °C)		(°C)	(°C)	(%)	(°C)	(%)
3861,00	- 1,0	146,3130	146,2657	0,03	145,6189	0,47
3705,00	- 0,5	146,2710	146,2468	0,10	146,0851	0,13
3900,00	-	146,2280	146,2280	-	146,2280	-
4095,00	+ 0,5	146,1850	146,0395	0,10	129,8692	11,16
4290,00	+ 1,0	146,1420	145,8511	0,20	81,1699	44,46

Tabela 6.40 - Análise de sensibilidade para a condutividade térmica (ponto 2, t = 118s)

Condutividade (W/m. °C)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,63	- 10	156,8700	150,0175	4,37	150,2907	4,19
0,67	- 5	150,5410	148,1227	1,61	148,2594	1,52
0,70	-	146,2280	146,2280	-	146,2280	-
0,74	+ 5	140,9750	144,3333	2,38	144,1966	2,29
0,77	+ 10	137,2900	142,4385	3,75	142,1653	3,55

Tabela 6.41 - Análise de sensibilidade para a perfusão sanguínea (ponto 2, t = 118s)

Perfusão (s ⁻¹)	Δ (%)	MD (°C)	MP – 1ª ordem (°C)	Erro (%)	MP – 2ª ordem (°C)	Erro (%)
0,00359	- 10	146,4540	146,2395	0,15	146,2397	0,15
0,00379	- 5	146,3400	146,2338	0,07	146,2338	0,07
0,00399	-	146,2280	146,2280	-	146,2280	-
0,00419	+ 5	146,1160	146,2222	0,07	146,2223	0,07
0,00439	+ 10	146,0050	146,2165	0,14	146,2166	0,15

Tabela 6.42 - Análise de sensibilidade para o coef. de transferência de calor (ponto 2, t = 118s)

Coef. de trans-	Δ (%)	MD	MP – 1ª ordem	Erro	MP – 2ª ordem	Erro
-----------------	--------------	----	---------------	------	---------------	------

ferência de calor (W/m ² . °C)		(°C)	(°C)	(%)	(°C)	(%)
8,4740	- 10	146,4020	146,0560	0,24	146,0553	0,24
8,9447	- 5	146,3150	146,1420	0,12	146,1418	0,12
9,4155	-	146,2280	146,2280	-	146,2280	-
9,8863	+ 5	146,1410	146,3140	0,12	146,3138	0,12
10,3571	+ 10	146,0550	146,4000	0,24	146,3992	0,24

As análises mostram que o problema apresenta maior sensibilidade para a variação da condutividade, principalmente para o ponto com incidência direta da fonte de calor. Por outro lado, a perfusão e o coeficiente de transferência de calor são os parâmetros que apresentam menor sensibilidade para o problema.

Como mencionado anteriormente, o objetivo deste trabalho era determinar a influência de cada parâmetro na resposta final do problema. No problema específico aqui analisado, foram utilizadas as propriedades do pâncreas para a maior parte dos tecidos analisados por falta desses dados. Para os parâmetros de perfusão e coeficiente de transferência de calor na região do tumor esta aproximação é perfeitamente aceitável, uma vez que estes parâmetros apresentam pouca influência na resposta final. Para a massa específica e o calor específico, apesar das sensibilidades serem um pouco maiores ainda é aceitável fazer esta aproximação, uma vez que as sensibilidades são menores para os pontos mais críticos de maiores temperaturas (aplicação da fonte de laser). A condutividade, porém, é o parâmetro que apresenta maior sensibilidade na resposta, portanto, sua aproximação por outros valores deve ser bem avaliada, principalmente nos pontos de maior temperatura onde a sensibilidade é muito maior.

Em todos os casos, o método de 2^a ordem diminuiu os erros relativos quando comparado com o método de 1^a ordem, exceto para a perfusão e o coeficiente de transferência de calor onde os erros de ambos os métodos foram muito pequenos.

Do ponto de vista computacional, as análises via método perturbativo apresentam alguns inconvenientes. Considerando o método de 1^a ordem, é necessário executar o programa computacional para resolver a equação do problema e a equação adjunta. Porém, para

calcular os coeficientes de sensibilidade é necessário armazenar as temperaturas de todos os nós da malha em todos os intervalos de tempo da análise. Este custo de armazenamento é temporário, uma vez que os arquivos podem ser excluídos ao final da análise, porém o tempo de resolução do problema torna-se bem maior em função do tamanho destes arquivos.

Com relação à 2ª ordem, além destes inconvenientes já citados é necessário que o programa execute a solução das equações derivadas para cada parâmetro analisado. Semelhante a 1ª ordem, também é necessário o armazenamento das temperaturas nodais em todos os passos de tempo: para a equação principal, para a equação adjunta e para as equações derivadas.

A máquina utilizada para executar o programa possui um processador AMD Turion (tm) 64 x2 Mobile Technology TL-56 1.80 GHz, com memória RAM de 1,00 GB. Para o problema analisado, o programa calcula o perfil de temperaturas em aproximadamente 5 minutos. Porém, para fazer as análises de sensibilidade é necessário executá-lo para todas as variações dos parâmetros desejadas. Com o método perturbativo de 1ª ordem, o tempo de execução é de aproximadamente 20 minutos, porém a análise é feita uma única vez. Com o método de 2ª ordem, o tempo é de aproximadamente 30 minutos para cada parâmetro analisado.

De acordo com os resultados obtidos e os inconvenientes citados anteriormente, não se justifica o uso do método de 2ª ordem para o tipo de análise tratada neste trabalho que utiliza malhas com grande quantidade de nós. Para o método de 1ª ordem, estes inconvenientes podem ser justificados, uma vez que a análise é feita uma única vez e a resolução das equações independe do número de parâmetros que se queira avaliar.

7. CONCLUSÕES

A grande incerteza na medida dos parâmetros termofísicos utilizados na equação da biotransferência de calor motivou a realização das análises de sensibilidade, objetos de estudo deste trabalho. O principal objetivo era determinar a influência de cada parâmetro no fenômeno de transferência de calor em tecidos vivos, devido à grande dificuldade em encontrar os valores confiáveis para os parâmetros termofísicos dos tecidos analisados. Muitas vezes, a falta destes valores na literatura fizeram com que fossem utilizados valores correspondentes a outros tecidos.

Apesar de a teoria da perturbação ser normalmente empregada para estudos da física de reatores nucleares, esta teoria pode ser uma importante ferramenta para a análise térmica de sistemas biomecânicos.

Neste texto foram apresentadas as equações da teoria da perturbação aplicada à equação da biotransferência de calor. A metodologia descrita utilizou um formalismo diferencial de 1ª e de 2ª ordens, sendo os coeficientes de sensibilidade calculados para a temperatura média e para a temperatura local. A ferramenta computacional desenvolvida linguagem FORTRAN usa o Método dos Volumes Finitos em malhas não-estruturadas, e foi verificada com exemplos simples cujas soluções eram conhecidas.

Foi possível determinar os parâmetros cuja variação provoca maior sensibilidade à resposta analisada. No caso do problema apresentado neste trabalho, a condutividade térmica foi o parâmetro que apresentou maior sensibilidade, enquanto que a perfusão sanguínea e o coeficiente de transferência de calor foram os que apresentaram menor sensibilidade. A massa específica e o calor específico apresentaram sensibilidades intermediárias entre esses parâmetros. Portanto, é possível concluir que o uso dos valores da perfusão, coeficiente de transferência de calor, massa específica e calor específico referentes a outros tecidos é uma aproximação aceitável para o problema. Com relação à condutividade, esta aproximação pode levar a grandes diferenças relativas nos valores das temperaturas e o impacto destas diferenças deve ser bem avaliado. Esta avaliação pode ser feita através do estudo do impacto destas variações de temperatura na função dano, que permite quantificar o dano sofrido pelo tecido devido à exposição a essas temperaturas.

Com esses resultados é possível se ter maior controle sobre a precisão da simulação computacional do campo de temperaturas e do dano térmico que podem estar presentes em procedimentos médicos que utilizam a hipertermia como procedimento terapêutico.

Com relação ao uso dos métodos perturbativos, eles se mostraram eficientes no cálculo das temperaturas apresentando pequenos erros relativos quando comparados aos resultados obtidos diretamente através da execução do programa computacional. O método mostrou-se eficiente uma vez que os cálculos de sensibilidade para um determinado parâmetro são realizados uma única vez, independente da variação do parâmetro a ser avaliada.

Como observado nos capítulos anteriores, o método de 2ª ordem diminuiu ou manteve os erros relativos quando comparado com o método de 1ª ordem, para todos os casos. Porém, o uso do método de 2ª ordem se mostrou bastante oneroso do ponto de vista computacional e como o método de 1ª ordem é capaz de fornecer respostas com erros relativos aceitáveis, o uso do método de 2ª ordem não apresentou vantagens para o tipo de problema analisado neste trabalho.

Como sugestões para a continuidade do presente estudo, apresentam-se os seguintes tópicos:

- Avaliação da influência dos demais parâmetros termofísicos dos tecidos vivos citados no texto e que não foram avaliados no presente trabalho;
- Análise das propriedades termofísicas em função do dano térmico;
- Uso de imagens termográficas para possível validação do método;
- Incluir o modelo de fronteira móvel para avaliar a destruição do tumor;
- Análise de propagação de incertezas dos parâmetros;
- Problema inverso para determinar qual parâmetro entre os de interesse que apresenta maior coeficiente de sensibilidade na determinação de temperaturas em processo hipertérmicos;
- Utilizar computação distribuída para a obtenção da solução numérica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Albuquerque, C.D.C, Manzi, J.T., Lira, C.A.B.O., Odloak, D. Stability Conditions and Sensitivity Analysis for the Neutralization Process with a Nonlinear PI Controller, IASTED International Conference, 19th, Innsbruck, Austria, 2000.
- Andrade Lima, F.R., Blanco, A., Introducción a los métodos perturbativos aplicados a problemas de ingeniería nuclear, San Carlos de Bariloche: CNEA, Universidad Nacional de Cuyo, Instituto Balsero, 61p. 1994.
- Andrade Lima, F.R., Lira, C.A.B.O. & Gandini, A. Aplicação de Métodos Perturbativos a Problemas de Segurança de Reatores – Estado da Arte, Symposium on Regional Integration in Nuclear Energy, pp. 397-408, Rio de Janeiro, 1995.
- Andrade Lima, F.R., Gandini, A., Blanco, A., Lira, C.A.B.O., Maciel, E.S.G., Alvim A.C.M., Silva, F.C., Melo, P.F.F., França, W.F.L., Baliño, J.L., LARRETEGUY, A.E., Lorenzo, A., Recent advances in perturbative methods applied to nuclear engineering problems, *Progress in Nuclear Energy*, vol. 33 (1/2), pp. 23-97, 1998.
- Baliño, J.L., Larreteguy, A.E., Lorenzo, A.C., Padilla, A.G., Andrade Lima, F.R., The differential perturbative method applied to the sensitivity analysis for the waterhammer problems in hydraulic networks, *Applied Mathematical Modelling*, vol. 25, pp. 1117-1138, 2001.
- Baudron, A.M., Bruna, G.B., Gandini, A., Lautard, J.J., Monti, S., Pizzigati, G., Application of the HGPT methodology of reactor operation problems with a nodal mixed method, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 25(17), pp. 1383-1402, 1998.
- Bowman, H. F., Estimation of tissue blood flow, In: SHITZER, A. & EBERHART, R.C., *Heat Transfer in Medicine and Biology – Analysis and Applications*. Nova York, Plenum Press, vol. 1, cap 9, pp. 193-230, 1985.
- Cacuci, D.G., Sensitivity theory for general systems of nonlinear equations, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 75, pp. 88-110, 1980.
- Campisi, D., LA Bella, A., The dynamics of urban population, *Sist Urbani.*, vol. 7(3), pp. 221-235, 1985.
- Charny, C. K., Mathematical models of bioheat equation. In: CHO, Y. I., ed. *Advances in Heat Transfer: Bioengineering Heat Transfer*, Academic Press, Inc. vol. 22, pp. 19–155, 1992.

- Daikuzono, N., Suzuki, S., Tajiri, H., Tsunekawa, H., Ohyama, M. & Joffe, S. N., Laser-thermia: a new computer-controlled contact Nd:YAG system for interstitial local hyperthermia, *Lasers in Surgery and Medicine*, vol.8, pp. 254-258, 1988.
- Diller, K. R., Modeling of bioheat transfer processes at high and low temperatures. In: CHO, Y. I., ed., *Advances in Heat Transfer: Bioengineering Heat Transfer*, Academic Press, Inc., vol. 22, pp. 157-357, 1982.
- Duck, F. A., *Physical Properties of Tissues: A Comprehensive Reference Book*, Academic Press, 1997.
- Fanta, J., Rehak, F., Horak, L. & Marek, J., Removal of a liver tumor using the Nd:YAG laser, *Casopis Lekarů Ceskych*, vol. 128(41), pp. 1301-1302, 1989. (Resumo).
- Farias, G.S., Análise de sensibilidade do modelo fluidodinâmico de um riser através do formalismo diferencial perturbativo, (Dissertação de Mestrado – Departamento de Energia Nuclear/Universidade Federal de Pernambuco), Recife, 120p, 2007.
- Gandini, A., Generalized Perturbation Theory (GPT) Methods. A Heuristic Approach, *Advances in Nuclear and Science Technology*, vol. 19, pp. 205-380, 1987.
- Gandini, A., Sensitivity analysis of source driven subcritical systems by the HGPT methodology, *Ann. Nucl. Energy*, vol. 24 (15), pp. 1241-1256, 1997.
- Guido, G., Converti, J., Clause, A., Density-wave oscillations in parallel channels - an analytical approach, *Nuclear Engineering and Design*, vol. 125 (2), pp. 121-136, 1991.
- Ghilain, J. M. & Dive, C., Endoscopic laser therapy for small villous adenomas of the duodenum, *Endoscopy*, vol. 26, pp. 308-310, 1994.
- Giménez, M.O., Schlamp, M.A., Andrade Lima, F.R., Sensitivity analysis of the aerosols transport equation, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 30, pp. 1247-1266, 2003
- Gonçalves, G.A., Orengo, G., Vilhena, M.T.M.B., Graça, C.O., LTS_N solution of the adjoint neutron transport with arbitrary source for high order of quadrature in a homogeneous slab, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 29 (2002), pp. 561-569, 2002.
- Guimarães, C.S.C., Modelagem Computacional da Biotransferência de Calor no Tratamento por Hipertermia em Tumores de Duodeno através do Método dos Volumes Finitos em Malhas Não Estruturadas, (Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica/Universidade Federal de Pernambuco), Recife, 80p, 2003.
- Jain, R.K., Analysis of heat transfer and temperature distributions in tissues during local and whole-body hyperthermia. In: SHITZER, A. & EBERHART, R. C., *Heat Transfer*

- in Medicine and Biology – Analysis and Applications*. Nova York, Plenum Press, cap. 16, vol. 2, pp. 3-53, 1985.
- Incropera, F. P. & Witt, D. P., Introduction to Heat Transfer, 3rd Edition, John Wiley & Sons, 1996.
- Incropera, F.P., DeWitt, D.P., Fundamentos da transferência de calor e de massa, 4^a ed., Rio de Janeiro, Ed. LTC, 1998.
- Ishikawa, T., Zeniya, M., Hokari, A., Kawabe, T., Suzuki, K., Fujise, K. & Toda, G., An experimental study on Nd-YAG laser induced thermotherapy its possible application of the laser irradiation for therapy of hepatocellular carcinoma, *Hepatology Research*, vol. 23, pp. 25-30, 2002.
- Kobayashi, K., Sensitivity analysis of multiplication rate for subcritical systems, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 32, pp. 777-794, 2005.
- Lima, RC.F., Lyra, P.R.M., Guimarães, C.S.C., Carvalho, D.K.E., Silva, G.M.L.L Modelagem computacional da biotransferência de calor no tratamento por hipertermia em tumores de duodeno através do método dos volumes finitos em malhas não estruturadas, *Revista Brasileira de Engenharia Biomédica*, Vol. 22(2), pp. 119-129, 2005.
- Lyra, P.R.M., Lima, RC.F., Guimarães, C.S.C., Carvalho, D.K.E., Uma formulação com estrutura de dados por arestas do método dos volumes finitos na solução de problemas em potencial, In: MECOM2002 – FIRST SOUTH AMERICAN CONGRESS ON COMPUTACIONAL MECHANICS, *Anais*, Paraná – Santa Fé, Argentina, 2002.
- Lyra, P.R.M., Lima, RC.F., Guimarães, C.S.C., Carvalho, D.K.E., An edge-based unstructured finite volume procedure for the numerical analysis of heat conduction applications, *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.*, Vol. 26(2), pp. 160-169, 2004.
- Lyra, P.R.M., Lima, RC.F., Carvalho, D.K.E., Silva, G.M.L.L, An axisymmetric finite volume formulation for the solution of heat conduction problems using unstructured meshes, *J. of the Braz. Soc. of Mech. Sci. & Eng.*, Vol. 27(4), pp. 407-414, 2005.
- Milnor, W. R, Cardiovascular Physiology, Oxford University Press, Nova York, 1990.
- Nestorov, I.A., Aarons, L.J., Rowland, M., Physiologically based pharmacokinetic modeling of a homologous series of barbiturates in the rat: a sensitivity analysis, *J Pharmacokinetic Biopharm*, vol. 25(4), pp. 413-447, 1997.
- Netter, F. H. & Dalley II, A. F., Atlas of Human Anatomy, 2nd ed., Novartis, USA, 1997.
- Oblow, E.M., Sensitivity theory for reactor thermal-hydraulics problems, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 68, pp. 322-337, 1978.

- Peachey, N.S. & Chow, A.Y., Subretinal implantation of semiconductor-based photodiodes: progress and challenges, *Journal of Rehabilitation Research and Development*, vol. 36 (4), 1999.
- Pelloni, S. & Coddington, P., On using alternative perturbation theory methodologies in the evaluation of reactivity effects in ADS cores, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 33, pp. 1360-1367, 2006.
- Rivolta, B., Inzoli, F., Mantero, S., Severini, A., Evaluation of temperature distribution during hyperthermic treatment in biliary tumors: a computational approach, *Journal of Biomechanical Engineering*, vol. 121 (2), pp. 141-147, 1999.
- Shitzer, A., *Heat transfer in medicine and biology*, Nova York, Plenum Press, vol. 2, 1992.
- Skinner, M. G., Iizuka, M. N., Kolios, M. C. & Sherar, M. D., A theoretical comparison of energy sources – microwave, ultrasound and laser – for interstitial thermal therapy, *Physics in Medicine and Biology*, vol. 43, pp. 3535-3547, 1998.
- Sturesson, C. & Andersson-Engels, S., A mathematical model for predicting the temperature distribution in laser-induced hyperthermia. Experimental evaluation and applications, *Physics in Medicine and Biology*, vol. 40(12), pp. 2037-2052, 1995.
- Silva, G.M.L.L., “Análise da biotransferência de calor nos tecidos oculares devido à presença de implantes retinianos através da utilização do método dos volumes finitos em malhas não-estruturadas”, (Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica/Universidade Federal de Pernambuco), Recife, 80pp, 2004.
- Sultan, R., Marinov, V. & Falo, K. H., The role of the laser in gastrointestinal surgery, *Khirurgiia (Sofia)*, vol. 42(2), pp. 15-19, 1989. (Resumo).
- Tito, M.W.C., Análise de sensibilidade na difusão de calor em uma aleta de um elemento de combustível nuclear, (Dissertação de Mestrado – Departamento de Energia Nuclear/Universidade Federal de Pernambuco), Recife, 86p, 2001.
- Uchikawa, R., Análise de sensibilidade de 2ª ordem numa célula A combustível tipo PEM, (Dissertação de Mestrado – Departamento de Energia Nuclear/Universidade Federal de Pernambuco), Recife, 125p, 2008.
- Veronis, G., Dutton, R.W., Fan, S., Method for sensitivity analysis of photonic crystal devices, *Optics Letters*, vol. 29(19), pp. 2288-2290, 2004.
- Welch, A. J., Laser irradiation of tissue. In: SHITZER, A., EBERHART, R. C., *Heat Transfer in Medicine and Biology – Analysis and Applications*, Nova York, Plenum Press, vol. 2, pp. 135-184, 1985.

Yao, L., Liao, D., Zeng, Y., Xu, X., Xu, H., Radial distributions of temperature pressure and velocities for pulsatile blood flow in an axisymmetrical stiff tube, *Physiol. Meas.*, vol. 25 (6), pp. 1437-1442, 2004.

ANEXO A

A.1 OBTENÇÃO DO OPERADOR ADJUNTO (\mathbf{H}^*) E DO CONCOMITANTE BILINEAR DE 1ª ORDEM [$P_1(T^*, T_{/i})$]

O operador adjunto (Eq. (3.21)) é dado pela expressão:

$$\langle T^* \mathbf{H} T_{/i} \rangle = \langle T_{/i} \mathbf{H}^* T^* \rangle - P_1(T^*, T_{/i}) \quad (\text{A.1})$$

O termo do lado esquerdo da equação acima pode ser obtido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \langle T^* \mathbf{H} T_{/i} \rangle &= \iint T^* \left[\rho c \frac{\partial}{\partial t} - k \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s \right] T_{/i} d\Omega dt \\ &= \iint T^* \rho c \frac{\partial T_{/i}}{\partial t} d\Omega dt - \iint T^* k \frac{\partial^2 T_{/i}}{\partial x_n^2} d\Omega dt + \\ &\quad + \iint T^* \omega \rho_s c_s T_{/i} d\Omega dt \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde x_n representa a variável espacial independente e Ω é o domínio espacial.

Integrando por partes cada termo do lado direito da equação anterior em separado:

$$\iint T^* \rho c \frac{\partial T_{/i}}{\partial t} d\Omega dt = \int (T^* \rho c T_{/i})_t d\Omega - \iint T_{/i} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} d\Omega dt \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned}
\iint T^* k \frac{\partial^2 T_{/i}}{\partial x_n^2} d\Omega dt &= \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt - \iint \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} d\Omega dt \\
&= \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt - \int \left(\frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/i} \right) d\Gamma dt + \\
&\quad + \iint T_{/i} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} d\Omega dt
\end{aligned} \tag{A.4}$$

onde Γ é o contorno espacial.

$$\iint T^* \omega \rho_s c_s T_{/i} d\Omega dt = \int T_{/i} \omega \rho_s c_s T^* d\Omega dt \tag{A.5}$$

Substituindo os termos da Eq. (A.3) a Eq. (A.5) na Eq. (A.2), obtemos:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \text{HT}_{/i} \rangle &= \int (T^* \rho c T_{/i})_t d\Omega - \iint T_{/i} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} d\Omega dt - \\
&\quad - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/i} \right) d\Gamma dt - \iint T_{/i} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} d\Omega dt + \\
&\quad + \iint T_{/i} \omega \rho_s c_s T^* d\Omega dt
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Agrupando os termos semelhantes, temos:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \text{HT}_{/i} \rangle &= \iint \left[-T_{/i} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} - T_{/i} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} + T_{/i} \omega \rho_s c_s T^* \right] d\Omega dt + \\
&\quad + \int (T^* \rho c T_{/i})_t d\Omega - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/i} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{A.7}$$

O primeiro termo do lado direito da Eq. (A.7) ainda pode ser reescrito com os termos de temperatura em evidência:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \mathbf{H} T_{/i} \rangle = & \iint T_{/i} \left[-\rho c \frac{\partial}{\partial t} - k \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s \right] T^* d\Omega dt + \\
& + \int (T^* \rho c T_{/i})_t d\Omega - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/i} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Comparando as Eq. (A.8) e Eq. (A.1), podemos determinar o operador adjunto e o concomitante bilinear de 1ª ordem, dados, respectivamente, por:

$$\mathbf{H}^* = -\rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \tag{A.9}$$

$$P_1(T^*, T_{/i}) = -\int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/i})_0^t d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(T^* k \frac{\partial T_{/i}}{\partial x_n} - T_{/i} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{A.10}$$

A.2 OBTENÇÃO DO OPERADOR ADJUNTO (\mathbf{H}^*) E DO CONCOMITANTE BILINEAR DE 2ª ORDEM [$P_2(T^*, T_{/ij})$]

O procedimento adotado é idêntico ao adotado no item anterior. O operador adjunto (Eq. (3.21)) é dado pela expressão:

$$\langle T^* \mathbf{H} T_{/ij} \rangle = \langle T_{/ij} \mathbf{H}^* T^* \rangle - P_2(T^*, T_{/ij}) \tag{A.11}$$

O termo do lado esquerdo da equação acima pode ser obtido da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \mathbf{H} T_{/ij} \rangle = & \iint T^* \left[\rho c \frac{\partial}{\partial t} - k \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s \right] T_{/ij} d\Omega dt \\
= & \iint T^* \rho c \frac{\partial T_{/ij}}{\partial t} d\Omega dt - \iint T^* k \frac{\partial^2 T_{/ij}}{\partial x_n^2} d\Omega dt + \\
& + \iint T^* \omega \rho_s c_s T_{/ij} d\Omega dt
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Integrando por partes cada termo do lado direito da Eq. (A.12) em separado:

$$\iint T^* \rho c \frac{\partial T_{/ij}}{\partial t} d\Omega dt = \int (T^* \rho c T_{/ij})_t d\Omega - \iint T_{/ij} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} d\Omega dt \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \iint T^* k \frac{\partial^2 T_{/ij}}{\partial x_n^2} d\Omega dt &= \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt - \iint \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} d\Omega dt \\ &= \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt - \int \left(\frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/ij} \right) d\Gamma dt + \\ &\quad + \iint T_{/ij} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} d\Omega dt \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\iint T^* \omega \rho_s c_s T_{/ij} d\Omega dt = \iint T_{/ij} \omega \rho_s c_s T^* d\Omega dt \quad (\text{A.15})$$

Substituindo os termos Eq. (A.13) a Eq. (A.15) na Eq. (A.12), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle T^* \text{H} T_{/ij} \rangle &= \int (T^* \rho c T_{/ij})_t d\Omega - \iint T_{/ij} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} d\Omega dt - \\ &\quad - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/ij} \right) d\Gamma dt - \iint T_{/ij} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} d\Omega dt + \\ &\quad + \iiint T_{/ij} \omega \rho_s c_s T^* dx dy dt \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Agrupando os termos semelhantes, temos:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \mathbf{H} T_{/ij} \rangle = & \iint \left[-T_{/ij} \rho c \frac{\partial T^*}{\partial t} - T_{/ij} k \frac{\partial^2 T^*}{\partial x_n^2} + T_{/ij} \omega \rho_s c_s T^* \right] d\Omega dt + \\
& + \int (T^* \rho c T_{/ij})_t d\Omega - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/ij} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{A.17}$$

O primeiro termo do lado direito da Eq. (A.17) ainda pode ser reescrito com os termos de temperatura em evidência:

$$\begin{aligned}
\langle T^* \mathbf{H} T_{/ij} \rangle = & \iint T_{/ij} \left[-\rho c \frac{\partial}{\partial t} - k \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s \right] T^* d\Omega dt + \\
& + \int (T^* \rho c T_{/ij})_t d\Omega - \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} - \frac{\partial T^*}{\partial x_n} k T_{/ij} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{A.18}$$

Comparando as Eq. (A.18) e Eq. (A.11), podemos determinar o operador adjunto e o concomitante bilinear de 2ª ordem, dados, respectivamente, por:

$$\mathbf{H}^* = -\rho c \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} - k \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x_n^2} + \omega \rho_s c_s (\cdot) \tag{A.19}$$

$$P_2(T^*, T_{/ij}) = -\int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/ij})_0^{t_f} d\Omega + \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/ij}}{\partial x_n} - T_{/ij} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{A.20}$$

ANEXO B

B.1 DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A MASSA ESPECÍFICA ($p_i = \rho$)

➤ *Condições de contorno da equação derivada*

Os três tipos possíveis de condições de contorno devem ser derivados em função da massa específica.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} T &= \bar{T} \\ T_{/i} &= \bar{T}_{/\rho} = 0 \\ T_{/ii} &= \bar{T}_{/\rho\rho} = 0 \end{aligned} \tag{B.50}$$

onde a notação $T_{/i}$ indica a derivada da função T em relação ao parâmetro p_i analisado, neste caso, a massa específica.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q} \\ -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= \bar{q}_{/\rho} = 0 \\ -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= \bar{q}_{/\rho\rho} = 0 \end{aligned} \tag{B.51}$$

onde x_n representa a variável independente de espaço (x ou y).

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin

$$\begin{aligned}
 -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q}_n + h(T - T_a) \\
 -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/\rho}) \\
 -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/\rho\rho})
 \end{aligned}
 \tag{B.52}$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é a temperatura ambiente.

d) A condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T}_o \quad \text{em } t = t_o \\
 T_{/i} &= \bar{T}_{o/\rho} = 0 \\
 T_{/ii} &= \bar{T}_{o/\rho\rho} = 0
 \end{aligned}
 \tag{B.53}$$

➤ **Funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$**

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$ relacionadas ao parâmetro massa específica podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}
 S_{(\rho)} &= -\frac{\partial(\rho c)}{\partial \rho} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial \rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial \rho} T + \frac{\partial g}{\partial \rho} \\
 S_{(\rho)} &= -c \frac{\partial T}{\partial t}
 \end{aligned}
 \tag{B.54}$$

$$\begin{aligned}
S_{(\rho\rho)} = & -\frac{\partial^2(\rho c)}{\partial \rho^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial^2 k}{\partial \rho^2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial^2(\omega \rho_s c_s)}{\partial \rho^2} T + \frac{\partial^2 g}{\partial \rho^2} - 3 \frac{\partial(\rho c)}{\partial \rho} \frac{\partial T_{/\rho}}{\partial t} + \\
& + 3 \frac{\partial k}{\partial \rho} \left(\frac{\partial^2 T_{/\rho}}{\partial x_n^2} \right) - 3 \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial \rho} T_{/\rho} \quad (\text{B.55}) \\
S_{(\rho\rho)} = & -3c \frac{\partial T_{/\rho}}{\partial t}
\end{aligned}$$

➤ **Concomitantes bilineares $P_1(T^*, T_{/\rho})$ e $P_2(T^*, T_{/\rho\rho})$**

A condição inicial e de contorno das derivadas de primeira e segunda ordens e a condição final e de contorno da equação adjunta são necessárias para determinar os concomitantes.

$$P_1(T^*, T_{/\rho}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/\rho})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/\rho} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.56})$$

$$P_2(T^*, T_{/\rho\rho}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/\rho\rho})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/\rho\rho} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.57})$$

Com a condição final da equação adjunta (Eq. (4.16)) e a condição inicial da equação derivada de primeira ordem (Eq. (4.22)), o primeiro termo das Eq. (B.56) e (B.57) podem ser anulados. A expressão do concomitante depende do tipo de condição de contorno do problema.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

Substituindo a Eq.(B.50) nas expressões dos concomitantes (Eqs. (B.56) e (B.57)), o segundo e o terceiro termo das Eqs. (B.56) e (B.57) também se anulam. Portanto,

$$P_1(T^*, T_{/\rho}) = 0 \quad (\text{B.58})$$

$$P_2(T^*, T_{l\rho}) = 0$$

b) Condição de contorno de Neumann:

Substituindo a Eq. (B.51), tem-se que:

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{l\rho}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{l\rho}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin:

A partir da Eq. (B.52), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordens da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT_{l\rho}}{dx_n} &= 0 + h(T_{l\rho}) \\ \frac{dT_{l\rho}}{T_{l\rho}} &= -\frac{h}{k} dx_n \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

$$T_{l\rho} = \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right)$$

$$T_{l\rho\rho} = \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \quad (\text{B.61})$$

Substituindo as Eqs. (B.60) e (B.61) nas Eq. (B.56) e (B.57):

$$P_1(T^*, T_{l\rho}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \cdot k \cdot \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.62})$$

$$P_2(T^*, T_{/\rho}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \cdot k \cdot \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.63})$$

➤ **Coeficientes de Sensibilidade**

Os coeficientes de sensibilidade para primeira e segunda ordem (vide Eq. (4.31) e (4.32)) relacionados à massa específica, são dados, respectivamente, por:

$$\frac{\delta R}{\delta \rho} = [\langle T^* \cdot S_{(\rho)} \rangle + P_1(T^*, T_{/\rho})] \quad (\text{B.64})$$

$$\frac{\delta R}{\delta \rho} = [\langle T^* \cdot S_{(\rho)} \rangle + P_1(T^*, T_{/\rho})] + \frac{1}{2!} \delta \rho [\langle T^* \cdot S_{(\rho\rho)} \rangle + P_2(T^*, T_{/\rho})] \quad (\text{B.65})$$

➤ **Múltiplos materiais**

Para o caso de problemas com múltiplos materiais, as funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ são nulas para os domínios cujas propriedades sejam diferentes dos parâmetros escolhidos para serem analisados. Nas interfaces dos materiais, a condição de contorno é dada por:

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2 \\ -k_1 \frac{dT_1}{dx} &= k_2 \frac{dT_2}{dx} \end{aligned} \quad (\text{B.66})$$

onde os índices 1 e 2 representam materiais diferentes.

Nas interfaces, os concomitantes bilineares apresentam a seguinte expressão (Eq. (4.13) e (4.14)):

$$P_1(T^*, T_{/\rho}) = \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/\rho}}{\partial x_n} - T_{/\rho} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.67})$$

$$P_2(T^*, T_{/\rho\rho}) = \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/\rho\rho}}{\partial x_n} - T_{/\rho\rho} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.68})$$

Neste caso, vale ressaltar que as condições de contorno da adjunta não são válidas, porém seus valores são conhecidos da solução da equação. As temperaturas e gradientes das equações derivadas são obtidos derivando a Eq. (B.66):

$$\begin{aligned}
 T_{1/\rho} = T_{2/\rho} &\Rightarrow T_{1/\rho\rho} = T_{2/\rho\rho} \\
 -k_1 \frac{dT_{1/\rho}}{dx} = k_2 \frac{dT_{2/\rho}}{dx} &\Rightarrow \frac{dT_{1/\rho}}{dx} = 0 \Rightarrow T_{1/\rho} = 0 \\
 -k_1 \frac{dT_{1/\rho\rho}}{dx} = k_2 \frac{dT_{2/\rho\rho}}{dx} &\Rightarrow \frac{dT_{1/\rho\rho}}{dx} = 0 \Rightarrow T_{1/\rho\rho} = 0
 \end{aligned} \tag{B.69}$$

Logo, na interface:

$$\begin{aligned}
 P_1(T^*, T_{1/\rho}) &= 0 \\
 P_2(T^*, T_{1/\rho\rho}) &= 0
 \end{aligned} \tag{B.70}$$

Estas equações são válidas para todos os demais parâmetros analisados a seguir, exceto para a condutividade térmica, cuja dedução está detalhada na seção correspondente.

B.2 DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA O CALOR ESPECÍFICO ($p_i = c$)

➤ *Condições de contorno da equação derivada*

Os três tipos possíveis de condições de contorno devem ser derivados em função do calor específico.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T} \\
 T_{/i} &= \bar{T}_{/c} = 0 \\
 T_{/ii} &= \bar{T}_{/cc} = 0
 \end{aligned} \tag{B.71}$$

Onde a notação $T_{/i}$ indica a derivada da função T em relação ao parâmetro p_i analisado, neste caso, o calor específico.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q} \\ -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= \bar{q}_{/c} = 0 \\ -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= \bar{q}_{/cc} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

onde x_n representa a variável independente de espaço (x ou y).

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q}_n + h(T - T_a) \\ -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/c}) \\ -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/cc}) \end{aligned} \quad (\text{B.73})$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é a temperatura ambiente.

d) A condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned} T &= \bar{T}_o \quad \text{em } t = t_o \\ T_{/i} &= \bar{T}_{o/c} = 0 \\ T_{/ii} &= \bar{T}_{o/cc} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

➤ **Funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$**

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ relacionadas ao parâmetro calor específico podem ser escritas, respectivamente, como:

$$S_{(c)} = -\frac{\partial(\rho c)}{\partial c} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial c} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial c} T + \frac{\partial g}{\partial c} \quad (\text{B.75})$$

$$S_{(c)} = -\rho \frac{\partial T}{\partial t}$$

$$S_{(cc)} = -\frac{\partial^2(\rho c)}{\partial c^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial^2 k}{\partial c^2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial^2(\omega \rho_s c_s)}{\partial c^2} T + \frac{\partial^2 g}{\partial c^2} - 3 \frac{\partial(\rho c)}{\partial c} \frac{\partial T_{/c}}{\partial t} +$$

$$+ 3 \frac{\partial k}{\partial c} \left(\frac{\partial^2 T_{/c}}{\partial x_n^2} \right) - 3 \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial c} T_{/c} \quad (\text{B.76})$$

$$S_{(cc)} = -3\rho \frac{\partial T_{/c}}{\partial t}$$

➤ **Concomitantes bilineares $P_1(T^*, T_{/c})$ e $P_2(T^*, T_{/cc})$**

A condição inicial e de contorno das derivadas de primeira e segunda ordens e a condição final e de contorno da equação adjunta são necessárias para determinar os concomitantes.

$$P_1(T^*, T_{/c}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/c})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/c} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.77})$$

$$P_2(T^*, T_{/cc}) = \iint_{x,y} (T^* \rho c T_{/cc})_0 dx dy + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/cc} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.78})$$

Com a condição final da equação adjunta (Eq. (4.16)) e a condição inicial da equação derivada de primeira ordem (Eq. (4.22)), o primeiro termo das Eq. (B.77) e (B.78) podem

ser anulados. A expressão do concomitante depende do tipo de condição de contorno do problema.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

Substituindo a Eq.(B.71) nas expressões dos concomitantes (Eqs.(B.77) e (B.78)), o segundo e o terceiro termo das Eqs. (B.77) e (B.78) também se anulam.

Portanto,

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/c}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/cc}) &= 0 \end{aligned} \tag{B.79}$$

b) Condição de contorno de Neumann:

Substituindo a Eq.(B.72), tem-se que:

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/c}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/cc}) &= 0 \end{aligned} \tag{B.80}$$

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin:

A partir da Eq.(B.73), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordem da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned}
 -k \frac{dT_{/c}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/c}) \\
 \frac{dT_{/c}}{T_{/c}} &= -\frac{h}{k} dx_n \\
 T_{/c} &= \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right)
 \end{aligned} \tag{B.81}$$

$$T_{/cc} = \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \tag{B.82}$$

Substituindo as Eqs. (B.81) e (B.82) nas Eq.(B.77) e (B.78):

$$P_1(T^*, T_{/c}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \cdot k \cdot \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{B.83}$$

$$P_2(T^*, T_{/cc}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \cdot k \cdot \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{B.84}$$

➤ ***Coefficientes de Sensibilidade***

Os coeficientes de sensibilidade para primeira e segunda ordem (vide Eq. (4.31) e (4.32)) relacionados à massa específica, são dados, respectivamente, por:

$$\frac{\delta R}{\delta c} = [\langle T^* \cdot S_{(c)} \rangle + P_1(T^*, T_{/c})] \tag{B.85}$$

$$\frac{\delta R}{\delta c} = [\langle T^* \cdot S_{(c)} \rangle + P_1(T^*, T_{/c})] + \frac{1}{2!} \delta c [\langle T^* \cdot S_{(cc)} \rangle + P_2(T^*, T_{/cc})] \tag{B.86}$$

B.3 DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A CONDUTIVIDADE ($p_i = k$)

➤ *Condições de contorno da equação derivada*

Os três tipos possíveis de condições de contorno devem ser derivados em função da condutividade térmica.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} T &= \bar{T} \\ T_{/i} &= \bar{T}_{/k} = 0 \\ T_{/ii} &= \bar{T}_{/kk} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.87})$$

onde a notação $T_{/i}$ indica a derivada da função T em relação ao parâmetro p_i analisado, neste caso, a condutividade.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q} \\ -\frac{d}{dk} \left(k \frac{dT}{dx_n} \right) &= \bar{q}_{/k} \Rightarrow -k \frac{dT_{/k}}{dx_n} - \frac{dT}{dx_n} = 0 \Rightarrow -k \frac{dT_{/k}}{dx_n} = \frac{dT}{dx_n} \\ -\frac{d}{dk} \left(k \frac{dT_{/k}}{dx_n} + \frac{dT}{dx_n} \right) &= \bar{q}_{/kk} \Rightarrow -k \frac{dT_{/kk}}{dx_n} - \frac{dT_{/k}}{dx_n} - \frac{dT_{/k}}{dx_n} = 0 \Rightarrow -k \frac{dT_{/kk}}{dx_n} = 2 \frac{dT_{/k}}{dx_n} \end{aligned} \quad (\text{B.88})$$

onde x_n representa a variável independente de espaço (x ou y).

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin

$$\begin{aligned}
 -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q}_n + h(T - T_a) \\
 -\frac{d}{dk} \left(k \frac{dT}{dx_n} \right) &= 0 + h(T_{/k}) \Rightarrow -k \frac{dT_{/k}}{dx_n} - \frac{dT}{dx_n} = hT_{/k} \Rightarrow -k \frac{dT_{/k}}{dx_n} = hT_{/k} + \frac{dT}{dx_n} \\
 -\frac{d}{dk} \left(k \frac{dT_{/k}}{dx_n} + \frac{dT}{dx_n} \right) &= 0 + h \frac{d}{dk} (T_{/k}) \Rightarrow -k \frac{dT_{/kk}}{dx_n} = hT_{/kk} + 2 \frac{dT_{/k}}{dx_n}
 \end{aligned} \tag{B.89}$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é a temperatura ambiente.

d) A condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T}_o \quad \text{em } t = t_o \\
 T_{/i} &= \bar{T}_{o/k} = 0 \\
 T_{/ii} &= \bar{T}_{o/kk} = 0
 \end{aligned} \tag{B.90}$$

➤ **Funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$**

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$ relacionadas ao parâmetro condutividade térmica podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}
 S_{(k)} &= -\frac{\partial(\rho c)}{\partial k} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial k} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial k} T + \frac{\partial g}{\partial k} \\
 S_{(k)} &= \frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2}
 \end{aligned} \tag{B.91}$$

$$\begin{aligned}
S_{(kk)} &= -\frac{\partial^2(\rho c)}{\partial k^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial^2 k}{\partial k^2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial^2(\omega \rho_s c_s)}{\partial k^2} T + \frac{\partial^2 g}{\partial k^2} - 3 \frac{\partial(\rho c)}{\partial k} \frac{\partial T_{/k}}{\partial t} + \\
&\quad + 3 \frac{\partial k}{\partial k} \left(\frac{\partial^2 T_{/k}}{\partial x_n^2} \right) - 3 \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial k} T_{/k} \\
S_{(kk)} &= 3 \left(\frac{\partial^2 T_{/k}}{\partial x_n^2} \right)
\end{aligned} \tag{B.92}$$

➤ **Concomitantes bilineares $P_1(T^*, T_{/k})$ e $P_2(T^*, T_{/kk})$**

De forma semelhante ao cálculo dos concomitantes para a massa específica, tem-se que:

$$P_1(T^*, T_{/k}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/k})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/k} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{B.93}$$

$$P_2(T^*, T_{/kk}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/kk})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/kk} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \tag{B.94}$$

Assim como para a massa específica, as expressões dos concomitantes dependem da condição de contorno do problema.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

Substituindo a Eq. (B.87), o segundo e o terceiro termo das Eqs. (B.93) e (B.94) também se anulam.

$$\begin{aligned}
P_1(T^*, T_{/k}) &= 0 \\
P_2(T^*, T_{/kk}) &= 0
\end{aligned} \tag{B.95}$$

b) Condição de contorno de Neumann:

Substituindo a Eq. (B.88), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordens da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT_{/k}}{dx_n} &= \frac{dT}{dx_n} \Rightarrow T_{/k} = -\frac{1}{k} T \\ -k \frac{dT_{/kk}}{dx_n} &= 2 \frac{dT_{/k}}{dx_n} \Rightarrow T_{/kk} = -\frac{2}{k} T_{/k} \end{aligned} \quad (\text{B.96})$$

Substituindo as Eqs. (B.96), (B.93) e (B.94):

$$P_1(T^*, T_{/k}) = \int \left(T \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.97})$$

$$P_2(T^*, T_{/kk}) = \int \left(2T_{/k} \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.98})$$

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin:

A partir da Eq. (B.89), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordens da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= hT_{/k} + \frac{dT}{dx_n} \Rightarrow T_{/k} = \frac{1}{h} \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - \frac{dT}{dx_n} \right] \\ -k \frac{dT_{/kk}}{dx_n} &= hT_{/kk} + 2 \frac{dT_{/k}}{dx_n} \Rightarrow T_{/kk} = \frac{1}{h} \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - 2 \frac{dT_{/k}}{dx_n} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.99})$$

Substituindo a Eq. (B.99) nas Eqs. (B.93) e (B.94):

$$P_1(T^*, T_{/k}) = \int - \left\{ \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - \frac{1}{h} \frac{dT}{dx_n} \right] k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right\} d\Gamma dt \quad (\text{B.10})$$

$$P_2(T^*, T_{/kk}) = \int - \left\{ \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - \frac{2}{h} \frac{dT_{/k}}{dx_n} \right] k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right\} d\Gamma dt \quad (\text{B.10})$$

➤ **Coeficientes de Sensibilidade**

Os coeficientes de sensibilidade para primeira e segunda ordem (vide Eq. (4.31) e (4.32)) relacionados à condutividade térmica:

$$\frac{\delta R}{\delta k} = [\langle T^* \cdot S_{(k)} \rangle + P_1(T^*, T_{/k})] \quad (\text{B.102})$$

$$\frac{\delta R}{\delta k} = [\langle T^* \cdot S_{(k)} \rangle + P_1(T^*, T_{/k})] + \frac{1}{2!} \delta k [\langle T^* \cdot S_{(kk)} \rangle + P_2(T^*, T_{/kk})] \quad (\text{B.103})$$

➤ **Múltiplos materiais**

Para o cálculo das funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ são válidos os comentários feitos para a massa específica.

Neste caso, a derivada da condição de contorno da interface (Eq. (B.66)) é dada por:

$$\begin{aligned} T_{1/k1} = T_{2/k1} &\Rightarrow T_{1/k1k1} = T_{2/k1k1} \\ -k_1 \frac{dT_{1/k1}}{dx} - \frac{dT_1}{dx} &= k_2 \frac{dT_{2/k1}}{dx} \Rightarrow \frac{dT_{1/k1}}{dx} = \frac{-1}{k_1 + k_2} \frac{dT_1}{dx} \Rightarrow T_{1/k1} = \frac{-1}{k_1 + k_2} T_1 \\ -k_1 \frac{dT_{1/k1k1}}{dx} - 2 \frac{dT_{1/k1}}{dx} &= k_2 \frac{dT_{2/k1k1}}{dx} \Rightarrow \frac{dT_{1/k1k1}}{dx} = \frac{-2}{k_1 + k_2} \frac{dT_{1/k1}}{dx} \Rightarrow \\ &\Rightarrow T_{1/k1k1} = \frac{-2}{k_1 + k_2} T_{1/k1} \end{aligned} \quad (\text{B.104})$$

Logo, na interface:

$$P_1(T^*, T_{/k}) = \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/k}}{\partial x_n} - T_{/k} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.105})$$

$$P_2(T^*, T_{/kk}) = \int \left(T^* k \frac{\partial T_{/kk}}{\partial x_n} - T_{/kk} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.106})$$

Onde as temperaturas e gradientes das equações derivadas são obtidas da Eq. (B.104).

B.4 DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA O COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR ($p_i = h$)

➤ *Condições de contorno da equação derivada*

Os três tipos possíveis de condições de contorno devem ser derivados em função do coeficiente de transferência de calor.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} T &= \bar{T} \\ T_{/i} &= \bar{T}_{/h} = 0 \\ T_{/ii} &= \bar{T}_{/hh} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.107})$$

onde a notação $T_{/i}$ indica a derivada da função T em relação ao parâmetro p_i analisado, neste caso, o coeficiente de transferência de calor.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q} \\ -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= \bar{q}_{/h} = 0 \\ -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= \bar{q}_{/hh} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.108})$$

onde x_n representa a variável independente de espaço (x ou y).

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin

$$\begin{aligned}
 -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q}_n + h(T - T_a) \\
 \frac{d}{dh} \left(-k \frac{dT}{dx_n} \right) &= \frac{d}{dh} (\bar{q}_n + h(T - T_a)) \Rightarrow -k \frac{dT_{/h}}{dx_n} = hT_{/h} + T - T_a \Rightarrow & \text{(B.} \\
 & \Rightarrow -k \frac{dT_{/h}}{dx_n} = h \left[T_{/h} - \frac{1}{h} (T_a - T) \right] & \text{10} \\
 & & \text{9)} \\
 \frac{d}{dh} \left(-k \frac{dT_{/h}}{dx_n} \right) &= \frac{d}{dh} \left\{ h \left[T_{/h} - \frac{1}{h} (T_a - T) \right] \right\} \Rightarrow -k \frac{dT_{/hh}}{dx_n} = hT_{/hh} + 2T_{/h}
 \end{aligned}$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é a temperatura ambiente.

d) A condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T}_o \quad \text{em } t = t_o \\
 T_{/i} &= \bar{T}_{o/h} = 0 \\
 T_{/ih} &= \bar{T}_{o/hh} = 0
 \end{aligned} \tag{B.110}$$

➤ **Funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$**

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ii)}$ relacionadas ao parâmetro coeficiente de transferência de calor podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}
 S_{(h)} &= -\frac{\partial(\rho c)}{\partial h} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial h} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial h} T + \frac{\partial g}{\partial h} \\
 S_{(h)} &= 0
 \end{aligned} \tag{B.111}$$

$$S_{(hh)} = 0 \tag{B.112}$$

➤ *Concomitantes bilineares $P_1(T^*, T_{/h})$ e $P_2(T^*, T_{/hh})$*

De forma semelhante ao cálculo dos concomitantes para a massa específica, tem-se que:

$$P_1(T^*, T_{/h}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/h})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/h} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.113})$$

$$P_2(T^*, T_{/hh}) = \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/hh})_0 d\Omega + \int_{\Gamma, t} \left(-T_{/hh} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.114})$$

Assim como para a massa específica, as expressões dos concomitantes dependem da condição de contorno do problema.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

Substituindo a Eq.(B.107), o segundo e o terceiro termo das Eqs. (B.113) e (B.114) também se anulam.

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/h}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/hh}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.115})$$

b) Condição de contorno de Neumann:

Substituindo a Eq.(B.108), tem-se que:

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/h}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/hh}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.116})$$

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin:

A partir da Eq.(B.109), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordens da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= h \left[T_{/h} - \frac{1}{h} (T_a - T) \right] \Rightarrow T_{/h} = \frac{1}{h} \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - (T - T_a) \right] \\ -k \frac{dT_{/hh}}{dx_n} &= h T_{/hh} + 2T_{/h} \Rightarrow T_{/hh} = \frac{1}{h} \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - 2T_{/h} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.117})$$

Substituindo a Eq. (B.117) nas Eqs. (B.113) e (B.114):

$$P_1(T^*, T_{/h}) = \int - \left\{ \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - \frac{1}{h} (T - T_a) \right] k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right\} d\Gamma dt \quad (\text{B.118})$$

$$P_2(T^*, T_{/hh}) = \int - \left\{ \left[\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) - \frac{2}{h} T_{/h} \right] k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right\} d\Gamma dt \quad (\text{B.119})$$

➤ *Coefficientes de Sensibilidade*

Os coeficientes de sensibilidade para primeira e segunda ordem (vide Eq. (4.31) e (4.32)) relacionados ao coeficiente de transferência de calor:

$$\frac{\delta R}{\delta h} = [P_1(T^*, T_{/h})] \quad (\text{B.120})$$

$$\frac{\delta R}{\delta h} = [P_1(T^*, T_{/h})] + \frac{1}{2!} \delta h [P_2(T^*, T_{/hh})] \quad (\text{B.121})$$

B.5 DEDUÇÃO DO COEFICIENTE DE SENSIBILIDADE PARA A TAXA DE PERFUSÃO SANGUÍNEA ($p_i = \omega$)

➤ *Condições de contorno da equação derivada*

Os três tipos possíveis de condições de contorno devem ser derivados em função da taxa de perfusão.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

$$\begin{aligned} T &= \bar{T} \\ T_{/i} &= \bar{T}_{/\omega} = 0 \\ T_{/ii} &= \bar{T}_{/\omega\omega} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.122})$$

onde a notação $T_{/i}$ indica a derivada da função T em relação ao parâmetro p_i analisado, neste caso, a taxa de perfusão.

b) Condição de contorno de Neumann:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q} \\ -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= \bar{q}_{/\omega} = 0 \\ -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= \bar{q}_{/\omega\omega} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.123})$$

onde x_n representa a variável independente de espaço (x ou y).

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin

$$\begin{aligned}
 -k \frac{dT}{dx_n} &= \bar{q}_n + h(T - T_a) \\
 -k \frac{dT_{/i}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/\omega}) \\
 -k \frac{dT_{/ii}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/\omega\omega})
 \end{aligned} \tag{B.124}$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor e T_a é a temperatura ambiente.

d) A condição inicial é expressa por:

$$\begin{aligned}
 T &= \bar{T}_o \quad \text{em } t = t_o \\
 T_{/i} &= \bar{T}_{o/\omega} = 0 \\
 T_{/ii} &= \bar{T}_{o/\omega\omega} = 0
 \end{aligned} \tag{B.125}$$

➤ **Funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$**

As funções $S_{(i)}$ e $S_{(ij)}$ relacionadas ao parâmetro taxa de perfusão podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}
 S_{(\omega)} &= -\frac{\partial(\rho c)}{\partial \omega} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial k}{\partial \omega} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial \omega} T + \frac{\partial g}{\partial \omega} \\
 S_{(\omega)} &= -\frac{\partial(\omega \rho_s c_s)}{\partial \omega} T + \frac{\partial(Q + \omega \rho_s c_s T_a)}{\partial \omega} \\
 S_{(\omega)} &= \rho_s c_s (T_a - T)
 \end{aligned} \tag{B.126}$$

$$\begin{aligned}
S_{(\omega\omega)} = & -\frac{\partial^2(\rho c)}{\partial\omega^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial^2 k}{\partial\omega^2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x_n^2} \right) - \frac{\partial^2(\omega\rho_s c_s)}{\partial\omega^2} T + \frac{\partial^2 g}{\partial\omega^2} - 3 \frac{\partial(\rho c)}{\partial\omega} \frac{\partial T_{/\omega}}{\partial t} + \\
& + 3 \frac{\partial k}{\partial\omega} \left(\frac{\partial^2 T_{/\omega}}{\partial x_n^2} \right) - 3 \frac{\partial(\omega\rho_s c_s)}{\partial\omega} T_{/\omega}
\end{aligned} \tag{B.127}$$

$$S_{(\omega\omega)} = -3\rho_s c_s T_{/\omega}$$

onde $g = Q + \omega\rho_s c_s T_a$

➤ **Concomitantes bilineares $P_1(T^*, T_{/\omega})$ e $P_2(T^*, T_{/\omega\omega})$**

A condição inicial e de contorno das derivadas de primeira e segunda ordens e a condição final e de contorno da equação adjunta são necessárias para determinar os concomitantes.

$$\begin{aligned}
P_1(T^*, T_{/\omega}) = & \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/\omega})_0 d\Omega + \int_{\Gamma,t} \left(-T_{/\omega} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{B.128}$$

$$\begin{aligned}
P_2(T^*, T_{/\omega\omega}) = & \int_{\Omega} (T^* \rho c T_{/\omega\omega})_0 d\Omega + \int_{\Gamma,t} \left(-T_{/\omega\omega} k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt
\end{aligned} \tag{B.129}$$

Com a condição final da equação adjunta (Eq. (4.18)) e a condição inicial da equação derivada de primeira ordem (Eq. (4.22)), o primeiro termo das Eq. (B.128) e (B.129) podem ser anulados. A expressão do concomitante depende do tipo de condição de contorno do problema.

a) Condição de contorno de Dirichlet:

Substituindo a Eq.(B.122) nas expressões dos concomitantes (Eqs. (B.128) e (B.129)), o segundo e o terceiro termo das Eqs. (B.128) e (B.129) também se anulam.

Portanto,

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/\omega}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/\omega\omega}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.130})$$

b) Condição de contorno de Neumann:

Substituindo a Eq.(B.123), tem-se que:

$$\begin{aligned} P_1(T^*, T_{/\omega}) &= 0 \\ P_2(T^*, T_{/\omega\omega}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.131})$$

c) Condição de contorno de Cauchy ou Robin:

A partir da Eq.(B.124), é possível obter uma expressão para as derivadas de primeira e segunda ordens da temperatura ($T_{/i}$ e $T_{/ii}$) no contorno:

$$\begin{aligned} -k \frac{dT_{/\omega}}{dx_n} &= 0 + h(T_{/\omega}) \\ \frac{dT_{/\omega}}{T_{/\omega}} &= -\frac{h}{k} dx_n \\ T_{/\omega} &= \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \end{aligned} \quad (\text{B.132})$$

$$T_{/\omega\omega} = \exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) \quad (\text{B.133})$$

Substituindo as Eqs. (B.132) e (B.133) nas Eq. (B.128) e (B.129):

$$P_1(T^*, T_{/\omega}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.134})$$

$$P_2(T^*, T_{/\omega\omega}) = \int \left(-\exp\left(-\frac{h}{k} x_n\right) k \frac{\partial T^*}{\partial x_n} \right) d\Gamma dt \quad (\text{B.135})$$

➤ *Coefficientes de Sensibilidade*

Os coeficientes de sensibilidade para primeira e segunda ordem (vide Eq. (4.31) e (4.32)) relacionados à taxa de perfusão, são dados, respectivamente, por:

$$\frac{\delta R}{\delta \rho} = [\langle T^* \cdot S_{(\omega)} \rangle + P_1(T^*, T_{/\omega})] \quad (\text{B.136})$$

$$\frac{\delta R}{\delta \omega} = [\langle T^* \cdot S_{(\omega)} \rangle + P_1(T^*, T_{/\omega})] + \frac{1}{2!} \delta \omega [\langle T^* \cdot S_{(\omega\omega)} \rangle + P_2(T^*, T_{/\omega\omega})] \quad (\text{B.137})$$

ANEXO C

C.1 DERIVADAS DE FRECHET

Dada uma expressão $m(f)$ e um incremento d em relação à f , podemos escrever que:

$$m(f + d) - m(f) = F(d, f) + w(d, f) \quad (\text{C.138})$$

onde $F(d, f)$ é linear e:

$$\lim_{\|d\| \rightarrow 0} \frac{\|w(d, f)\|}{\|d\|} = 0 \quad (\text{C.139})$$

$F(d, f)$ é chamada diferencial de Frechet e o operador linear $F[., f]$ é a derivada de Frechet. Ao longo do texto, ela foi indicada com a simbologia $\bar{\partial}m/\partial f$. A seguir são apresentados alguns exemplos.

➤ 1º exemplo

Seja um operador linear \underline{L} , e um produto dado pela expressão a seguir:

$$g = \underline{L}f \quad (\text{C.140})$$

A derivada de Frechet ($\bar{\partial}/\partial f$) da Eq. (C.140) é:

$$\frac{\bar{\partial}g}{\partial f} = \underline{L}(\cdot) \quad (\text{C.141})$$

O símbolo (\cdot) é usado para indicar que a derivada do tipo Frechet é um operador e não apenas uma quantidade escalar.

➤ **2º exemplo**

A expressão mais simples para um operador linear é um escalar (um parâmetro p). Neste caso, tem-se que:

$$\frac{\bar{\partial}(pf)}{\partial f} = p(\cdot) \quad (\text{C.142})$$

No caso de as operações lineares usadas serem representadas por derivadas e integrais, podemos ter que:

$$\frac{\bar{\partial}}{\partial f} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} (\cdot) \quad (\text{C.143})$$

$$\frac{\bar{\partial}}{\partial f} \left[\int k(x) f(x) dx \right] = \int k(x) dx (\cdot) \quad (\text{C.144})$$

onde $k(x)$ é uma função de x .

➤ **3º exemplo**

Considerando um exemplo de operador não linear $q(f)$. Neste caso a derivada de Frechet será:

$$\frac{\bar{\partial}}{\partial f} (qf) = \frac{\bar{\partial}q}{\partial f} f + \frac{\bar{\partial}f}{\partial f} = \left(f \frac{\partial q}{\partial f} + q \right) (\cdot) \quad (\text{C.145})$$

Tomando exemplos mais complexos, temos a seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(q \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) \quad (\text{C.146})$$

A derivada de Frechet da Eq. (C.146) é dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\partial}}{\partial f} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(q \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right) \right] &= \left[\frac{\partial}{\partial x} \frac{\bar{\partial}}{\partial f} \left(q \frac{\partial f}{\partial x} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial q}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial x} + q \frac{\partial}{\partial x} \right) (\cdot) \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial q}{\partial f} + q \frac{\partial}{\partial x} \right) (\cdot) \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial [q(\cdot)]}{\partial x} \right\} = \frac{\partial^2 [q(\cdot)]}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (\text{C.147})$$

➤ **5º exemplo**

O exemplo a seguir mostra um caso onde uma diferenciação dupla de Frechet é realizada. Considerando uma variável f dada por:

$$\underline{f} = \begin{vmatrix} z \\ y \end{vmatrix} \quad (\text{C.148})$$

Governado pela equação não linear:

$$\underline{m}(\underline{f} | \underline{p}) = \begin{vmatrix} k z \\ z \underline{L} y \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} h_z \\ h_y \end{vmatrix} = \underline{0} \quad (\text{C.149})$$

Onde \underline{L} é um operador linear e dependente de \underline{p} ; k e \underline{p} são dependentes de y e h_z e h_y termos fonte dependentes de \underline{p} . O operador H definido pela Eq. (3.17) é dado por:

$$H = \frac{\bar{\partial} m}{\partial f} = \begin{vmatrix} k(\cdot) & \frac{\partial k}{\partial y} z(\cdot) \\ (\cdot) \underline{L} y & z \underline{L}(\cdot) \end{vmatrix} \quad (\text{C.150})$$

onde o símbolo (\cdot) se refere a uma derivada de Frechet.