

**MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
CURSO DE MESTRADO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

CAROLINA FERREIRA LOPES

**PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DA VARIAÇÃO ESPACIAL
DA PERFUSÃO SANGUÍNEA EM PROBLEMAS DE
BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR**

**Rio de Janeiro
2009**

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

CAROLINA FERREIRA LOPES

**PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DA VARIAÇÃO ESPACIAL
DA PERFUSÃO SANGUÍNEA EM PROBLEMAS DE
BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Cap. Aldélio Bueno Caldeira – D. C.

Orientador: Prof. Marcelo José Colaço – D. C.

Co-orientador: Prof. Francesco Scofano Neto – D. C.

Rio de Janeiro

2009

c2009

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha
Rio de Janeiro – RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmar ou adotar qualquer forma de arquivamento.

São permitida a menção, a reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do(s) autor(es) e do(s) orientador(es).

616.994 Lopes, Carolina Ferreira Lopes.
L864p Problema inverso de estimativa da variação espacial da perfusão sanguínea em problemas de biotransferência de calor / Carolina Ferreira Lopes – Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2009.
143 p. :il., graf., tab.

Dissertação (mestrado) – Instituto Militar de Engenharia – Rio de Janeiro, 2009.

1. Câncer – tratamento 2. Hipertermia – procedimento clínico 3. Biotransferência de calor – problema 4. Coeficiente de perfusão I. Instituto Militar de Engenharia. II. Título

CDD 616.994

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

CAROLINA FERREIRA LOPES

**PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DA VARIAÇÃO ESPACIAL
DA PERFUSÃO SANGUÍNEA EM PROBLEMAS DE
BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Cap. Aldélio Bueno Caldeira – D. C.

Orientador: Prof. Marcelo José Colaço – D. C.

Co-orientador: Prof. Francesco Scofano Neto – D. C.

Aprovada em 26 de maio de 2009 pela seguinte Banca Examinadora:

Cap. Aldélio Bueno Caldeira – D. C. do IME

Prof. Marcelo José Colaço – D. C. do IME

Prof. Francesco Scofano Neto – D. C. do IME

Prof. Helcio Rangel Barreto Orlande – Ph. D. da UFRJ

Rio de Janeiro

2009

Aos meus pais, Maria de Lourdes Ferreira Lopes e Walter Lopes Filho, por suas histórias de sucesso na educação dos filhos, diante de todas as adversidades.

Ao meu mestre Daisaku Ikeda (Fundador da Soka Gakkai Internacional e da Escola Soka do Brasil), por suas orientações contidas de profunda sabedoria e benevolência.

Ao meu noivo, Marcus Vinicius Costa de Souza, pelo apoio incondicional.

A todos àqueles que acreditam que a coragem e o erro são caminhos para as grandes realizações

AGRADECIMENTOS

Aos meus primeiros amigos e incentivadores, meus pais Maria de Lourdes e Walter, os mais profundos agradecimentos por suas sábias palavras e pela confiança que me inculcaram para realizar os meus sonhos. Por todo o amor e carinho, e toda ajuda e motivação.

Ao meu noivo Marcus Vinícius, que me apoiou e compartilhou os bons e maus momentos. Por ser o melhor companheiro que eu poderia ter. Pela força, pela paciência e por sempre acreditar em mim.

A Daisaku Ikeda, um mestre de vida.

Aos meus amigos, colegas, professores e funcionários do departamento de engenharia mecânica, que de uma forma ou de outra (fornecendo idéias e/ou críticas) me ajudaram no desenvolvimento deste trabalho.

Ao meu orientador e co-orientadores Aldélio Caldeira, Marcelo Colaço e Francesco Scofano pela disposição em ouvir com interesse e ânimo todas as questões, dúvidas e problemas que surgiam durante o processo desta pesquisa. Pela compreensão silenciosa dos momentos difíceis pelos quais passei, permitindo que meu tempo interno fluísse, respeitosamente.

A CAPES, pelo apoio financeiro, que foi de suma importância para viabilizar esta pesquisa.

A todas as pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a concretização deste trabalho.

“... a determinação na vida de cada indivíduo, a cada momento, tem a força capaz de modificar o mundo. Mudar o mundo, nada mais é que mudar a si mesmo”.
DAISAKU IKEDA

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	9
LISTA DE TABELAS	16
LISTA DE SÍMBOLOS	19
LISTA DE SIGLAS	21
1 INTRODUÇÃO	24
1.1 Justificativa e objetivos do trabalho	26
1.2 Organização do trabalho.....	27
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	28
3 PROBLEMA PROPOSTO E DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO	34
3.1 Problema físico.....	34
3.2 Formulação matemática	35
3.3 Adimensionalização do modelo matemático.....	36
4 PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DE PARÂMETROS	38
4.1 Problema Direto	38
4.1.1 Reprodução da solução de AZEVEDO et al. (2006)	38
4.2 Análise de Sensibilidade	47
4.3 Métodos de otimização para estimativa de parâmetros.....	52
4.3.1 Métodos Determinísticos.....	53
4.3.2 Métodos Heurísticos.....	54
4.4 Resultados para a estimativa do coeficiente da perfusão sanguínea	54
5 PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DE FUNÇÕES.....	65
5.1 Método de otimização para estimativa de função	66
5.2 Solução numérica do Problema Direto.....	69

5.3	Validação da solução numérica do Problema Direto	74
5.4	Problema de Sensibilidade	78
5.5	Problema Adjunto	80
5.6	Equação Gradiente	83
5.7	Resultados para a estimativa da perfusão sanguínea.....	84
5.7.1	Estimativa da perfusão sanguínea na forma funcional constante.....	85
5.7.2	Estimativa da perfusão sanguínea na forma funcional unidimensional	91
5.7.3	Estimativa da perfusão sanguínea na forma funcional bidimensional	121
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	137
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	139

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG.3.1	Diagrama esquemático de um tecido orgânico.....	34
FIG.4.1	Evolução temporal do perfil de temperatura para $A = 1.0$	40
FIG.4.2	Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.8$	41
FIG.4.3	Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.9$	42
FIG.4.4	Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.96$	42
FIG.4.5	Estudo da convergência para $Pf = 5$ em $Y = 0.8$	43
FIG.4.6	Estudo da convergência para $Pf = 5$ em $Y = 0.9$	43
FIG.4.7	Estudo da convergência para $Pf = 5$ em $Y = 0.96$	44
FIG.4.8	Coeficiente de sensibilidade relativo a perfusão 0.1 e 5, $G = 1$	49
FIG.4.9	Coeficiente de sensibilidade relativo a perfusão 0.1 e 5, $G = 2.48$	52
FIG.4.10	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a $Pf = 0.1$ e $Y = 0.8$	60
FIG.4.11	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a $Pf = 0.1$ e $Y = 0.9$	60
FIG.4.12	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a $Pf = 0.1$ e $Y = 0.96$	61
FIG.4.13	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a $Pf = 5$ e $Y = 0.8$	61

FIG.4.14	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a Pf = 5 e Y = 0.9	62
FIG.4.15	Perfil de temperatura para Pf estimado pelo método PS relativo a Pf = 5 e Y = 0.96	62
FIG.4.16	Histórico de convergência relativo a estimativa de Pf = 0.1	63
FIG.4.17	Histórico de convergência relativo a estimativa de Pf = 5	63
FIG.5.1	Nomenclatura dos volumes finitos	69
FIG.5.2	Solução numérica e analítica, Pf = 0.1, Y = 0.5, G = 1 e $\Delta\tau = 0.001$	75
FIG.5.3	Solução numérica e analítica, Pf = 0.1, Y = 0.5, G = 1 e $\Delta\tau = 0.01$	76
FIG.5.4	Solução numérica e analítica, Pf = 5, Y = 0.5, G = 1 e $\Delta\tau = 0.001$	76
FIG.5.5	Solução numérica e analítica, Pf = 5, Y = 0.5, G = 1 e $\Delta\tau = 0.01$	77
FIG.5.6	Estimativa da perfusão com sensores em todos os pontos, Pf = 5 e G = 2.48	86
FIG.5.7	Estimativa ampliada da perfusão com sensores em todos os pontos, Pf = 5 e G = 2.48 (detalhe)	86
FIG.5.8	Estimativa da perfusão com sensores em Y = 0.9, Pf = 5 e G = 2.48	87
FIG.5.9	Estimativa ampliada da perfusão com sensores em Y = 0.9, Pf = 5 e G = 2.48 (detalhe).....	87
FIG.5.10	Evolução do funcional objetivo com sensores em todos os pontos, para a estimativa da perfusão com variação constante.....	90
FIG.5.11	Evolução do funcional objetivo com sensores em Y = 0.9, para a estimativa da perfusão com variação constante.....	90

FIG. 5.13	Estimativa da perfusão com forma senoidal e sensores localizados em $Y = 0.9$...	92
FIG.5.14	Evolução do funcional objetivo com sensores em todos os pontos, para a estimativa da perfusão com variação senoidal	93
FIG.5.15	Evolução do funcional objetivo com sensores em $Y = 0.9$, para a estimativa da perfusão com variação senoidal.....	94
FIG.5.16	Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	96
FIG.5.17	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	96
FIG.5.18	Estimativa da perfusão com forma funcional triangular utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	97
FIG.5.19	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	97
FIG.5.20	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	98
FIG.5.21	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	98
FIG.5.22	Estimativa da perfusão com forma funcional degrau utilizando malha	99
FIG.5.23	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$	99
FIG.5.24	Estimativa da perfusão com forma funcional constante, utilizando uma malha 100×100 e com 100 e 50 sensores	101
FIG.5.25	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional constante, utilizando malha 100×100 e com 100 e 50 sensores	102

FIG.5.26	Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 e 50 sensores	103
FIG.5.27	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores	104
FIG.5.28	Estimativa da perfusão com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 e 50 sensores	104
FIG.5.29	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores	105
FIG.5.30	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores.....	105
FIG.5.31	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores.....	106
FIG.5.32	Estimativa da perfusão com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores.....	106
FIG.5.33	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores	107
FIG.5.34	Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores.....	110
FIG.5.35	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores	110
FIG.5.36	Estimativa da perfusão com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores.....	111
FIG.5.37	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores	111

FIG.5.38	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores.....	112
FIG.5.39	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores	112
FIG.5.40	Estimativa da perfusão com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores.....	113
FIG.5.41	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores	113
FIG.5.42	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com medidas livres de erros.....	115
FIG.5.43	Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com medidas livre de erros	116
FIG.5.44	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 1% da temperatura local	116
FIG.5.45	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 1% da temperatura local	117
FIG.5.46	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 5% da temperatura local	117
FIG.5.47	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 5% da temperatura local	118
FIG.5.48	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 10000 sensores e medidas livres de erros	120
FIG.5.49	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 10000 sensores e medidas livres de erros.....	121

FIG.5.50	Função Quadrada (Bidimensional).....	122
FIG.5.51	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-5} , estimativa inicial 4.5, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30.....	123
FIG.5.52	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-5} , estimativa inicial 0.1, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30.....	123
FIG.5.53	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30	124
FIG.5.54	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-11} , estimativa inicial 0.1, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 100x100.....	125
FIG.5.55	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 100x100	125
FIG.5.56	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e uma malha 100x100.....	126
FIG.5.57	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e uma malha 100x100	126
FIG.5.58	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com sensores em todos os pontos do domínio, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura.....	127
FIG.5.59	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 100 sensores, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local.....	128
FIG.5.60	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada com sensores em todos os pontos do domínio, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local	128

FIG.5.61	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada), com 100 sensores, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local	129
FIG.5.62	Função Quadrada (Bidimensional – 2 quadrados).....	130
FIG.5.63	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio	130
FIG.5.64	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio	131
FIG.5.65	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 199 sensores e malha 100x100.....	132
FIG.5.66	Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e malha 100x100.....	132
FIG.5.67	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 199 sensores e malha 100x100.....	133
FIG.5.68	Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e malha 100x100.....	133
FIG.5.69	Estimativa da perfusão de um tumor na próstata, com 100 sensores, $P_f = 12$ e $\sigma = 0.01 \theta_{\max}$	135
FIG.5.70	Estimativa da perfusão de um tumor na próstata, com 100 sensores, $P_f = 60$ e $\sigma = 0.01 \theta_{\max}$	136
FIG.5.71	Evolução do funcional objetivo para a estimativa do tumor na próstata	136

LISTA DE TABELAS

TAB.4.2	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.8$ para $Pf = 0.1$	45
TAB.4.3	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.9$ para $Pf = 0.1$	45
TAB.4.4	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.96$ para $Pf = 0.1$	46
TAB.4.5	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.8$ para $Pf = 5$	46
TAB.4.6	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.9$ para $Pf = 5$	46
TAB.4.7	Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.96$ para $Pf = 5$	47
TAB.4.8	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.8$ para $Pf = 0.1$	49
TAB.4.9	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.9$ para $Pf = 0.1$	50
TAB.4.10	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.96$ para $Pf = 0.1$	50
TAB.4.11	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.8$ para $Pf = 5$..	51
TAB.4.12	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.9$ para $Pf = 5$..	51
TAB.4.13	Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.96$ para $Pf = 5$	51
TAB.4.14	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método LM para $Pf = 0.1$ e $G = 1$	56
TAB.4.15	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método GC para $Pf = 0.1$ e $G = 1$	56

TAB.4.16	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método BFGS para $P_f = 0.1$ e $G = 1$	57
TAB.4.17	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método DE para $P_f = 0.1$ e $G = 1$	57
TAB.4.18	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 0.1$ e $G = 1$	57
TAB.4.19	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método LM para $P_f = 5$ e $G = 1$	57
TAB.4.20	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método GC para $P_f = 5$ e $G = 1$	58
TAB.4.21	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método BFGS para $P_f = 5$ e $G = 1$	58
TAB.4.22	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método DE para $P_f = 5$ e $G = 1$	59
TAB.4.23	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 5$ e $G = 1$, com 20 iterações	59
TAB.4.24	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 0.1$ e $G = 2.48$ com 20 iterações	64
TAB.4.25	Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 5$ e $G = 2.48$ com 20 iterações	64
TAB.5.1	Comparações entre solução numérica e analítica para o caso $P_f = 0.1$	77
TAB.5.2	Comparações entre solução numérica e analítica para o caso $P_f = 5$	78
TAB.5.3	Erro relativo na estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em todos os pontos e estimativa inicial 4.5	88
TAB.5.4	Erro relativo na estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em todos os pontos e estimativa inicial 10	88
TAB.5.5	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em $Y = 0.9$ e estimativa inicial 4.5	89

TAB.5.6	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em $Y = 0.9$ e estimativa inicial 10.....	89
TAB.5.7	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal com estimativa inicial 4.5.....	92
TAB.5.8	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal com estimativa inicial 10.....	93
TAB.5.9	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal, triangular, quadrada, degrau, utilizando malha 100x100 e 100 sensores	100
TAB.5.10	Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, utilizando malha 100x100 e 100 ou 50 sensores.....	102
TAB.5.11	Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, com 100 sensores.....	108
TAB.5.12	Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, com 50 sensores.....	108
TAB.5.13	Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, com 100 sensores.....	114
TAB.5.14	Estimativa da perfusão sanguínea com forma quadrada para diversos arranjos de sensores	119
TAB.5.15	Estimativa da perfusão sanguínea com forma bidimensional, com 10000 ou 100 sensores	129
TAB.5.16	Estimativa da perfusão sanguínea com forma bidimensional para diversos arranjos de sensores.....	134

LISTA DE SÍMBOLOS

- A – Razão de aspecto
- Bi – Número de Biot
- c – Calor Específico ($J/Kg^{-1}K^{-1}$)
- G – Fonte de calor, adimensional
- g – Fonte volumétrica de geração de calor (W/m^3)
- g_0 – Fonte de referência para geração de calor (W/m^3)
- h – Coeficiente de transferência de calor (W/m^3)
- k – Condutividade térmica ($Wm^{-1}k^{-1}$)
- L – Comprimento do tecido (m)
- l – Altura do tecido (m)
- M – Norma relativa a autofunção
- N – Norma relativa a autofunção
- Pf – Coeficiente adimensional de perfusão
- T – Temperatura no tecido ($^{\circ}C$)
- T_0 – Temperatura inicial no tecido ($^{\circ}C$)
- T_a – Temperatura arterial ($^{\circ}C$)
- T_p – Temperatura na superfície superior do tecido ($^{\circ}C$)
- T_{∞} – Temperatura dos vasos sanguíneos ($^{\circ}C$)
- t – Tempo (s)
- X – Abscissa, adimensional
- x – Abscissa do tecido (m)
- Y – Ordenada, adimensional
- y – Ordenada do tecido (m)
- w_s – Coeficiente de perfusão do sangue ($m^3s^{-1}m^{-3}$)
- α – Difusividade térmica (m^2/s)
- β – Autovalor, adimensional
- μ – Autovalor, adimensional
- γ – Autovalor, adimensional
- $\bar{\theta}$ – Temperatura transformada, adimensional

- ρ – Massa específica (kg m^{-3})
- θ_0 – Temperatura inicial, adimensional
- ψ – Autofunção
- λ – Autofunção

SUBSCRITO

- i – índice relativo a autovalores
- m – índices relativos a autovalores
- j – índice relativo a autovalores
- n – índices relativos a autovalores
- s – relativo a sangue
- t – relativo ao tecido

LISTA DE SIGLAS

ABRALE	Associação Brasileira de Linfoma e Leucemia
ADI	Método Implícito de Direções Alternadas
API	Aquisição de Pontos em Imagens
BEM	Método de Elemento do Contorno
BFGS	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
BHTE	Equação da Biotransferência de Calor
DE	Evolução Diferenciada
DFP	Método Quase-Newton de Davidon-Fletcher-Powell
EDP	Equações Diferenciais Parciais
GA	Algoritmo Genético
INCA	Instituto Nacional do Câncer
LMA	Algoritmo de Levenberg-Marquadt
MMC	Método Monte Carlo
MGC	Método do Gradiente Conjugado
MSF	Método de Soluções Fundamentais
MVF	Método dos Volumes Finitos
NM	Método Simplex de Nelder-Mead
PS	Enxame de Partículas
SQP	Programação Quadrática Seqüencial

RESUMO

O procedimento clínico de hipertermia, empregando microondas, é utilizado no tratamento do câncer. O aquecimento do tecido lesionado a uma temperatura de 44°C promove a destruição das células neoplásicas e a estagnação ou regressão do tumor. Entretanto, a execução inadequada deste procedimento, pode lesionar termicamente tecidos saudáveis circunvizinhos ao tumor.

O presente trabalho tem por objetivo estudar o problema de biotransferência de calor durante o procedimento clínico de hipertermia, utilizando um modelo físico-matemático. Neste modelo, a equação de Pennes bidimensional transiente é adotada, considerando termos fontes representativos dos efeitos metabólicos, de perfusão sanguínea e da irradiação externa.

Técnicas de problema inverso são empregadas para a estimativa da perfusão sanguínea, a qual pode ser modelada como um parâmetro ou como uma função. Métodos determinísticos (Levenberg-Marquadt, Gradiente Conjugado e Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) e heurísticos (Evolução Diferenciada e Enxame de Partículas) são empregados para a estimativa de parâmetro, enquanto que para a estimativa de função é usado o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto.

Experimentos, com e sem introdução de erros randômicos, são simulados permitindo a execução e a análise comparativa dos resultados obtidos por diferentes métodos. Ademais, foi avaliado o número de sensores sobre as estimativas, bem como a capacidade de identificação de tumores.

A análise dos resultados indica, dentro dos critérios avaliados, que é possível estimar a perfusão como parâmetro e na forma funcional com variação unidimensional. Para o caso em que a perfusão possui variação bidimensional, o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto apresentou algumas limitações. Entretanto, sem a inserção de ruídos nas medidas simuladas, o método foi capaz de localizar o(s) tumor(es).

ABSTRACT

The clinical procedure of hyperthermia, using microwave, is used in the treatment of cancer. The heating of the injured tissue to a temperature of 44°C promotes the destruction of neoplastic cells and the stagnation or regression of the tumor. However, the inadequate implementation of this procedure, may occur thermal injury in healthy tissue surrounding the tumor.

This work aims to study the problem of bioheat transfer during the clinical procedure of hyperthermia, using a mathematical-physical model. In this model, the Pennes' equation of two-dimensional and transient is adopted, considering source terms representing the metabolic effects of blood perfusion and external irradiation.

Inverse problem techniques are employed to estimate the blood perfusion, which can be modeled as a parameter or a function. Deterministic methods (Levenberg-Marquadt, Conjugate Gradient and Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanna) and heuristic (Differential Evolution and Particle Swarm) are used to estimate the parameter, while for the estimated function is used the Conjugated Gradient Method with Adjoint Problem.

Experiments with and without introduction of random errors are simulated allowing for the implementation and comparison of the results obtained by different methods. In addition, it was estimated the number of sensors on the estimates and the ability to identify tumors.

Analyzing the results within the criteria evaluated, it is possible to estimate the perfusion as a parameter and functional form with one-dimensional variation. For the case in which the perfusion has two-dimensional variation, the Conjugate Gradient Method with Adjoint Problem presented some constraints. Therefore, the estimate in this situation depends on the initial guess provided. However, without the addition of noise in the simulated measurements, the method was able to find the tumor(s).

1 INTRODUÇÃO

O câncer ou neoplasia maligna é uma doença caracterizada pelo crescimento aleatório de um conjunto específico de células, que se multiplicam rapidamente, invadindo e danificando tecidos ou órgãos adjacentes. Por meio de um processo denominado metástase, pode haver um espalhamento destas células por diversas regiões do corpo humano. Um tumor é denominado benigno ou maligno dependendo da propriedade das células anômalas que o formam. Se estas apresentam crescimento rápido e aleatório, o tumor é dito maligno. No entanto, alguns tumores benignos têm a capacidade de se transformar em malignos (CARDOSO, 2003).

O câncer é classificado de acordo com o tecido a partir do qual as células são oriundas. Os tipos mais conhecidos são: carcinoma (pulmão, cólon, mama e ovários), sarcoma (ossos, cartilagem, gordura e músculos), linfoma (linfonodos do sistema imunológico do organismo) e leucemia (em células do sangue) (DISANT'AGNESE, 2000).

Os fatores que aumentam o risco da incidência do câncer no ser humano podem ser encontrados no ambiente físico, ser herdados ou representar hábitos ou costumes próprios de um determinado ambiente social e cultural, como por exemplo: exposição excessiva à radiação solar, tabagismo, alcoolismo e excesso de gordura na alimentação (INCA, 2008).

Os sintomas podem ser classificados em três grupos: locais (originam a formação de caroços, inchaços, hemorragias e dor), sistêmicos (acarretam perda de peso, falta de apetite, cansaço, anemia, transpiração excessiva) e de metástase (provocam linfonodos aumentados, tosse, aumento do fígado, dor óssea) (ABRALE, 2008).

A detecção precoce da doença significa realizar o diagnóstico no estágio pré-sintomático, ou seja, antes da manifestação de algum sintoma relacionado à doença no indivíduo. Um diagnóstico definitivo requer uma examinação histológica da biópsia do tecido afetado por um patologista. Deste modo, o tratamento se torna mais efetivo, a fim de diminuir a mortalidade ocasionada pela doença. Uma vez diagnosticado, o tratamento é imediatamente implementado através de uma combinação das seguintes técnicas: cirurgia, quimioterapia, radioterapia, hipertermia, imunoterapia e medicamentos para tratar dos efeitos colaterais (CARMO et al., 2005).

A cirurgia é uma técnica radical, a qual consiste na retirada do órgão afetado pela doença, ocasionando inúmeras alterações fisiológicas nos pacientes. Na radioterapia o tumor é destruído através da aplicação de um feixe de radiação ionizante. A quimioterapia é um

método baseado na utilização de substâncias químicas que atuam na síntese das enzimas celulares, evitando a proliferação das células neoplásicas. A imunoterapia utiliza substâncias que estimulam o sistema imunológico a produzir linfócitos e monócitos, responsáveis pelo crescimento celular (INCA, 2008).

A hipertermia por rádio-frequência (microondas) é uma técnica terapêutica utilizada no tratamento do câncer. Ela possui uma ação complementar na eficácia da radioterapia e da quimioterapia, potencializando a eficiência do tratamento, e posteriormente, reduzindo o tumor. Tal procedimento médico consiste no uso de um dispositivo externo que propicia a elevação da temperatura da região afetada. As células cancerígenas sofrem uma lesão no DNA ao serem submetidas a temperaturas acima de 44°C. Conseqüentemente, ocorre a inativação destas células malignas (LIMA et al., 2006).

Valores distintos para a temperatura ideal no tratamento de tumores por hipertermia são observados na literatura. RAWNLEY et al. (1994) reportam que a temperatura do tratamento hipertérmico para tumores malignos não deve superar 42.5°C. GIERING et al (1995) assumem uma variação térmica de 41.5 a 50°C. No entanto, RIVOLTA et al. (1999) obtiveram a regressão completa ou parcial de tumores, aquecendo o tecido a temperaturas entre 41 e 43°C.

O principal desafio associado ao sucesso do tratamento consiste em se obter uma distribuição homogênea de energia somente na região do tumor. A perfusão sanguínea é um dos responsáveis por diferentes valores no perfil de temperatura da região afetada (LIMA et al., 2006). Portanto, é fundamental identificar a perfusão sanguínea durante o tratamento. Dessa forma, o presente trabalho pretende estimar o coeficiente de perfusão sanguínea via técnicas de problemas inversos.

A modelagem do processo biológico é governada pela equação de PENNES (1948), oriunda da equação de condução de calor, a qual inclui a perfusão sanguínea e um termo específico, referente a combinação dos efeitos da geração de calor metabólico e da irradiação externa durante o tratamento por hipertermia. Vale ressaltar, no entanto, que a perfusão sanguínea é modelada neste problema de hipertermia, como um sumidouro de energia, pois remove calor do tecido. Além disso, este termo é considerado como parâmetro e depois como função.

A identificação do parâmetro é obtida inicialmente, mediante a aplicação de métodos determinísticos (Levenberg-Marquadt, Gradiente Conjugado e Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) e heurísticos (Evolução Diferenciada e Enxame de Partículas). Para a estimativa da

perfusão com variação funcional é empregado o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto.

A fim de avaliar a eficiência dos métodos, é conduzida uma simulação de experimentos, com e sem a inserção de erros nas temperaturas medidas simuladas.

1.1 JUSTIFICATIVA E OBJETIVOS DO TRABALHO

Segundo o INCA (Instituto Nacional do Câncer), o câncer constitui a terceira causa de morte em nosso país, perdendo apenas para causas externas, como acidentes de trânsito, e mortes por doenças cardíacas. Por isso, o estudo para o desenvolvimento e aperfeiçoamento das técnicas usadas no tratamento da doença é importante, pois constitui uma questão de saúde pública nacional. Conforme algumas publicações, vistas na revisão bibliográfica, é fundamental modelar o processo de biotransferência de calor e estimar a perfusão sanguínea do tecido submetido à hipertermia. Isto faz com que seja possível manter o controle das temperaturas atingidas na região do tumor durante tratamentos envolvendo hipertermia e impedi-se que um aquecimento inadequado provoque lesões irreversíveis nos tecidos sadios.

O presente trabalho tem como objetivo contribuir na investigação da viabilidade da utilização de técnicas de Problema Inverso na modelagem do processo de biotransferência de calor em tecidos com tumores modelados pela equação de Pennes. Nas primeiras simulações a perfusão sanguínea será estimada como um parâmetro. Posteriormente, esta será identificada com forma funcional constante, senoidal, triangular, quadrada e degrau. Neste caso, a perfusão passará a ser tratada como uma função com dependência espacial unidimensional ou bidimensional.

1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

A presente dissertação está dividida em seis capítulos, dispostas da seguinte forma.

O Capítulo 1 apresenta os objetivos que motivaram a elaboração do trabalho, bem como a metodologia aplicada ao mesmo.

Uma revisão bibliográfica é apresentada no capítulo 2, dissertando sobre os conceitos e modelos em biotransferência de calor. Especificamente, em tecidos irrigados por sangue durante um tratamento por hipertermia.

No Capítulo 3 é descrito o modelo físico-matemático, a Equação de Biotransferência de Calor e a adimensionalização da formulação matemática do problema.

O Capítulo 4 refere-se ao Problema Inverso de estimativa de parâmetro. Inicialmente, é apresentada a reprodução da solução analítica de AZEVEDO et al. (2006) para o Problema Direto. Cujas soluções analíticas são obtidas por meio do Método da Transformada Integral Clássica. A solução do Problema Direto determina o campo de temperatura na região de interesse. Estas informações serão utilizadas como dados de entrada para a solução do Problema Inverso. No entanto, para avaliar a possibilidade ou não de estimar o parâmetro, é apresentada uma análise de sensibilidade. Assim, são expostas as técnicas de otimização utilizadas para a estimativa de parâmetro.

No Capítulo 5, a solução do Problema Inverso para estimativa de função é desenvolvida por meio do Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto. Dessa forma, é necessário obter a solução do Problema de Sensibilidade e do Problema adjunto. Para esta finalidade é empregado o Método dos Volumes Finitos. A fim de verificar sua implementação, o Problema Direto é solucionado pelo mesmo e validado com a solução analítica de AZEVEDO et al. (2006), exibida no capítulo 4.

O Capítulo 6 traz as conclusões obtidas neste trabalho, além de sugestões para trabalhos futuros que possam vir a ser abordadas.

Por fim, são apresentadas as referências bibliográficas utilizadas nesta pesquisa.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A presente revisão bibliográfica aborda conceitos e modelos em biotransferência de calor em tecidos irrigados por sangue durante um tratamento por hipertermia, bem como algumas técnicas de problemas inversos utilizadas na estimativa de parâmetros ou funções.

Durante as últimas décadas, tem-se notado um número crescente de pesquisas sobre a aplicação de modelos matemáticos na dinâmica de processos biológicos, com objetivo de promover uma compreensão acerca de sua complexibilidade.

O primeiro modelo matemático que descreveu a transferência de calor em tecido humano foi proposto por Harry Pennes (PENNES, 1948). Esta formulação incluía os efeitos do fluxo sanguíneo na temperatura do tecido. A partir disso, surgiram inúmeros pesquisadores que confrontavam ou apoiavam o modelo de Pennes.

CHAN (1991) desenvolveu um estudo acerca da utilização do método de elemento de contorno (BEM) na equação de biotransferência de calor de Pennes (1948), cujo objetivo de maior interesse era descrever a formulação do método e demonstrar a viabilidade da solução por meio do BEM. Solucionou-se numericamente a equação bidimensional para o caso em regime permanente. Ademais, o termo fonte foi assumido nulo e considerou-se o problema isolado termicamente nas extremidades verticais e resolveu-se analiticamente o caso unidimensional. O Método de Elemento de Contorno foi validado com uma análise comparativa dos resultados numéricos em relação à solução analítica. Diante da viabilidade e eficiência do método, uma aplicação do BEM foi abordada em um problema de transferência de calor para uma artéria adjacente a um tecido aquecido. Os valores encontrados na simulação reproduziram de forma satisfatória os resultados analíticos.

BRIEN e MEKKAOUI (1993) propuseram um estudo baseado em uma análise térmica do tecido com um tumor superficial, durante a utilização da hipertermia local. Na simulação numérica considerou-se que a região afetada pelo tumor foi imersa em um líquido, cuja temperatura foi mantida constante. A região foi subdividida em quatro zonas: tecido saudável, tumor maligno, ossos ou artérias e meio líquido. A representação físico-matemática do problema em discussão foi regida pela equação de Pennes (1948). Para facilitar a resolução do modelo, as equações foram adimensionalizadas. A discretização da equação foi feita via

Diferenças Finitas e a solução numérica do sistema linear foi obtida pelo Método Implícito de Direções Alternadas (ADI). Além disso, as taxas de perfusão e as propriedades termofísicas foram consideradas constantes. No contexto físico, a imersão do tecido no líquido gerava uma variação na temperatura do tecido. Paralelamente, um aplicador de feixes de microondas foi acionado para fornecer calor a toda região em tratamento. Os resultados obtidos revelaram os efeitos da potência do aplicador de microondas nos campos de temperatura. Foi realizada uma análise das taxas de perfusão sanguínea no tecido, do fluxo sanguíneo na maior artéria próxima ao tumor e a influência dos ossos nas extremidades do tecido. Os resultados demonstraram a viabilidade do tratamento de tumores malignos via microondas. No entanto, para a melhor distribuição de calor, verificou-se que a intensidade do feixe de microondas deveria ser baixa durante o processo.

VULPEN et al.(2002) determinaram a perfusão sanguínea em 18 pacientes com tumores na próstata, tratados com a hipertermia local e intersticial (microondas). No procedimento hipertérmico intersticial foram avaliados 12 pacientes e, para o caso da hipertermia local, 14 pacientes. Ambas as terapias foram realizadas em um período de 75 minutos. A hipertermia intersticial foi conduzida com o paciente sob anestesia geral ou peridural. Com o auxílio de uma ultra-sonografia transretal orientada, foram inseridos em torno de 12 cateteres em cada paciente. Em cada cateter existia uma sonda com dois eletrodos, a fim de monitorar a temperatura durante a hipertermia. Cada eletrodo possuía sete sensores térmicos, totalizando assim uma média de 89 sensores para cada paciente. Tal quantidade podia variar de 49 até 112 sensores. O sistema para o tratamento local consistia na utilização de uma antena circunferencial localizada na região pélvica do paciente. Inseriu-se de 7 a 14 sensores através de cateteres. Os resultados revelaram que na terapia intersticial a distribuição de temperatura foi heterogênea e com valores altos para a temperatura e a perfusão. No entanto, para a terapia local, a distribuição foi homogênea, apresentando baixos valores de temperatura e perfusão. Por fim, não foi observada nenhuma correlação entre a perfusão obtida e os dados dos pacientes (idade, volume da próstata ou o antígeno específico da próstata).

LIMA et al. (2006) utilizaram o Método dos Volumes Finitos para desenvolver uma ferramenta computacional, a qual objetivava solucionar a equação de Pennes em malhas bidimensionais triangulares não estruturadas. A região avaliada era obtida previamente por meio de uma imagem tomográfica. A técnica escolhida foi a termoterapia induzida a laser, onde calor era gerado por uma sonda de laser Nd: YAG em três pontos do tecido, sendo

assim, menos invasiva. A aplicação do laser envolveu dois ciclos. Em cada ciclo, todos os pontos do tecido afetado eram atingidos pelo feixe do laser durante 18 segundos, com intervalos de 2 segundos na passagem da aplicação de um ponto para outro e entre os ciclos. O modelo físico correspondeu a um corte transversal do abdômen, na região do duodeno, próximo ao tumor não-operável. A condição inicial adotada para a modelagem computacional foi de 37°C em toda região e as seguintes condições de contorno foram empregadas: nos vasos sanguíneos a troca de calor ocorria por convecção com o tecido, o sangue mantido a uma temperatura de 37°C. Foi considerada troca calor por convecção com o ar no estômago e nas paredes do tumor. Nos outros contornos a temperatura era prescrita. Uma vez levantados os perfis de temperatura, foi determinada a função dano. Tal função foi avaliada durante o intervalo de tempo compreendido entre o início do aumento da temperatura induzida pelo laser e a temperatura final do transiente. Na ausência de dados experimentais, algumas considerações foram adotadas nas simulações, para simplificar o problema apresentado. Estas simplificações são: o pâncreas era o maior órgão próximo ao tumor, cujos valores para o coeficiente de perfusão, calor específico e massa específica eram idênticos ao do fígado; o fluxo de ar que passava pelo estômago e o escoamento do sangue nos vasos sanguíneos eram laminares e o estômago se encontrava vazio. Os resultados mostraram a distribuição de temperatura no final da aplicação do laser, no primeiro ciclo. Paralelamente, foi obtido um gráfico com o cálculo da função dano, em todos os pontos da curva referente à aplicação do laser, no primeiro ciclo. Por fim, apresentou-se a evolução temporal dos perfis de temperatura dos três pontos de aplicação do laser e de um ponto entre o tumor e o tecido, após ter concluído os dois ciclos (120 segundos). Diante dos resultados, observou-se que a ferramenta foi capaz de fornecer soluções numéricas satisfatórias, em geometrias irregulares.

AZEVEDO et al. (2006) avaliaram a influência da perfusão sanguínea em tecidos humanos, sujeitos a uma fonte de calor, em um tratamento de hipertermia. O modelo se baseava na equação de Pennes (1948), na sua forma adimensional, a qual representava o processo de transferência de calor entre o tecido e o vaso sanguíneo. O termo fonte era uma combinação dos efeitos da geração de calor metabólico interno e da irradiação externa aplicada durante o tratamento. O problema estudado admitia propriedades termofísicas constantes, temperatura prescrita na superfície do tecido, troca de calor por convecção com um meio externo na parte inferior e considerava as paredes laterais isoladas termicamente. A metodologia aplicada para determinar a solução analítica foi a Técnica de Transformada Integral Clássica (ÖZISIK, 1980). O modelo matemático do problema era o mesmo de CHAN

(1991). As soluções apresentaram os efeitos do termo de perfusão na equação de biotransferência de calor e foi analisada a correlação do coeficiente de perfusão com a distribuição da temperatura no tecido. Os resultados revelaram que o aumento da magnitude do termo de perfusão sanguínea proporciona um aumento na dissipação de calor e, conseqüentemente, o equilíbrio térmico é atingido em menor tempo. Além disso, mostrou que a diferença entre as temperaturas inicial e final aumenta de acordo com a razão de aspecto do tecido.

SANTOS et al. (2007) avaliaram o comportamento do campo de temperatura em tumores de próstata em um tratamento de hipertermia. A solução numérica do modelo matemático, regido pela equação da biotransferência de calor, foi obtida pelo Método dos Volumes Finitos. Com a finalidade de simplificar o problema, o termo de geração de calor metabólico foi desprezado. A captura da imagem do tumor na próstata foi feita por meio de uma ressonância magnética. Assim, o tumor era previamente dimensionado e localizado. Para obter todos os pontos do domínio foi aplicado um software API (Aquisição de pontos em imagens), desenvolvido em MATLAB. Este programa gerava arquivos nos formatos apropriados para serem inseridos em um gerador de malhas. Em seguida, os autores discutiram as técnicas de Monte Carlo, as quais são métodos estatísticos, aplicados em situações onde a distribuição de temperaturas pode ser expressa por uma função densidade de probabilidade. As simulações numéricas indicaram a evolução temporal da temperatura máxima, os resultados do aquecimento do tumor após o tratamento e o campo de temperatura no regime permanente, após o regime transiente.

A partir da análise dos trabalhos citados nos parágrafos anteriores, acerca da influência da perfusão sanguínea no campo de temperatura, os pesquisadores constataram que a perfusão sanguínea é um dos responsáveis pela distribuição de temperatura na região submetida à hipertermia. Contudo, a eficiência do tratamento por hipertermia é limitada, pois desconhece os valores alcançados pela perfusão no tecido doente e sadio durante o tratamento hipertérmico. Neste contexto, as técnicas de problema inverso são promissoras na estimativa da perfusão sanguínea.

Estudos anteriores analisaram a variação da taxa de perfusão sanguínea durante o processo de aquecimento (BRIEN e MEKKAOQUI, 1993) e a geração de calor (externa e metabólica) na identificação de tumores por meio de técnicas de problema inverso (KLEINMAN e ROEMER, 1983). Alguns pesquisadores trabalham com a aplicação de

métodos numéricos utilizando malhas não-estruturadas na simulação do procedimento terapêutico (REN et al., 1995). Outros utilizam o Método de Elemento de Contorno combinado com uma minimização por mínimos quadrados, para estimar o termo de perfusão (TRUCU et al., 2007).

LIAUH e ROEMER (1993) aplicaram um método iterativo para estimar a perfusão sanguínea. O intuito do trabalho era obter os campos de temperatura, durante um tratamento por hipertermia. A metodologia proposta foi usada para contornar a dificuldade existente na determinação dos campos de temperatura na região do tecido a ser tratado. O modelo se baseava na equação de biotransferência de calor, admitindo a fonte de calor uniforme e o tecido homogêneo e isotrópico. Deste, era extraído um conjunto de medidas para a temperatura, para cada localização dos sensores, que foi usado na solução do problema inverso. O método iterativo implementado para as aproximações do parâmetro desconhecido (perfusão sanguínea) realizava simultaneamente a estimativa do termo de perfusão (minimizando a função objetivo, por mínimos quadrados) e a predição do campo de temperatura no regime permanente. No campo de temperatura tri-dimensional foram inseridas sete zonas na área de tratamento. Os resultados foram avaliados para os casos com sete, quatro e três sensores, cada qual localizado em uma zona diferente. Mediante os resultados apresentados, verificou-se que o desempenho do algoritmo em relação ao custo computacional dependia principalmente do número de vezes que a matriz jacobiana era recalculada.

COLAÇO et al. (2003) apresentaram duas alternativas (Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto e Algoritmo de Otimização Híbrido) para estimar, simultaneamente, a variação espacial do coeficiente de difusão e a distribuição do termo fonte, em um problema não-linear de transferência de calor. A situação física investigada envolveu a transferência de calor, em uma região unidimensional, submetida às seguintes condições de contorno: isolado termicamente na origem e fluxo prescrito na outra extremidade. A priori, a solução do problema inverso foi obtida pelo Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto. Nele, a estimativa foi realizada por meio da minimização de uma função objetivo. Considerou-se que os erros nas medidas eram aditivos, não-correlacionados, com distribuição normal e desvio padrão conhecido. Na implementação do Algoritmo de Otimização Híbrido, foram agregados outros métodos: Método Quase-Newton de Davidon-Fletcher-Powell, Algoritmo Genético, Método Simplex de Nelder-Mead, Algoritmo Quasi-Newton de

Pshenichny-Danilin, *Evolução Diferenciada e Programação Quadrática Sequencial*. Para a determinação das estimativas, foram posicionados dois sensores e, posteriormente, dez sensores, em ambos os métodos. Os resultados foram satisfatórios, no entanto, para o caso das estimativas das funções para dois sensores, o Método do Gradiente Conjugado apresentou um melhor desempenho em relação ao Algoritmo de Otimização Híbrido.

TRUCU et al. (2007) estimaram o coeficiente de perfusão na equação de biotransferência de calor (Pennes, 1948). Inicialmente a equação foi manipulada na sua forma adimensional com o termo fonte desprezado. O problema foi sujeito a uma temperatura inicial e condições de contorno de Dirichlet. A equação foi tratada unidimensionalmente, com o parâmetro de perfusão desconhecido, porém positivo, e foram formuladas as seguintes situações para as medidas adotadas: fluxo de calor medido em dois pontos distintos, temperatura medida em um ponto interno e massa medida em um único tempo. As estimativas foram obtidas por uma combinação do Método dos Elementos de Contorno com uma minimização não-linear por mínimos quadrados. As estimativas do coeficiente de perfusão foram realizadas para os casos com a inserção de 2% a 4% de ruído. No entanto, mesmo com as perturbações nas medidas simuladas, os resultados foram satisfatórios.

3 PROBLEMA PROPOSTO E DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

O presente capítulo apresenta a descrição do problema físico, bem como a formulação matemática adotada para o mesmo. São estabelecidas hipóteses e apresentadas as condições de contorno e inicial do problema em estudo.

3.1 PROBLEMA FISICO

O problema físico considerado envolve um processo de difusão de calor bidimensional, transiente, em um tecido orgânico retangular, ilustrado pela FIG. 3.1. A priori, toda a região de interesse está a uma mesma temperatura T_0 . Subitamente é inserida uma perturbação na superfície externa, $y = 1$, através de uma fonte de calor. Devido ao metabolismo, admi-ti-se que a superfície exterior do tecido permanece a uma temperatura prescrita T_p . Em contrapartida, a camada mais interna troca calor por convecção com os vasos sanguíneos e as laterais são isoladas termicamente. Considera-se que os coeficientes de perfusão sanguínea, geração de calor, a temperatura inicial e as propriedades termofísicas do sangue são constantes.

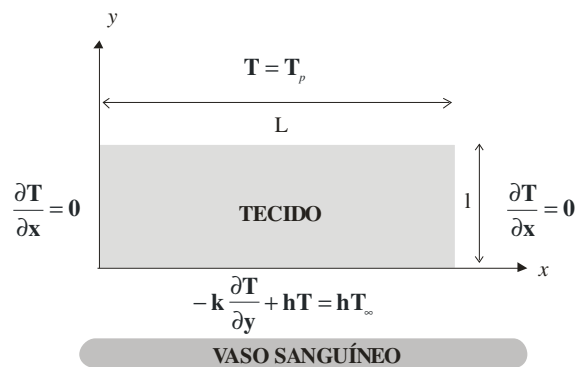


FIG. 3.1 Diagrama esquemático de um tecido orgânico

3.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A situação física proposta foi abordada por CHAN (1991), o qual modelou matematicamente este processo de biotransferência de calor por meio da equação de Pennes.

A Equação de Biotransferência de Calor de Pennes dada pela EQ. 3.1 consiste em um balanço de energia, o qual considera a taxa de energia interna, a condução de calor, a fonte de calor devido à perfusão e a combinação dos efeitos da geração de calor metabólico com a irradiação externa durante o tratamento.

Observa-se que o termo devido à perfusão é modelado, neste problema de hipertermia, como um sumidouro de calor, em virtude da remoção convectiva de calor gerado pelo sangue, através da vascularização dos capilares contidos nos tecidos vivos.

A modelagem mencionada é apresentada nas equações abaixo.

$$k_t \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - w_s c_s (T - T_a) + g = \rho_t c_t \frac{\partial T}{\partial t} \quad 0 < x < L, \quad 0 < y < l, \quad t > 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = L, \quad t > 0 \quad (3.3)$$

$$-k_s \frac{\partial T}{\partial y} + hT = hT_\infty \quad y = 0, \quad t > 0 \quad (3.4)$$

$$T = T_p \quad y = l, \quad t > 0 \quad (3.5)$$

$$T = T_0 \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq l, \quad t = 0 \quad (3.6)$$

Na formulação acima, w_s é o coeficiente de perfusão do sangue, c_s é o calor específico do sangue, k_t é a condutividade térmica do tecido, k_s é a condutividade térmica do tecido, ρ_t é a massa específica do tecido, c_t é o calor específico do tecido, T_a é a temperatura do sangue arterial, h é o coeficiente de transferência de calor, g é a fonte volumétrica de geração de calor, T_p é a temperatura na superfície do tecido, T_0 é a temperatura inicial, T é a temperatura, t é o tempo, T_∞ é a temperatura dos vasos sanguíneos, L é o comprimento do tecido, l é a altura do tecido, x é abscissa do tecido e y é a ordenada do tecido.

3.3 ADIMENSIONALIZAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

As variáveis adimensionais adotadas são:

$$\theta = \frac{T - T_a}{g_0(l^2/k_t)}, G = \frac{g}{g_0}, A = \frac{L}{l}, X = \frac{x}{l}, Y = \frac{y}{l} \quad (3.7-11)$$

$$\tau = \frac{\alpha_t t}{l^2}, Pf = \frac{w_s c_s l^2}{k_t}, Bi = \frac{hl}{k_t} \quad (3.12-14)$$

Neste conjunto de variáveis, θ é a temperatura adimensional, G é a fonte de calor adimensional, A é a razão de aspecto, X é abscissa do tecido, Y é a ordenada do tecido, τ é o tempo adimensional, $\alpha_t = k_t/(\rho_t c_t)$ é a difusividade térmica do tecido, Pf é o coeficiente adimensional de perfusão, Bi é o número de Biot, g_0 é a fonte de referência para geração de calor e g fonte volumétrica de geração de calor.

Nessa modelagem, tem-se que g é a combinação dos efeitos da geração de calor metabólica com a irradiação externa. De acordo com a adimensionalização adotada, observa-se que quando não há tratamento, ou seja, não há fonte de irradiação externa, $g = g_0$, assim, $G = 1$.

Desta forma, o sistema é adimensionalizado é dado por:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} - Pf\theta + G = \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \quad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < A \quad \tau > 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial X} = 0 \quad X = 0 \quad \tau > 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial X} = 0 \quad X = A \quad \tau > 0 \quad (3.17)$$

$$-\frac{\partial \theta}{\partial Y} + Bi\theta = Bi\theta_\infty \quad Y = 0 \quad \tau > 0 \quad (3.18)$$

$$\theta = 0 \quad Y = 1 \quad \tau > 0 \quad (3.19)$$

$$\theta = \theta_0 \quad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < A \quad \tau = 0 \quad (3.20)$$

Observe que nesta formulação adimensional, a perfusão permanece modelada como um termo sumidouro de calor. Assim, espera-se que quanto mais vascularizado for o tumor, maior

será a remoção convectiva de calor gerado pelo sangue. Outro aspecto relevante é a influência do número de Biot. Este regula a troca térmica entre o tecido e os vasos sanguíneos, uma vez que o seu aumento proporciona uma perda maior de energia para os vasos sanguíneos.

4 PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DE PARÂMETROS

Neste capítulo, o coeficiente de perfusão é considerado constante para todo o domínio de solução e são apresentadas diferentes técnicas de otimização para estimá-lo.

O Problema Direto é resolvido usando uma técnica analítica (Técnica de Transformada Integral), apresentada por AZEVEDO et al. (2006). Esta é utilizada na análise de sensibilidade, permitindo avaliar a influência do parâmetro a ser estimado em relação ao modelo proposto no Problema Direto.

O Problema Inverso está associado à estimativa da perfusão sanguínea, o qual utiliza como dados de entrada as temperaturas medidas, obtidas pela solução do Problema Direto. Para tanto, estas temperaturas foram obtidas por meio de uma simulação de experimentos, nos quais se simula a utilização de sensores térmicos em posições pré-determinadas do tecido. Estes sensores fornecem as medidas simuladas de temperatura empregadas no problema inverso. Dessa forma, visando ser o menos invasivo possível na inserção dos sensores, é estudada a possibilidade de localizar um único sensor, por vez, nas posições adimensionais 0.8, 0.9 e 0.96 abaixo da superfície tecido. Em termos dimensionais equivalem a 6, 3 e 1 mm de profundidade. Além disso, a dimensão característica do tecido é de 3 cm de altura por 3 cm de comprimento.

4.1 PROBLEMA DIRETO

4.1.1 REPRODUÇÃO DA SOLUÇÃO DE AZEVEDO et al. (2006)

Nesta seção será analisada a solução analítica do modelo matemático descrito anteriormente e será conduzido um estudo numérico da evolução temporal do perfil de temperatura adimensional, referente a solução do problema direto. As simulações realizadas visam reproduzir os resultados gerados por AZEVEDO et al. (2006).

A técnica da transformada integral foi escolhida para solucionar o problema direto, ou seja, o modelo de Pennes associado à biotransferência de calor em tecidos orgânicos, o qual é representado por uma equação linear. Maiores detalhes quanto a esta metodologia da solução podem ser encontrados em AZEVEDO et al. (2006). Assim sendo, a distribuição de temperatura no interior do tecido orgânico é dada por:

$$\theta(X, Y, \tau) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\psi_i(X)}{N_i} \frac{\lambda_j(Y)}{M_j} \left[\frac{\overline{P}_{ij}}{\mu_i^2 + \gamma_j^2} - \frac{e^{-(\mu_i^2 + \gamma_j^2)\tau}}{\mu_i^2 + \gamma_j^2} \overline{P}_{ij} + e^{-(\mu_i^2 + \gamma_j^2)\tau} \overline{\theta}_{ij}(0) \right] \quad (4.1)$$

onde as autofunções ψ_i e λ_j são dadas por

$$\psi_i(X) = \cos(\mu_i X), \mu_i = (i-1)\pi \text{ e } i = 1, 2, 3, \dots \quad (4.2)$$

$$\lambda_j(Y) = \text{sen}\beta_j(1-Y) \text{ e } j = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (4.3)$$

e os autovalores β_j e γ_j são raízes das seguintes equações

$$\beta_j \cot(\beta_j) = -Bi \quad (4.4)$$

$$\gamma_j^2 = \beta_j^2 + Pf \quad (4.5)$$

Os outros parâmetros dimensionais, tais como as normas (N_i e M_j), a condição inicial transformada ($\overline{\theta}_{ij}$) e o termo auxiliar (\overline{P}_{ij}) são descritos a seguir:

$$N_i = \int_0^A \psi_i^2(X) dX = 2, \quad M_j = \int_0^1 \lambda_j^2(Y) dY = \frac{(\beta_j^2 + Bi^2) + Bi}{2(\beta_j^2 + Bi^2)} \quad (4.6)$$

$$\overline{\theta}_{ij}(0) = \int_0^1 \int_0^A \lambda_j(Y) \psi_i(X) \theta(X, Y, 0) dX dY \quad (4.7)$$

$$\overline{P}_{ij} = Bi \theta_{\infty} \lambda_j(0) \int_0^A \psi_i(X) dX + G \int_0^1 \int_0^A \lambda_j(Y) \psi_i(X) dY dX \quad (4.8)$$

Adotaram-se os seguintes valores, para cada um dos parâmetros dimensional empregados neste trabalho: $Bi = 5$, $\theta_0 = 0.003$, $T_a = 36.5^\circ\text{C}$, $\theta_{\infty} = 0.001$. A fonte volumétrica

de geração de calor era equivalente a 83800 W/m^3 , onde 50000 W/m^3 o valor da fonte de calor externa e 33800 W/m^3 a taxa de geração de calor metabólica (DENG e LIU, 2002). Além disso, assumiram-se os seguintes valores para a massa específica e o calor específico do sangue: $\rho_s = 1060 \text{ kg/m}^3$ e $c_s = 3720 \text{ J/kgK}$ (BRIX et al., 2002).

A seguir, a FIG. 4.1 ilustra a comparação dos resultados gerados neste trabalho com os obtidos por Azevedo et al. (2006), para o caso em que o tecido não está submetido ao tratamento por hipertermia, ou seja, $G = 1$. É válido ressaltar, que como o tecido possui as mesmas dimensões, tem-se que a razão de aspecto é unitária, conforme visto na EQ. (3.9).

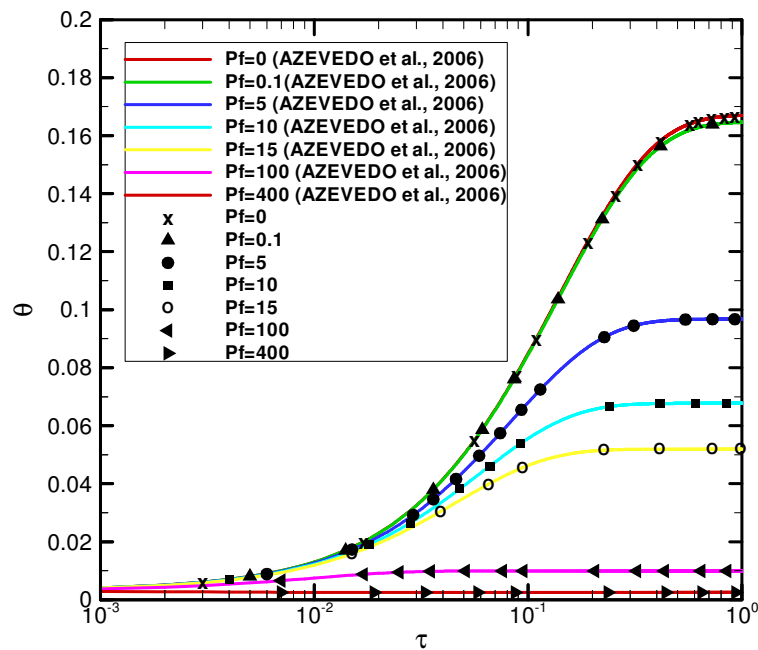


FIG. 4.1 Evolução temporal do perfil de temperatura para $A = 1.0$

As FIGs. 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 mostram a evolução temporal do perfil térmico. Este estudo busca investigar a quantidade de termos necessários no somatório da solução do problema direto, para obter um perfil de temperatura convergido. Para isto, são considerados os valores 0.1 e 5 para o coeficiente de perfusão sanguínea adimensional. As posições estudadas para a evolução temporal são 6, 3 e 1 mm abaixo da superfície da pele, que correspondem aos valores adimensionais de 0.8, 0.9 e 0.96. O comportamento da temperatura é avaliado no intervalo de tempo adimensional entre 0 e 2, que corresponde a 4 h 11 min 6 s, para $Pf = 0.1$ e 5 h 27 min 14 s, para $Pf = 5$. Note que à medida que o tempo avança a temperatura tende para um valor assintótico, sendo que, a partir de 90 termos em cada instante de tempo, verifica-se que não há diferença significativa na temperatura obtida.

Nas FIGs. 4.2, 4.3 e 4.4 observa-se que o quanto mais próximo da superfície externa do tecido, menor é a temperatura final. Isto se justifica pela condição de contorno de temperatura prescrita nesta fronteira. Assim, espera-se que as maiores variações de temperaturas ocorram nas camadas mais distantes deste contorno.

Nota-se pelas FIGs. 4.2 e 4.5 que o aumento da perfusão sanguínea implica na diminuição da temperatura final conforme esperado, pois, no contexto deste problema, quanto maior o valor da perfusão sanguínea, maior é a quantidade de calor retirado do tecido. Além disso, percebe-se que aumentando a perfusão sanguínea, o sistema atinge o regime permanente mais rapidamente.

Novamente, comparando as FIGs. 4.3 e 4.6 ou 4.4 e 4.7, observa-se a influência da perfusão sanguínea na distribuição de temperatura no tecido.

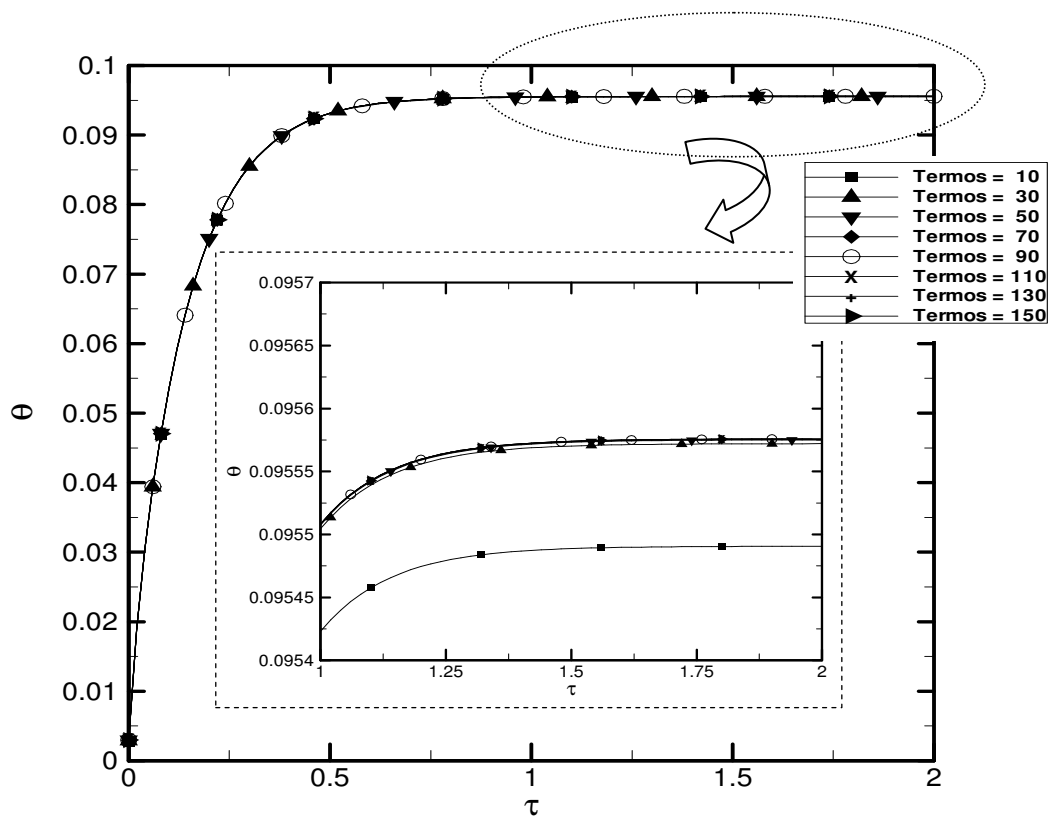


FIG. 4.2 Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.8$

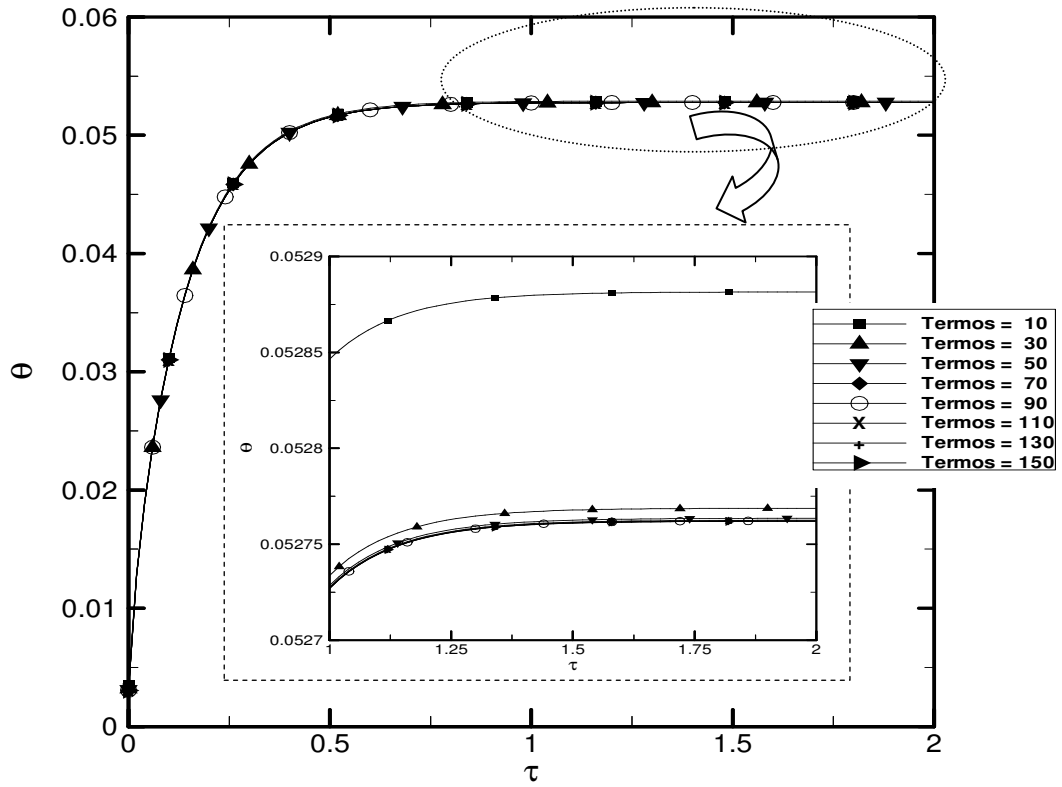


FIG. 4.3 Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.9$

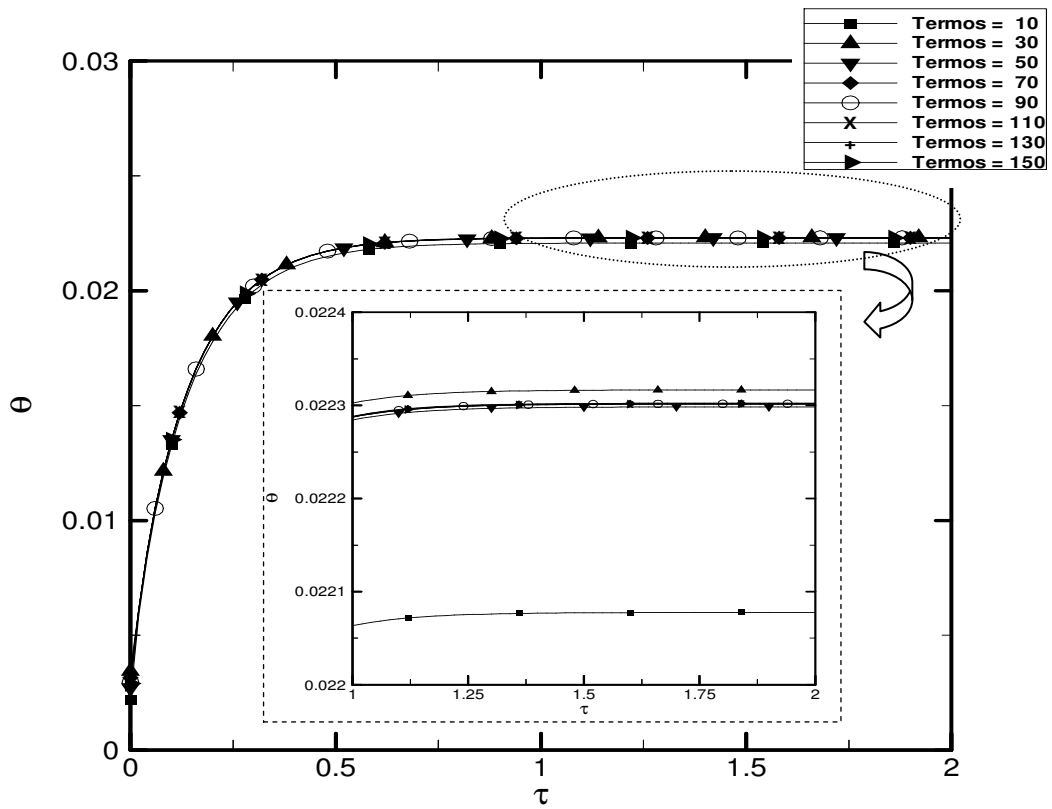


FIG. 4.4 Estudo da convergência para $Pf = 0.1$ em $Y = 0.96$

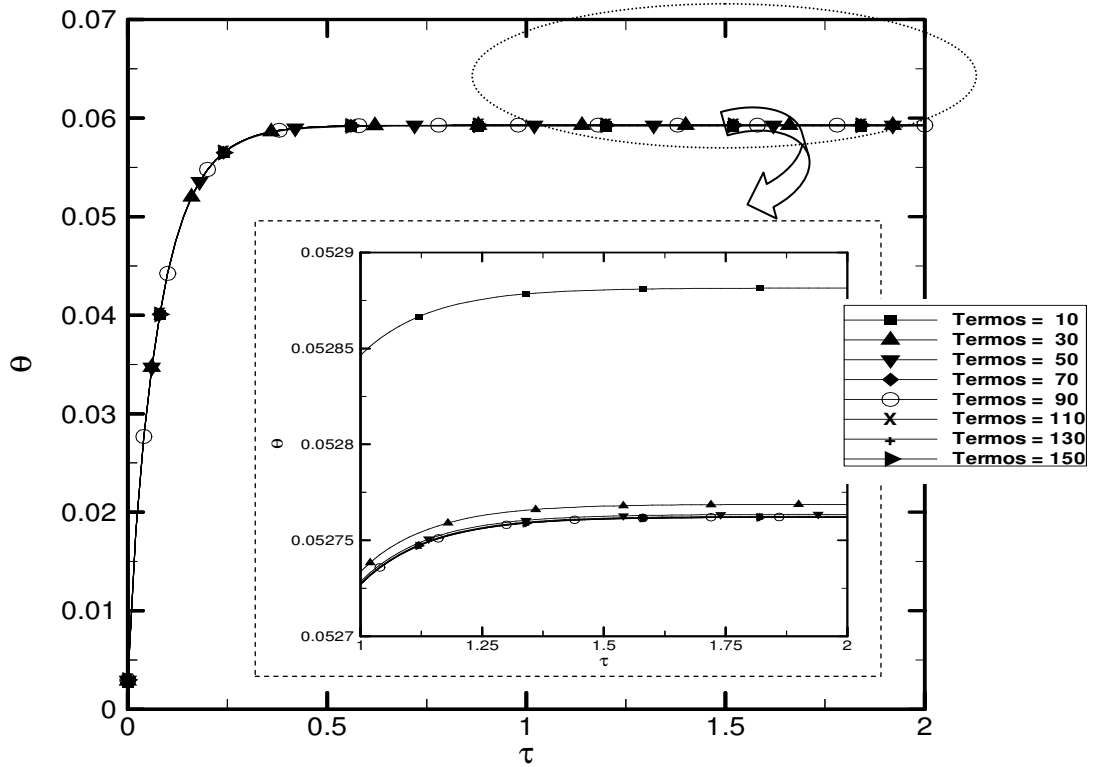


FIG. 4.5 Estudo da convergência para $Pf = 5$ em $Y = 0.8$

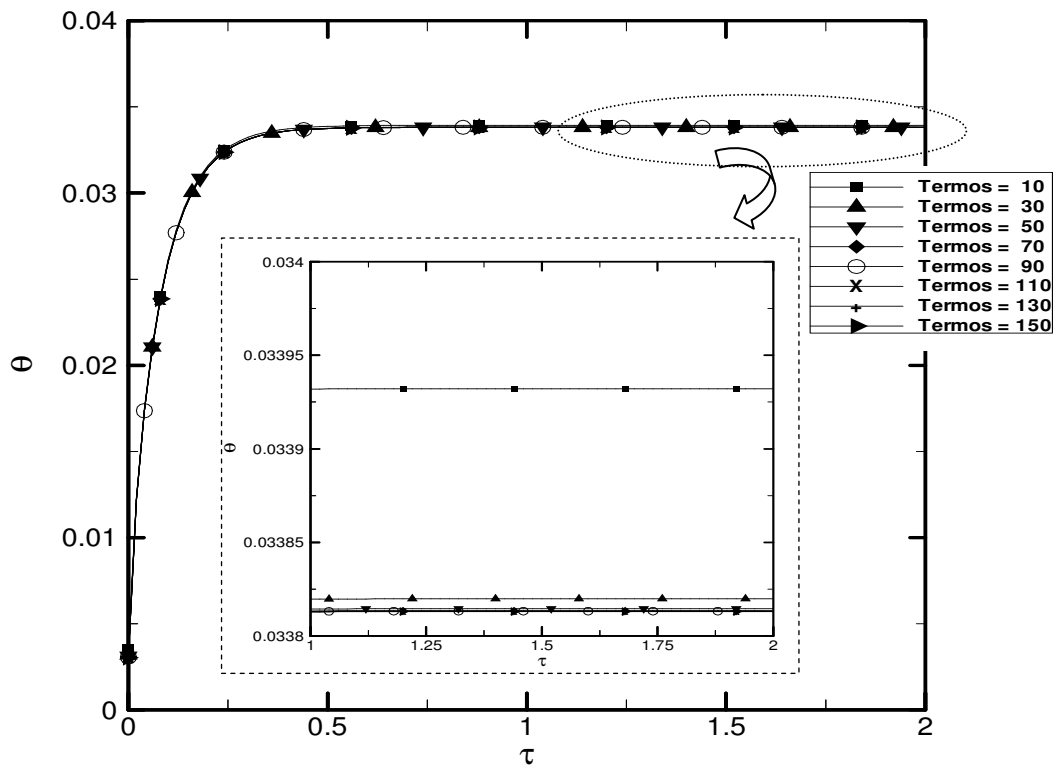


FIG. 4.6 Estudo da convergência para $Pf = 5$ em $Y = 0.9$

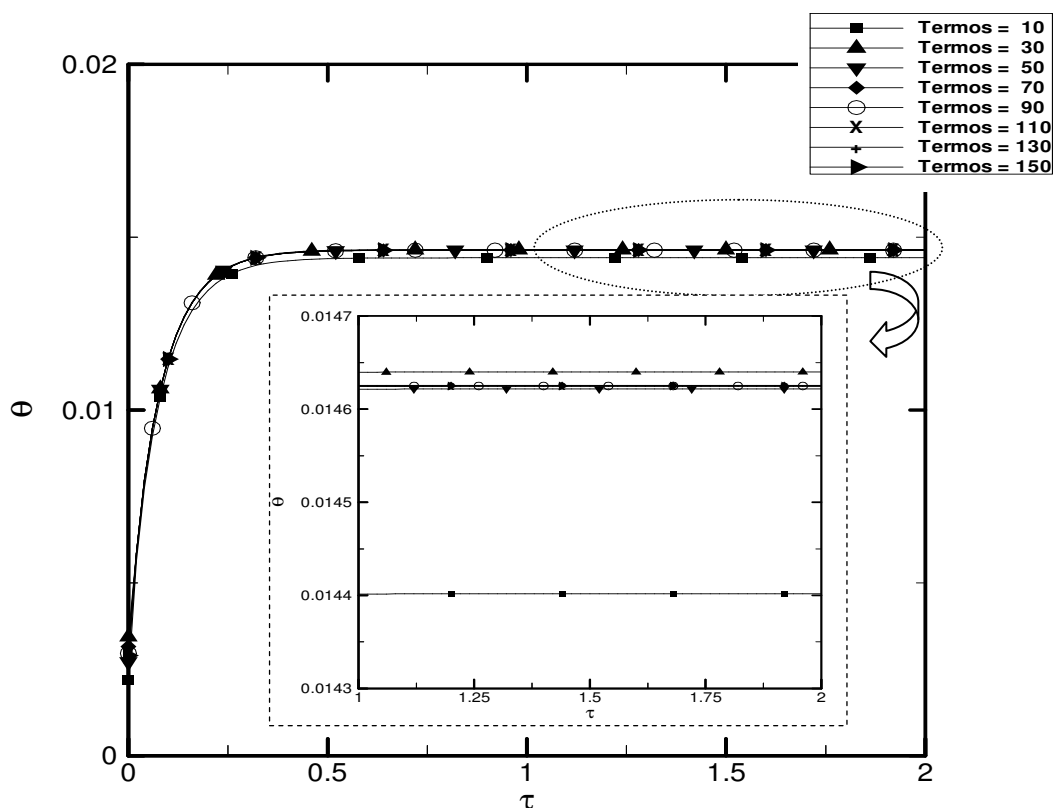


FIG. 4.7 Estudo da convergência para Pf = 5 em Y = 0.96

Nas FIGs. 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 foi avaliado o comportamento do regime transiente no intervalo adimensional [0,2]. Verifica-se que o regime permanente foi atingido em $\tau = 1$, equivalente a 1 h 2 min 45 s para Pf = 0.1 e 40 min 54 s para Pf = 5. Desta forma, conclui-se que à medida que se eleva a perfusão sanguínea, menor é o tempo para se atingir o novo estado de equilíbrio.

A fim de um melhor detalhamento do perfil térmico, a temperatura foi estudada para determinado instante de tempo e para certa quantidade de termos retidos no somatório da solução analítica. Os valores adotados para o tempo estão presentes na TAB. 4.1 na forma dimensional e adimensional, os quais foram utilizados no estudo de convergência apresentado nas TABs. 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7.

TAB. 4.1 Tempo dimensional e adimensional

τ	Pf = 0.1	Pf = 5
0	0 s	0 s
0.25	31 min 23 s	40 min 54 s
0.75	1h 34min 10 s	2 h 2 min 43 s
1	2 h 5 min 33 s	2 h 43 min 37 s
2	4 h 11 min 6 s	5 h 27 min 14 s

Na TAB. 4.2, o perfil de temperatura referente ao regime permanente está convergido para 90 termos, enquanto que para $\tau = 0.25$ são necessários 50 termos. Por outro lado, conforme aproxima-se da camada mais externa do tecido, pelas TABs. 4.3 e 4.4, observa-se que a convergência para $\tau = 0.25$ ocorre com uma quantidade maior de termos do que para a posição $Y = 0.8$. Também, verifica-se pela TAB. 4.3, que a convergência ocorre também com 90 termos para os demais tempos.

TAB. 4.2 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.8$ para $Pf = 0.1$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	8.1159×10^{-2}	9.5087×10^{-2}	9.5423×10^{-2}	9.5491×10^{-2}	10
	8.1241×10^{-2}	9.5169×10^{-2}	9.5504×10^{-2}	9.5572×10^{-2}	30
	8.1244×10^{-2}	9.5172×10^{-2}	9.5507×10^{-2}	9.5575×10^{-2}	50
	8.1244×10^{-2}	9.5172×10^{-2}	9.5507×10^{-2}	9.5575×10^{-2}	70
	8.1244×10^{-2}	9.5173×10^{-2}	9.5508×10^{-2}	9.5576×10^{-2}	90
	8.1244×10^{-2}	9.5173×10^{-2}	9.5508×10^{-2}	9.5576×10^{-2}	110
	8.1244×10^{-2}	9.5173×10^{-2}	9.5508×10^{-2}	9.5576×10^{-2}	130
	8.1244×10^{-2}	9.5173×10^{-2}	9.5508×10^{-2}	9.5576×10^{-2}	150

TAB. 4.3 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.9$ para $Pf = 0.1$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	4.5456×10^{-2}	5.2673×10^{-2}	5.2846×10^{-2}	5.2881×10^{-2}	10
	4.5343×10^{-2}	5.2560×10^{-2}	5.2734×10^{-2}	5.2769×10^{-2}	30
	4.5338×10^{-2}	5.2555×10^{-2}	5.2729×10^{-2}	5.2764×10^{-2}	50
	4.5337×10^{-2}	5.2554×10^{-2}	5.2728×10^{-2}	5.2763×10^{-2}	70
	4.5337×10^{-2}	5.2553×10^{-2}	5.2727×10^{-2}	5.2762×10^{-2}	90
	4.5336×10^{-2}	5.2553×10^{-2}	5.2727×10^{-2}	5.2762×10^{-2}	110
	4.5336×10^{-2}	5.2553×10^{-2}	5.2727×10^{-2}	5.2762×10^{-2}	130
	4.5336×10^{-2}	5.2553×10^{-2}	5.2727×10^{-2}	5.2762×10^{-2}	150

Na TAB. 4.4, nota-se que para tempos superiores a $\tau = 0.25$, a temperatura oscila na última casa decimal. Portanto, neste caso a precisão obtida foi com três casas decimais e com no mínimo 70 termos retidos no somatório.

As TABs. 4.5, 4.6 e 4.7 diferem das anteriores em relação ao valor adotado para o coeficiente de perfusão. Analisando as TABs. 4.5 e 4.2 pode-se verificar que o aumento de Pf não influencia significativamente a convergência da temperatura para o regime permanente.

TAB. 4.4 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.96$ para $Pf = 0.1$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	1.9078×10^{-2}	2.1993×10^{-2}	2.2064×10^{-2}	2.2078×10^{-2}	10
	1.9317×10^{-2}	2.2232×10^{-2}	2.2302×10^{-2}	2.2317×10^{-2}	30
	1.9299×10^{-2}	2.2214×10^{-2}	2.2284×10^{-2}	2.2298×10^{-2}	50
	1.9303×10^{-2}	2.2218×10^{-2}	2.2288×10^{-2}	2.2302×10^{-2}	70
	1.9302×10^{-2}	2.2217×10^{-2}	2.2288×10^{-2}	2.2302×10^{-2}	90
	1.9302×10^{-2}	2.2217×10^{-2}	2.2287×10^{-2}	2.2301×10^{-2}	110
	1.9302×10^{-2}	2.2218×10^{-2}	2.2288×10^{-2}	2.2302×10^{-2}	130
	1.9302×10^{-2}	2.2217×10^{-2}	2.2287×10^{-2}	2.2302×10^{-2}	150

TAB. 4.5 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.8$ para $Pf = 5$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	5.6737×10^{-2}	5.9191×10^{-2}	5.9197×10^{-2}	5.9197×10^{-2}	10
	5.6819×10^{-2}	5.9272×10^{-2}	5.9278×10^{-2}	5.9278×10^{-2}	30
	5.6822×10^{-2}	5.9275×10^{-2}	5.9281×10^{-2}	5.9281×10^{-2}	50
	5.6822×10^{-2}	5.9276×10^{-2}	5.9281×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	70
	5.6822×10^{-2}	5.9276×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	90
	5.6822×10^{-2}	5.9276×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	110
	5.6822×10^{-2}	5.9276×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	130
	5.6822×10^{-2}	5.9276×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	5.9282×10^{-2}	150

Os resultados apresentados na TAB. 6 revelam que 70 termos possibilitam obter a convergência da solução para todos os tempos, até atingir o regime permanente. Em contrapartida, a diminuição da perfusão nesta posição torna necessário aumentar a quantidade de termos retidos no somatório, conforme observado na TAB. 4.3.

TAB. 4.6 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.9$ para $Pf = 5$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	3.2658×10^{-2}	3.3929×10^{-2}	3.3932×10^{-2}	3.3932×10^{-2}	10
	3.2545×10^{-2}	3.3817×10^{-2}	3.3820×10^{-2}	3.3820×10^{-2}	30
	3.2540×10^{-2}	3.3811×10^{-2}	3.3814×10^{-2}	3.3815×10^{-2}	50
	3.2539×10^{-2}	3.3810×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	70
	3.2539×10^{-2}	3.3810×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	90
	3.2539×10^{-2}	3.3810×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	110
	3.2539×10^{-2}	3.3810×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	130
	3.2539×10^{-2}	3.3810×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	3.3813×10^{-2}	150

Pela TAB. 4.7 observa-se que a convergência ocorre com 90 termos. No entanto, para $\tau = 0.75$ a temperatura oscila na última casa decimal. Assim, para este tempo adimensional, a precisão alcançada foi de 3 casas decimais.

TAB. 4.7 Estudo da convergência da solução analítica em $Y = 0.96$ para $Pf = 5$

	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	$\tau = 2$	Termos
Temperatura adimensional	1.3887×10^{-2}	1.4400×10^{-2}	1.4402×10^{-2}	1.4402×10^{-2}	10
	1.4125×10^{-2}	1.4639×10^{-2}	1.4640×10^{-2}	1.4640×10^{-2}	30
	1.4107×10^{-2}	1.4620×10^{-2}	1.4621×10^{-2}	1.4622×10^{-2}	50
	1.4111×10^{-2}	1.4624×10^{-2}	1.4626×10^{-2}	1.4626×10^{-2}	70
	1.4110×10^{-2}	1.4624×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	90
	1.4110×10^{-2}	1.4623×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	110
	1.4110×10^{-2}	1.4624×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	130
	1.4110×10^{-2}	1.4623×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	1.4625×10^{-2}	150

A partir da análise de convergência da temperatura, conclui-se por estas tabelas que houve convergência a partir da retenção de 90 termos. Tal convergência ocorreu para os valores adotados para Pf e Y , no regime permanente em $\tau = 1$.

4.2 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

O principal objetivo deste trabalho é estimar a perfusão sanguínea presente na EQ. 4.1, cujo tecido está submetido à hipertermia. A identificação deste coeficiente exige o conhecimento de algumas informações adicionais, que podem ser obtidas por meio da medição da temperatura interna em um ponto do tecido em tratamento.

Um aspecto relevante para a estimativa da perfusão sanguínea é a análise de sensibilidade. Portanto, esta seção disserta acerca da possibilidade de estimar o coeficiente de perfusão, bem como a melhor posição para o sensor e o intervalo de tempo para a aquisição das temperaturas simuladas.

O coeficiente de sensibilidade é dado pela EQ. 4.9 (matriz de sensibilidade ou matriz Jacobiana) fornece a taxa de variação de temperatura no que diz respeito ao coeficiente de perfusão. Assim, se um coeficiente tem uma baixa sensibilidade, será uma indicação de que a sua estimativa é difícil, já que grandes variações no seu valor não forneçam variações

suficientes nas medidas. Esta equação é obtida pela derivação da EQ. (4.1) com relação ao coeficiente de perfusão Pf.

$$\frac{\partial \theta}{\partial Pf} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\Psi_i}{N_i} \frac{\lambda_j}{M_j} \overline{\overline{P_{ij}}} \left(\frac{e^{-(\mu_i^2 + \beta_j^2 + Pf)\tau} - 1}{(\mu_i^2 + \beta_j^2 + Pf)^2} + \frac{\tau e^{-(\mu_i^2 + \beta_j^2 + Pf)\tau}}{(\mu_i^2 + \beta_j^2 + Pf)} - \frac{\tau e^{-(\mu_i^2 + \beta_j^2 + Pf)\tau} \overline{\overline{\theta_{ij}(0)}}}{\overline{\overline{P_{ij}}}} \right) \quad (4.9)$$

Do mesmo modo, se dois coeficientes de sensibilidade, de dois parâmetros a serem estimados, são linearmente dependentes, torna-se impossível estimar os dois parâmetros ao mesmo tempo, porque na análise de sensibilidade não será possível discernir o que lhes causou a variação na temperatura medida.

A FIG. 4.8 mostra o coeficiente de sensibilidade do termo de perfusão como uma função do tempo adimensional. Foram adotados dois valores para os coeficientes de perfusão em três posições, onde neste caso, não é considerado o tratamento ($G = 1$). Em posse dos resultados apresentados nas TABs. 4.2, 4.3, 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7, pode-se concluir que o novo estado de equilíbrio é alcançado em $\tau = 1$. Portanto, o comportamento do coeficiente de sensibilidade é investigado durante o intervalo de tempo adimensional entre 0 e 1. Note que para o sensor posicionado distante da superfície do tecido ($Y = 0.8$), o valor absoluto do coeficiente de sensibilidade aumenta, o que indica que melhores estimativas podem ser obtidas com a inserção mais profunda dos sensores. Uma vez que o coeficiente de sensibilidade é não-linear no que diz respeito ao coeficiente de perfusão, maiores valores do coeficiente de perfusão resultarão em menores valores dos coeficientes de sensibilidade, conforme pode ser observado na FIG. 4.8. Assim, espera-se que os tecidos pouco cancerosos tenham seus coeficientes de perfusão melhor estimados do que em tecidos de perfusão elevada.

As TABs. 4.8, 4.9, 4.10, 4.11, 4.12 e 4.13 apresentam a convergência do coeficiente de sensibilidade relativo à perfusão sanguínea. O comportamento do regime transiente é avaliado no intervalo adimensional $[0,1]$. O mesmo é avaliado para τ equivalente a 0.25, 0.5, 0.75 e 1, variando-se a quantidade de termos retidos no somatório na derivada da solução analítica. A convergência do coeficiente de sensibilidade será considerada com uma precisão de 6 casas decimais.

Observa-se que em todos os casos foi possível recuperar a condição inicial nula, conforme vista também pela EQ. 4.9.

Na TAB. 4.8, o resultado em regime permanente aparece convergido para 30 termos, enquanto que para $\tau = 0.25$ são necessários 50 termos. Por outro lado, no regime permanente para as posições $Y = 0.9$ e $Y = 0.96$ é preciso 50 termos, conforme visto nas TABs. 4.9 e 4.10.

Analisando as TABs. 4.9 e 4.10, percebe-se que à medida que se aproxima-se da camada mais externa do tecido ($Y = 0.9$ e $Y = 0.96$), a convergência do coeficiente de sensibilidade não sofre influência significativa. Sendo esta obtida com 50 termos para todos os tempos em ambas as posições.

Pelos resultados apresentados nas TABs. 4.8, 4.9 e 4.10, nota-se que ao posicionar o sensor mais afastado da superfície do tecido, menor é a quantidade de termos necessários para a convergência do coeficiente de sensibilidade.

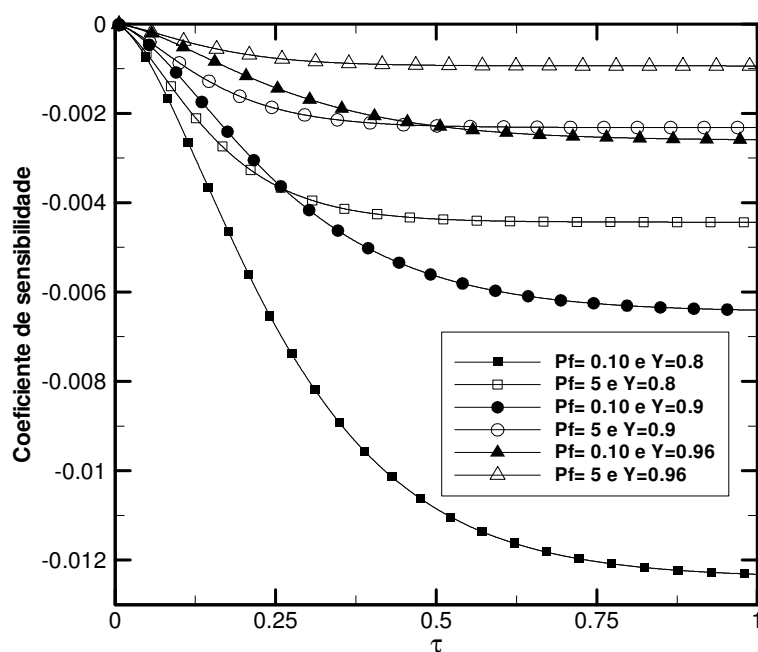


FIG. 4.8 Coeficiente de sensibilidade relativo a perfusão 0.1 e 5, $G = 1$

TAB. 4.8 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.8$ para $Pf = 0.1$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-6.767016×10^{-3}	-1.085460×10^{-2}	-1.204015×10^{-2}	-1.232285×10^{-2}	10
	-6.767086×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	30
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	50
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	70
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	90
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	110
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	130
	-6.767084×10^{-3}	-1.085467×10^{-2}	-1.204021×10^{-2}	-1.232292×10^{-2}	150

TAB. 4.9 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.9$ para $Pf = 0.1$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-3.537879×10^{-3}	-5.655838×10^{-3}	-6.270113×10^{-3}	-6.416592×10^{-3}	10
	-3.537806×10^{-3}	-5.655766×10^{-3}	-6.270040×10^{-3}	-6.416519×10^{-3}	30
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	50
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	70
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	90
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	110
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	130
	-3.537805×10^{-3}	-5.655765×10^{-3}	-6.270039×10^{-3}	-6.416518×10^{-3}	150

TAB. 4.10 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.96$ para $Pf = 0.1$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-1.433786×10^{-3}	-2.289390×10^{-3}	-2.537540×10^{-3}	-2.596714×10^{-3}	10
	-1.433940×10^{-3}	-2.289543×10^{-3}	-2.537694×10^{-3}	-2.596868×10^{-3}	30
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	50
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	70
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	90
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	110
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	130
	-1.433938×10^{-3}	-2.289542×10^{-3}	-2.537693×10^{-3}	-2.596867×10^{-3}	150

Com o intuito de avaliar a influência da perfusão sanguínea na convergência do coeficiente de sensibilidade, estudou-se o comportamento do regime transiente para $Pf = 5$, conforme visto nas TABs. 4.11, 4.12 e 4.13.

A TAB. 4.11 mostra que aumentar o tempo acarreta em uma menor quantidade de termos retidos no somatório. Comparando-a com a TAB. 4.8, percebe-se que para atingir a precisão desejada, no regime permanente, o aumento da perfusão sanguínea não influenciou na quantidade de termos retidos.

Na TAB. 4.12 verifica-se a convergência com 50 termos, no regime permanente e para $\tau = 0.25$. Comparativamente, para a posição $Y = 0.96$, a precisão só foi atingida com 20 termos a mais para todos os tempos.

De posse dos resultados obtidos para a convergência do coeficiente de sensibilidade relativo à perfusão, concluí-se que houve convergência a partir de 70 termos, para qualquer dos valores adotados de Pf e Y .

TAB. 4.11 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.8$ para $Pf = 5$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-3.613213×10^{-3}	-4.368959×10^{-3}	-4.434986×10^{-3}	-4.439658×10^{-3}	10
	-3.613280×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	30
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	50
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	70
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	90
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	110
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	130
	-3.613281×10^{-3}	-4.369027×10^{-3}	-4.435054×10^{-3}	-4.439726×10^{-3}	150

TAB. 4.12 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.9$ para $Pf = 5$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-1.899569×10^{-3}	-2.291156×10^{-3}	-2.325367×10^{-3}	-2.327787×10^{-3}	10
	-1.899496×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325294×10^{-3}	-2.327715×10^{-3}	30
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	50
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	70
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	90
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	110
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	130
	-1.899495×10^{-3}	-2.291083×10^{-3}	-2.325293×10^{-3}	-2.327714×10^{-3}	150

TAB. 4.13 Estudo da convergência do coeficiente de sensibilidade em $Y = 0.96$ para $Pf = 5$

$\tau = 0$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.5$	$\tau = 0.75$	$\tau = 1$	Termos
0	-7.714194×10^{-4}	-9.296113×10^{-4}	-9.434316×10^{-4}	-9.444094×10^{-4}	10
	-7.715720×10^{-4}	-9.297639×10^{-4}	-9.435842×10^{-4}	-9.445621×10^{-4}	30
	-7.715706×10^{-4}	-9.297625×10^{-4}	-9.435828×10^{-4}	-9.445606×10^{-4}	50
	-7.715707×10^{-4}	-9.297626×10^{-4}	-9.435829×10^{-4}	-9.445607×10^{-4}	70
	-7.715707×10^{-4}	-9.297626×10^{-4}	-9.435829×10^{-4}	-9.445607×10^{-4}	90
	-7.715707×10^{-4}	-9.297626×10^{-4}	-9.435829×10^{-4}	-9.445607×10^{-4}	110
	-7.715707×10^{-4}	-9.297626×10^{-4}	-9.435829×10^{-4}	-9.445607×10^{-4}	130
	-7.715707×10^{-4}	-9.297626×10^{-4}	-9.435829×10^{-4}	-9.445607×10^{-4}	150

A FIG. 4.9 mostra a evolução temporal do coeficiente de sensibilidade do termo de perfusão quando o tecido é submetido à hipertermia ($G = 2.48$). Foram mantidos os dois valores para a perfusão adotados anteriormente. O comportamento do coeficiente de sensibilidade foi avaliado durante o intervalo de tempo adimensional entre 0 e 1. Nesta situação ocorrem as mesmas considerações acerca da melhor posição para o sensor,

correspondendo ao caso mais intrusivo.

Pela EQ. 4.9 percebe-se que o coeficiente de sensibilidade é diretamente proporcional ao valor da fonte de calor adimensional. Isto indica que à medida que G aumenta a sensibilidade do coeficiente de perfusão também aumenta. Portanto, comparando as FIGs. 4.8 e 4.9 é esperado que as estimativas sejam melhores para $G = 2.48$ onde a sensibilidade é maior. Entretanto, a influência da perfusão permanece a mesma, pois, embora a geração de calor externa seja aumentada, o coeficiente de perfusão será melhor estimado nos tecidos com baixo nível de perfusão sanguínea do que em tecidos de perfusão elevada.

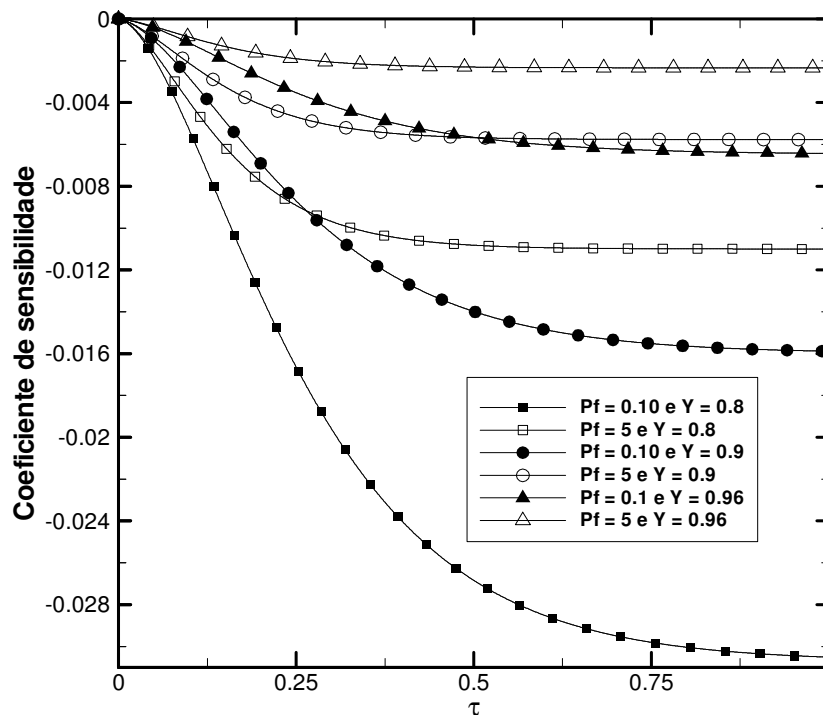


FIG. 4.9 Coeficiente de sensibilidade relativo a perfusão 0.1 e 5, $G = 2.48$

4.3 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO PARA A ESTIMATIVA DE PARÂMETROS

As técnicas de problema inverso encontradas na literatura (COLAÇO et al., 2004), empregadas na estimativa de parâmetros neste trabalho são categorizadas em métodos determinísticos (Levenberg-Marquadt (LM), Método do Gradiente Conjugado (CG) e

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)) e métodos heurísticos (Evolução Diferenciada (DE) e Enxame de Partículas (PS)).

Os métodos de otimização supracitados visam minimizar (ou maximizar) uma função objetivo. Neste trabalho, este funcional é assumido como a norma dos mínimos quadrados dada pela soma dos quadrados das diferenças entre as temperaturas medidas e estimadas. Assim, os coeficientes serão determinados de tal maneira que a soma dos quadrados dos resíduos seja mínima (COLAÇO et al., 2004).

4.3.1 MÉTODOS DETERMINÍSTICOS

Estes métodos baseiam-se na teoria de otimização, procurando o mínimo ou máximo da função objetivo, seguem uma direção de busca bem definida e a cada iteração caminham na direção correta da solução.

O método Levenberg-Marquadt resolve iterativamente problemas de minimização de funções não-lineares, pelo método de mínimos quadrados. Tal algoritmo é um melhoramento do método de Gauss-Newton, o qual envolve a inversa da matriz Hessiana no cálculo da direção de busca, que pode não existir. Em função desta restrição, o algoritmo de Levenberg-Marquadt propõe uma aproximação para a matriz Hessiana, tornando o cálculo da direção de busca independente da inversa da matriz Hessiana (OZISIK e ORLANDE, 2000).

O Gradiente Conjugado é um método de minimização clássico, cujo procedimento básico consiste em gerar uma seqüência de soluções aproximadas, obter os resíduos correspondentes e as direções de busca usadas para atualizar as respectivas soluções e resíduos. A cada iteração, são executados dois produtos internos para calcular os escalares de atualização, definidos de forma que a seqüência satisfaça certas condições de ortogonalidade (BECKER et al., 2008).

A idéia principal do Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno é adotar um processo iterativo finito, a fim de aproximar a inversa da matriz Hessiana, em vez de calculá-la com exatidão, como no método de Newton. Tal aproximação é obtida pela soma iterativa de matrizes simétricas definidas positivas, assegurando a não singularidade da Hessiana. Gradativamente, a cada iteração é melhorada a qualidade da aproximação.

4.3.2 MÉTODOS HEURÍSTICOS

A Evolução Diferenciada é uma técnica estocástica de busca e aprendizagem, baseada nos mecanismos da evolução natural das espécies. Inspira-se na evolução de cada indivíduo via processos de seleção, mutação e reprodução. O método gera uma população inicial escolhida aleatoriamente (primeira geração) cobrindo todo intervalo de busca. A idéia principal é gerar novos indivíduos (segunda geração) pela adição da diferença ponderada entre dois indivíduos aleatórios da primeira geração e um terceiro indivíduo aleatório da primeira geração, por meio de uma mutação. Cada membro da população inicial é combinado com outro indivíduo gerado aleatoriamente (cruzamento), para resultar na população melhorada, isto é, com indivíduos mais aptos. A aptidão é avaliada pela função objetivo e o processo termina quando é alcançado um número máximo de gerações (COLAÇO et al., 2006).

O Método “Particle Swarm” ou Enxame de partículas equilibra a individualidade e a sociabilidade em uma população. Cada indivíduo da população é uma partícula candidata à solução ótima e a posição deste indivíduo é alterada a cada nova geração. Assim, as partículas “voam” pelo espaço de busca das soluções. Durante o “vôo”, cada partícula ajusta sua posição de acordo com os demais membros da população, valendo-se de sua melhor posição (menor valor para a função objetivo) e da melhor posição das partículas vizinhas. Desta forma, o método combina uma busca local com uma busca global (ANGELINE, 1998)

4.4 RESULTADOS PARA A ESTIMATIVA DO COEFICIENTE DA PERFUSÃO SANGUÍNEA

Nesta seção, os resultados obtidos por meio da estimativa do coeficiente de perfusão na equação de Pennes (1948) são apresentados. As simulações numéricas foram realizadas por meio de programas desenvolvidos em linguagem Fortran 90, compilado através do software Compaq Visual Fortran Professional Edition 6.6.0 em um computador com processador Intel Pentium IV 3Ghz e 2Gb de memória RAM.

Uma simulação de experimentos foi conduzida, onde as medidas experimentais foram obtidas através da solução do problema direto com os parâmetros conhecidos. A fim de testar

a robustez dos métodos, consideraram-se também medições com erros experimentais adicionados a elas.

Na solução do problema inverso, todas as quantidades na formulação matemática foram consideradas conhecidas, exceto o coeficiente de perfusão. Três estimativas iniciais foram escolhidas de forma a testar a robustez dos métodos: uma escolhida próxima do valor exato e as outras mais afastadas do mesmo. Foram tomadas medidas para cada coeficiente de perfusão com frequência de 0.01 Hz, porém com períodos distintos: 1 min 15 s para $P_f = 0.1$ e 1 min 38 s, no caso de $P_f = 5$. A fim de simular a imprecisão dos instrumentos de medição, foram inseridos ruídos nas temperaturas medidas com diferentes níveis de desvios padrão: 1, 5 e 10% do valor da temperatura local. Tais ruídos são impostos como $\theta_{med} = \theta_{exa} + \varepsilon\sigma$, onde θ_{med} é a medida da temperatura adimensional local, θ_{exa} é a medida simulada por meio da solução do problema direto, ε é a variável randômica com distribuição Gaussiana e média zero tal que $-2.576 < \varepsilon < 2.576$, $\sigma = \delta\theta_{exa}$ é o desvio padrão e δ é igual a 0.01, 0.05 ou 0.10. A variável randômica foi gerada pela sub-rotina DRRNOR de IMSL (VNI, 2008). O critério de parada para as medidas com ruído foi baseado no Princípio da Discrepância (OZISIK e ORLANDE., 2000). Ou seja, o processo iterativo é interrompido quando o valor da função objetivo atinge o valor de $M\sigma^2\tau_f$, onde M é o número de sensores posicionados durante o experimento.

As TABs. 4.14, 4.15 e 4.16 apresentam os resultados para a estimativa de $P_f = 0.1$ por três técnicas determinísticas utilizadas neste trabalho. Nestas tabelas, a coluna “It” representa o número de iterações necessárias para cada uma das técnicas convergir para a solução, a coluna “Est” corresponde a estimativa alcançada e o erro calculado é o relativo.

Note que estas técnicas produziram resultados similares. Também pode ser observado que com o aumento do desvio-padrão os resultados tornam-se menos precisos. No entanto, mesmo com desvios padrão de até 1% na temperatura local, ainda é possível obter os valores do coeficiente de perfusão com desvios de 5% em relação ao seu valor exato. É interessante notar, no caso em que o coeficiente de perfusão é equivalente a 0.1, que à medida que o sensor é introduzido mais profundamente no tecido, a estimativa final é mais precisa. Finalmente, as estimativas iniciais não afetaram a estimativa final, indicando que a função tem uma topologia regular, possivelmente com apenas um ponto extremo na região de interesse. Por isso, é possível atingir uma boa qualidade nos resultados com um sensor localizado em torno de 1 mm abaixo da superfície.

As TABs. 4.17 e 4.18 mostram as estimativas do coeficiente de perfusão P_f com um

valor exato de 0.1 obtidos através do uso de dois métodos heurísticos discutidos anteriormente.

Comparando estes resultados com os anteriores apresentados nas TABs. 4.14, 4.15 e 4.16 é possível concluir que as estimativas são semelhantes independentemente do método empregado. No entanto, com um desvio padrão de até 10% da temperatura local, os resultados obtidos pelo método PS são um pouco melhores do que os outros, a $Pf = 0.1$. O tempo computacional exigido para todos os métodos corresponde a menos de 1 segundo.

As TABs. 4.19, 4.20 e 4.21 exibem os resultados obtidos pelos métodos determinísticos empregados neste trabalho na estimativa do coeficiente de perfusão igual a 5. A partir dessas tabelas, é possível verificar que os métodos alcançaram resultados semelhantes para quaisquer estimativas iniciais.

TAB. 4.14 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método LM para $Pf = 0.1$ e $G = 1$

Y	Est. Inic.	Método LM - $Pf = 0.1$; $G = 1$											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	0.1009	3	0.91%	0.1155	4	15.56%	0.1437	3	43.73%	0.1705	3	70.57%
	1	0.1009	4	0.91%	0.1155	4	15.56%	0.1437	4	43.73%	0.1705	4	70.57%
	5	0.1009	5	0.91%	0.1155	5	15.56%	0.1437	5	43.73%	0.1705	5	70.57%
0.9	0	0.1005	3	0.56%	0.1152	3	15.28%	0.1324	4	32.50%	0.1676	3	67.63%
	1	0.1005	4	0.56%	0.1152	4	15.28%	0.1324	4	32.50%	0.1676	4	67.63%
	5	0.1005	5	0.56%	0.1152	5	15.28%	0.1324	5	32.50%	0.1676	5	67.63%
0.8	0	0.1004	3	0.49%	0.1149	3	14.96%	0.1283	3	28.33%	0.1640	3	64.02%
	1	0.1004	4	0.49%	0.1149	4	14.96%	0.1283	3	28.33%	0.1640	4	64.02%
	5	0.1004	5	0.49%	0.1149	5	14.96%	0.1283	4	28.33%	0.1640	5	64.02%

TAB. 4.15 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método GC para $Pf = 0.1$ e $G = 1$

Y	Est. Inic.	Método GC - $Pf = 0.1$; $G = 1$											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	0.1008	4	0.85%	0.1147	4	14.74%	0.1443	4	44.33%	0.0295	3	70.44%
	1	0.1008	5	0.85%	0.1147	5	14.74%	0.1443	5	44.33%	0.0295	3	70.44%
	5	0.1008	6	0.85%	0.1147	6	14.74%	0.1443	6	44.33%	0.0295	4	70.44%
0.9	0	0.1005	4	0.54%	0.1134	4	13.41%	0.1306	4	30.68%	0.1664	3	66.43%
	1	0.1005	5	0.54%	0.1134	5	13.41%	0.1306	5	30.68%	0.1664	3	66.43%
	5	0.1005	6	0.54%	0.1134	6	13.41%	0.1306	6	30.68%	0.1664	4	66.43%
0.8	0	0.1003	4	0.33%	0.1115	4	11.57%	0.1277	4	27.75%	0.0365	3	63.49%
	1	0.1003	5	0.33%	0.1115	5	11.57%	0.1277	5	27.75%	0.0365	3	63.49%
	5	0.1003	6	0.33%	0.1115	6	11.57%	0.1277	6	27.75%	0.0365	4	63.49%

TAB. 4.16 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método BFGS para Pf = 0.1 e G = 1

Y	Est. Inic.	Método BFGS - Pf = 0.1; G = 1											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	0.1008	4	0.85%	0.1147	4	14.74%	0.1443	4	44.33%	0.0295	3	70.44%
	1	0.1008	5	0.85%	0.1147	5	14.74%	0.1443	5	44.33%	0.0295	3	70.44%
	5	0.1008	6	0.85%	0.1147	6	14.74%	0.1443	6	44.33%	0.0295	4	70.44%
0.9	0	0.1005	4	0.54%	0.1134	4	13.41%	0.1306	4	30.68%	0.1664	3	66.43%
	1	0.1005	5	0.54%	0.1134	5	13.41%	0.1306	5	30.68%	0.1664	3	66.43%
	5	0.1005	6	0.54%	0.1134	6	13.41%	0.1306	6	30.68%	0.1664	4	66.43%
0.8	0	0.1003	4	0.33%	0.1115	4	11.57%	0.1277	4	27.75%	0.0365	3	63.49%
	1	0.1003	5	0.33%	0.1115	5	11.57%	0.1277	5	27.75%	0.0365	3	63.49%
	5	0.1003	6	0.33%	0.1115	6	11.57%	0.1277	6	27.75%	0.0365	4	63.49%

TAB. 4.17 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método DE para Pf = 0.1 e G = 1, com 20 iterações

Y	Método DE - Pf = 0.1; G = 1							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	0.1006	0.70%	0.0712	28.82%	0.1478	47.87%	0.1710	71.02%
0.9	0.1006	0.61%	0.0808	19.24 %	0.1428	42.90%	0.1688	68.88%
0.8	0.0997	0.32%	0.0845	15.51%	0.1364	36.47%	0.1604	60.43%

TAB. 4.18 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para Pf = 0.1 e G = 1, com 20 iterações

Y	Método PS - Pf = 0.1; G = 1							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	0.0992	0.76%	0.0862	13.77%	0.0566	43.41%	0.1703	70.27%
0.9	0.1006	0.66%	0.0880	11.92%	0.0677	32.28%	0.0360	63.97%
0.8	0.1005	0.57%	0.1058	10.53%	0.0736	26.36%	0.1603	60.33%

TAB. 4.19 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método LM para Pf = 5 e G = 1

Y	Est. Inic.	Método LM - Pf = 5; G = 1											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	4.7520	5	4.96%	3.0607	4	38.79%	8.3935	4	67.87%	9.9541	5	99.08%
	4.9	4.7520	5	4.96%	3.0607	4	38.79%	8.3935	4	67.87%	9.9541	5	99.08%
	10	4.7520	6	4.96%	3.0607	5	38.79%	8.3935	6	67.87%	9.9541	6	99.08%
0.9	0	4.7531	4	4.94%	3.2979	4	34.04%	7.5179	4	50.36%	9.8132	4	96.26%
	4.9	4.7531	4	4.94%	3.2979	4	34.04%	7.5179	4	50.36%	9.8132	4	96.26%
	10	4.7531	6	4.94%	3.2979	6	34.04%	7.5179	5	50.36%	9.8132	6	96.26%
0.8	0	4.7537	4	4.92%	6.5003	4	30.01%	7.2468	4	44.94%	9.5587	4	91.18%
	4.9	4.7537	3	4.92%	6.5003	4	30.01%	7.2468	4	44.94%	9.5587	3	91.18%
	10	4.7537	6	4.92%	6.5003	6	30.01%	7.2468	5	44.94%	9.5587	6	91.18%

TAB. 4.20 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método GC para Pf = 5 e G = 1

Y	Est. Inic.	Método GC - Pf = 5; G = 1											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	4.7509	4	4.98%	6.8820	4	37.64%	7.5798	4	51.60%	9.9262	5	98.53%
	4.9	4.7509	3	4.98%	6.8820	3	37.64%	7.5798	3	51.60%	9.9262	4	98.53%
	10	4.7509	5	4.98%	6.8820	5	37.64%	7.5798	4	51.60%	9.9262	5	98.53%
0.9	0	4.7532	4	4.93%	6.6816	4	33.63%	7.4500	4	49.00%	9.7719	5	95.44%
	4.9	4.7532	3	4.93%	6.6816	3	33.63%	7.4500	3	49.00%	9.7719	4	95.44%
	10	4.7532	5	4.93%	6.6816	5	33.63%	7.4500	4	49.00%	9.7719	5	95.44%
0.8	0	5.2097	4	4.20%	6.4707	4	29.41%	7.1473	4	42.95%	9.5328	4	90.66%
	4.9	5.2097	3	4.20%	6.4707	3	29.41%	7.1473	3	42.95%	9.5328	3	90.66%
	10	5.2097	5	4.20%	6.4707	5	29.41%	7.1473	4	42.95%	9.5328	4	90.66%

TAB. 4.21 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método BFGS para Pf = 5 e G = 1

Y	Est. Inic.	Método BFGS - Pf = 5; G = 1											
		$\sigma = 0$			$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$			$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$		
		Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro	Est.	It	Erro
0.96	0	4.7509	4	4.98%	6.8820	4	37.64%	7.5798	4	51.60%	9.9262	5	98.53%
	4.9	4.7509	3	4.98%	6.8820	3	37.64%	7.5798	3	51.60%	9.9262	4	98.53%
	10	4.7509	5	4.98%	6.8820	5	37.64%	7.5798	4	51.60%	9.9262	5	98.53%
0.9	0	4.7532	4	4.93%	6.6816	4	33.63%	7.4500	4	49.00%	9.7719	5	95.44%
	4.9	4.7532	3	4.93%	6.6816	3	33.63%	7.4500	3	49.00%	9.7719	4	95.44%
	10	4.7532	5	4.93%	6.6816	5	33.63%	7.4500	4	49.00%	9.7719	5	95.44%
0.8	0	5.2097	4	4.20%	6.4707	4	29.41%	7.1473	4	42.95%	9.5328	4	90.66%
	4.9	5.2097	3	4.20%	6.4707	3	29.41%	7.1473	3	42.95%	9.5328	3	90.66%
	10	5.2097	5	4.20%	6.4707	5	29.41%	7.1473	4	42.95%	9.5328	4	90.66%

As estimativas apresentadas nas TABs. 4.19 e 4.20, não são satisfatórias, mesmo para um desvio padrão igual a 1% da temperatura local. Também pode ser notado que, mesmo para posições próximas à superfície do tecido, a estimativa é pior do que para o caso onde o sensor é inserido de forma mais intrusiva. Comparando os resultados apresentados nestas tabelas nota-se que a estimativa para Pf = 5 é menos precisa, o que confirma a análise de sensibilidade realizada anteriormente.

Os resultados expostos nas TABs. 4.22 e 4.23 revelam as estimativas realizadas pelos métodos heurísticos para o coeficiente de perfusão equivalente a 5. Note que há uma ligeira superioridade do Método “Particle Swarm” equiparado ao Método Evolução Diferenciada. Comparando esses resultados com os presentes nas TABs. 4.19, 4.20 e 4.21, podemos concluir que para o problema estudado nesta contribuição parece não existir nenhuma diferença significativa nos resultados obtidos usando os métodos determinísticos e

heurísticos. Isto se dá provavelmente porque a função é bem comportada, na região de interesse, tendo um único ponto extremo.

TAB. 4.22 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método DE para Pf = 5 e G = 1, com 20 iterações

Y	Método DE - Pf = 5; G = 1							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	4.7535	4.93%	2.6106	47.79%	8.4480	68.96%	9.9958	99.92%
0.9	4.7554	4.89%	2.8276	43.45%	7.5792	51.58%	9.8474	96.95%
0.8	4.7679	4.64%	6.6265	32.53%	7.3394	46.79%	9.6323	92.65%

TAB. 4.23 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para Pf = 5 e G = 1, com 20 iterações

Y	Método PS - Pf = 5; G = 1							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	4.7567	4.87%	3.2732	34.54%	8.3485	66.97%	9.9054	98.11%
0.9	4.7569	4.86%	3.4446	31.11%	2.4943	50.11%	9.7971	95.94%
0.8	4.7575	4.85%	3.5512	28.98%	2.9433	41.13%	9.5513	91.03%

As FIGs. 4.10, 4.11 e 4.12 ilustram a evolução temporal do perfil de temperatura para as estimativas obtidas pelo método PS para Pf = 0.1, nas posições Y = 0.8, 0.9 e 0.96, respectivamente. A partir dessas figuras, pode-se observar que a solução do Problema Direto a partir do valor da perfusão sanguínea estimada pelo método PS resultou em temperaturas estimadas que estejam muito próximas das temperaturas exatas, mesmo para erros experimentais com grande nível de ruído.

As FIGs. 4.13, 4.14 e 4.15 exibem a evolução temporal do perfil de temperatura para as estimativas obtidas pelo método PS para Pf = 5, nas posições Y = 0.8, 0.9 e 0.96, respectivamente.

Neste caso, existem grandes discrepâncias quando o sensor está localizado mais afastado da superfície do tecido e à medida que o ruído aumenta, nestas posições. Nota-se que o perfil de temperatura foi bem capturado para os tempos iniciais. Entretanto, verifica-se que a temperatura atingida no regime permanente foi maior do que a temperatura exata com a inserção de 1 e 5% de ruído. Por outro lado, as medidas com 10% de desvio-padrão geraram uma temperatura menor comparada ao valor exato, conforme visto nas FIGs. 4.13 e 4.14.

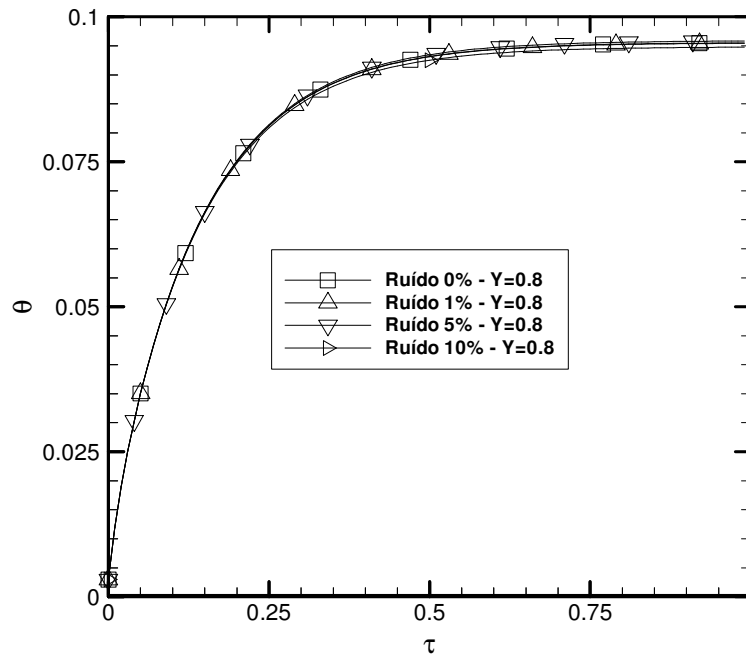


FIG. 4.10 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 0.1$ e $Y = 0.8$

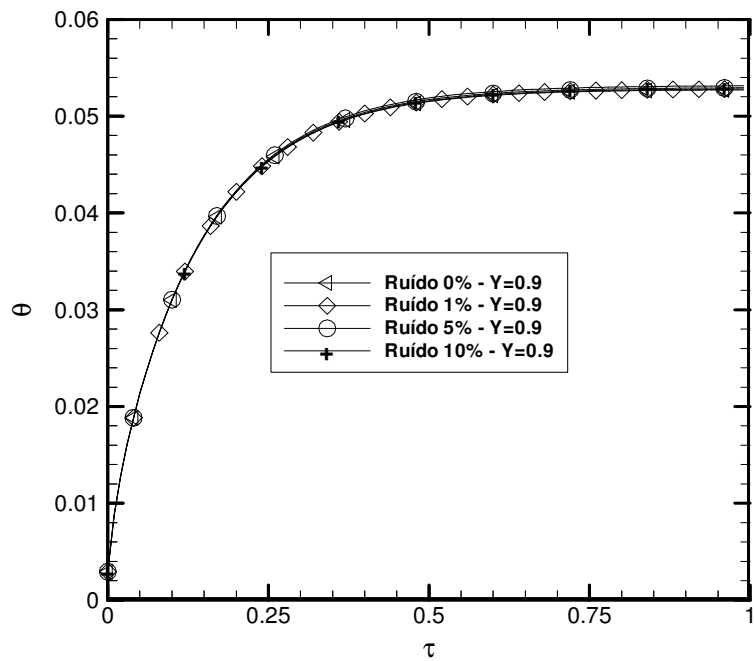


FIG. 4.11 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 0.1$ e $Y = 0.9$

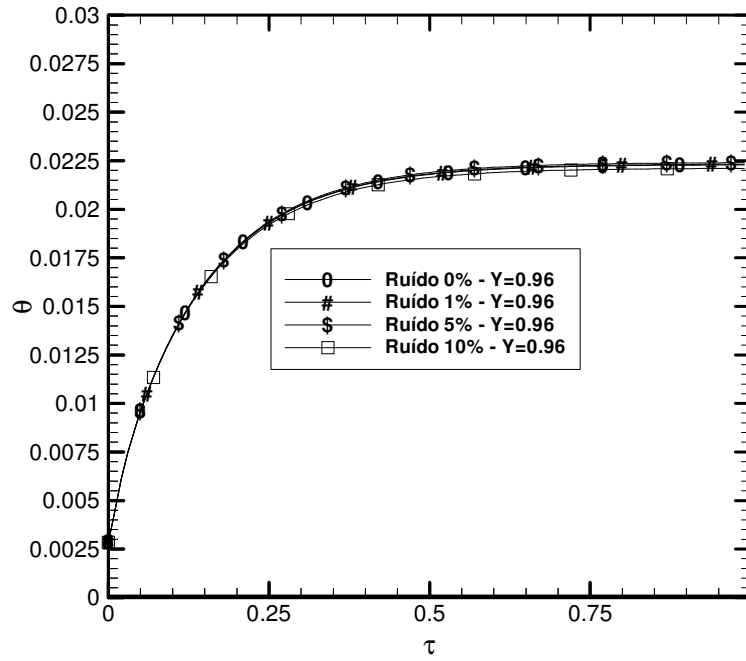


FIG. 4.12 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 0.1$ e $Y = 0.96$

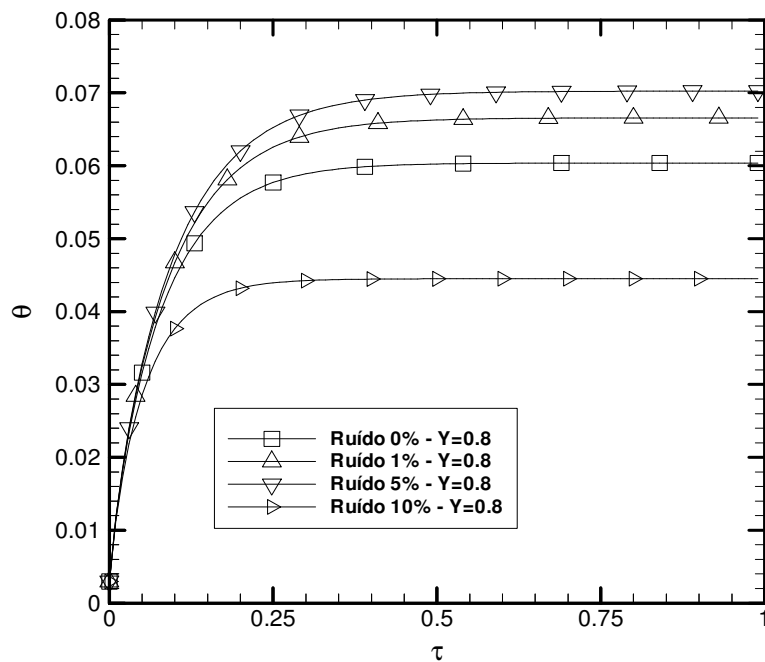


FIG. 4.13 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 5$ e $Y = 0.8$

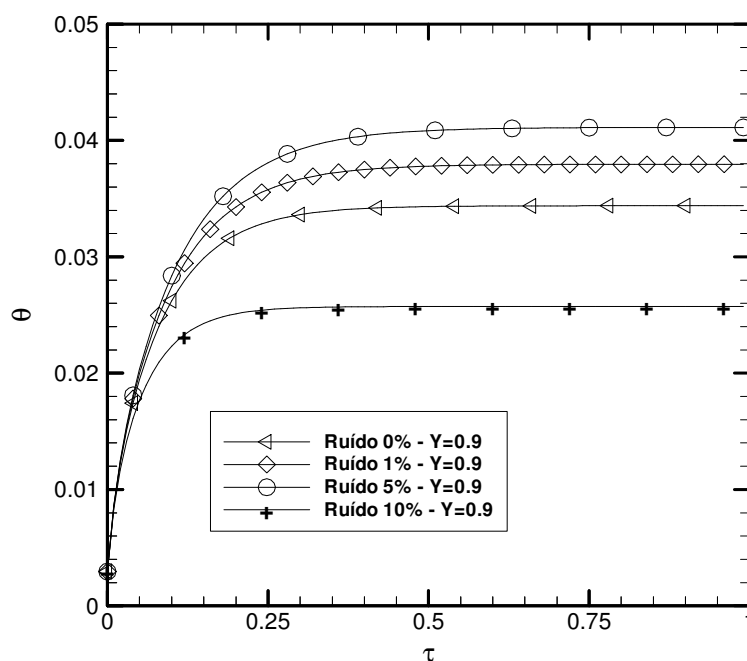


FIG. 4.14 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 5$ e $Y = 0.9$

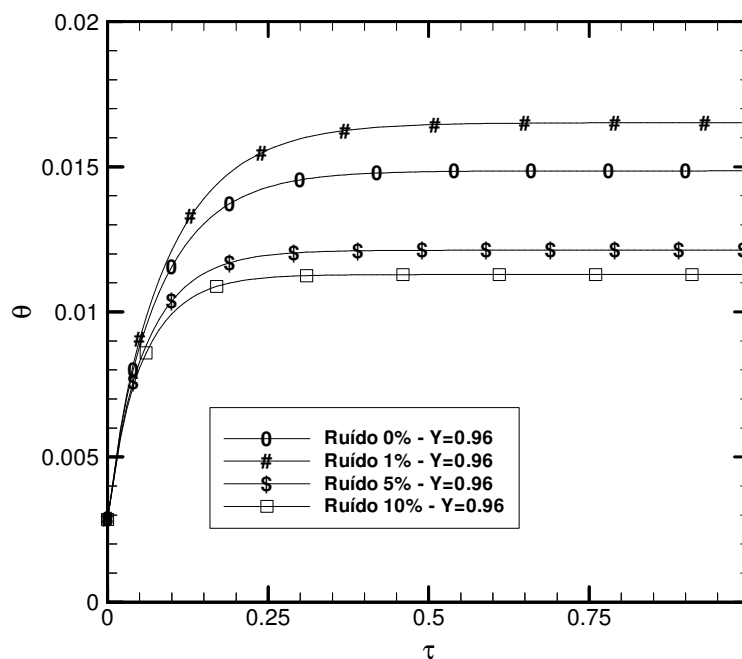


FIG. 4.15 Perfil de temperatura para P_f estimado pelo método PS relativo a $P_f = 5$ e $Y = 0.96$

As FIGs. 4.16 e 4.17 apresentam o histórico da convergência para o Algoritmo Levenberg-Marquadt (LM) e o método Enxame de Partículas (PS).

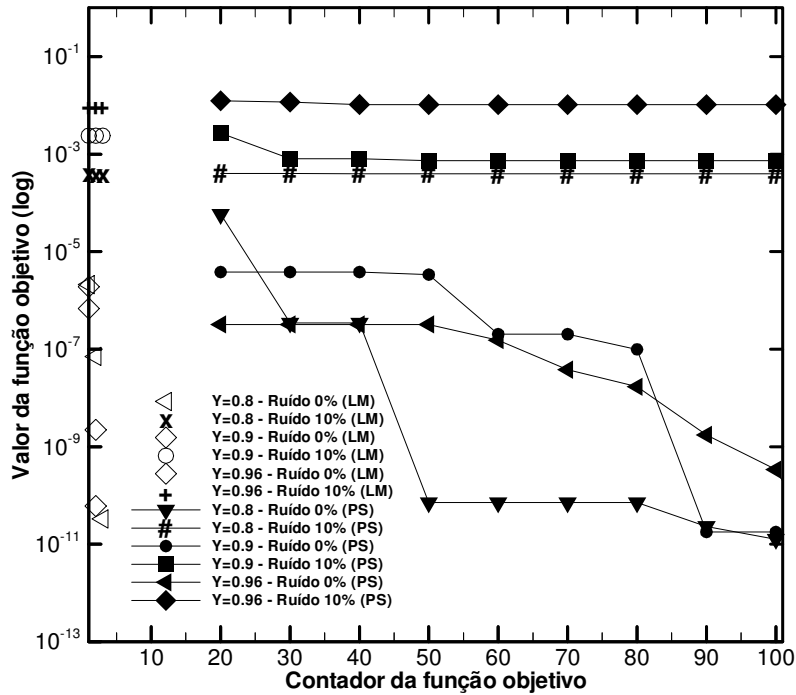


FIG. 4.16 Histórico de convergência relativo a estimativa de $P_f = 0.1$

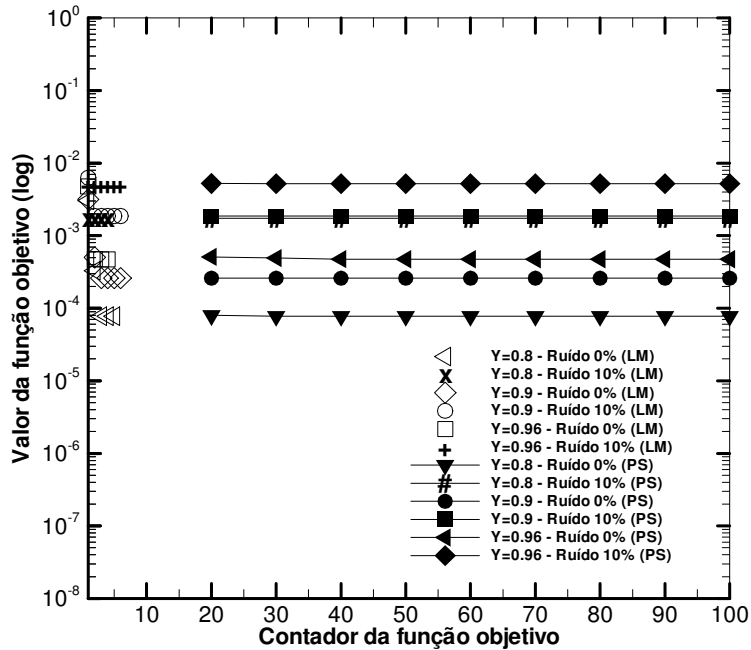


FIG. 4.17 Histórico de convergência relativo a estimativa de $P_f = 5$

No método LM, as estimativas iniciais foram 5 e 10, e o valor exato da perfusão sanguínea era igual a 0.1 e 5, respectivamente. Como comentário geral, pode-se observar que em ambos os métodos, a função objetivo é mais minimizada à medida que o sensor é posicionado mais afastado da superfície do tecido. Ainda, nota-se que o valor da função

objetivo no final do processo iterativo, aumenta conforme se aumenta a perfusão sanguínea. Tal observação confirma o fato das estimativas apresentada nas TAB. 4.18 terem sido melhores em relação as da TAB. 4.23.

Na FIG. 4.16 observa-se que o método Enxame de Partículas apresentou um desempenho melhor para o caso sem ruídos nas medidas, visto que o decaimento da função objetivo foi maior. Em contrapartida, quando são inseridos ruídos nas medidas a função objetivo permanece com o seu valor quase inalterado.

A seguir, a metodologia empregada no estudo anterior será aplicada durante um processo terapêutico de hipertermia. O método Enxame de Partículas foi escolhido para obtenção das estimativas. Nesta simulação, o tecido cancerígeno possui a taxa de geração de calor metabólico de 33800 W/m^3 e está exposto a uma fonte de calor externa de 50000 W/m^3 . As TABs. 24 e 25 apresentam estimativas um pouco mais precisas em relação às obtidas para $G = 1$ (sem tratamento), nas TABs. 4.18 e 4.23. Tal resultado era esperado, pois conforme a análise de sensibilidade apresentada nas FIGs. 4.8 e 4.9, o aumento do coeficiente G proporciona uma maior sensibilidade do parâmetro P_f . Entretanto, permanece a dificuldade em estimar o parâmetro em um tecido mais irrigado.

TAB. 4.24 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 0.1$ e $G = 2.48$ com 20 iterações

Y	Método PS - $P_f = 0.1$; $G = 2.48$							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	0.1006	0.69%	0.1127	12.77%	0.0595	40.41%	0.1672	67.24%
0.9	0.1005	0.54%	0.1095	9.59%	0.0741	25.86%	0.0409	59.06%
0.8	0.1003	0.34%	0.0913	8.69%	0.1213	21.31%	0.0453	54.68%

TAB. 4.25 Estimativa do coeficiente de perfusão pelo método PS para $P_f = 5$ e $G = 2.48$ com 20 iterações

Y	Método PS - $P_f = 5$; $G = 2.48$							
	$\sigma = 0$		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$		$\sigma = 0.1 \theta_{\text{exa}}$	
	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro	Est.	Erro
0.96	4.7569	4.86%	6.6313	32.63%	8.0241	60.48%	9.8784	97.57%
0.9	5.2395	4.79%	6.4263	28.53%	7.0526	41.05%	9.5495	90.99%
0.8	4.7656	4.69%	6.3711	27.42%	7.0259	40.52%	9.4919	89.84%

Este estudo inicial abordou a estimativa do coeficiente de perfusão sanguínea na equação de biotransferência de calor de Pennes (1948). A partir de uma análise de sensibilidade, foi

investigada a viabilidade de se estimar este coeficiente e as simulações realizadas nesta contribuição, revelaram que as medições mais intrusivas levam a uma melhor estimativa.

Três métodos determinísticos e dois heurísticos foram empregados para a obtenção do coeficiente de perfusão, com os seus valores finais e os seus desempenhos foram comparados. Para o caso de um tecido menos perfundido, $P_f = 0.1$, todos os métodos convergiram para valores próximos ao exato do coeficiente de perfusão, independentemente da estimativa inicial escolhida para os métodos determinísticos com medidas sem erro.

Conclui-se ainda que a escolha dos sensores, consoante o parâmetro em medição, deve ser implementada atendendo, principalmente, à sua sensibilidade. Assim, foi mais difícil recuperar tal coeficiente com sensores próximos à superfície do tecido.

Para um alto coeficiente de perfusão, $P_f = 5$, a estimativa foi pior, especialmente quando ruídos foram inseridos nas medidas experimentais simuladas. Neste caso, as melhores estimativas foram obtidas com desvios de até 5% do valor exato, obtidos para medidas sem erro experimental.

Os resultados para os casos com ou sem tratamento, indicaram que o aumento da fonte de geração de calor externa melhora as estimativas. De fato, como elucidado nas FIGs. 4.8 e 4.9, a sensibilidade do coeficiente de perfusão é maior quando G é aumentado.

De posse dos resultados para a estimativa de parâmetro, esta metodologia é adequada para identificação de tumores superficiais, por exemplo, na pele, já que estes possuem uma perfusão sanguínea baixa.

5 PROBLEMA INVERSO DE ESTIMATIVA DE FUNÇÕES

A fim de realizar uma simulação mais realista possível, neste capítulo a perfusão sanguínea terá variação espacial (unidimensional e bidimensional). Será empregado o Método do Gradiente Conjugado com Problema Ajunto para a estimativa da mesma. Com o intuito de avaliar a robustez do método, as funções a serem estimadas admitiram variação na forma constante, senoidal, triangular, quadrada e degrau. Primeiramente, foi conduzido um estudo acerca das etapas do procedimento iterativo do método, bem como o critério de parada adotado. No entanto, a solução do Problema Inverso necessitará da solução de dois problemas

auxiliares, o Problema de Sensibilidade e o Problema Adjunto. Assim, será desenvolvida toda a formulação e a solução destes, por meio do Método dos Volumes Finitos.

5.1 MÉTODO DE OTIMIZAÇÃO PARA ESTIMATIVA DE FUNÇÃO

Tendo em vista, que a solução do problema inverso será obtida pelo Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto para estimativa de função, serão traçados nesta seção os passos para a implementação do método.

A princípio, considera-se que na solução do Problema Inverso todas as quantidades do modelo matemático são conhecidas, exceto a forma funcional da perfusão sanguínea. Porém, considera-se que esta pertença ao espaço de Hilbert, cujo quadrado das funções é integrável na região de interesse (Ozisik e Orlande, 2000).

A solução do problema inverso para estimativa de função é obtida pela minimização do seguinte funcional:

$$S[\text{Pf}(x, y)] = \int_0^{\tau_f} \sum_{i=1}^M (\mu_i - \theta_i)^2 d\tau \quad (5.1)$$

onde, μ_i são as temperaturas medidas por um quantidade M de sensores térmicos, obtidas por meio da solução do Problema Direto, e θ_i é a temperatura estimada, durante o tempo τ_f .

Além disso, este método iterativo necessita da solução de dois problemas auxiliares: o Problema de Sensibilidade e o Problema Adjunto, que forneceram as funções $\Delta\theta(x, y, \tau)$ e $\lambda(x, y, \tau)$. Tais funções serão utilizadas para determinar o gradiente do funcional e o tamanho do passo de procura da solução do Problema Inverso, em cada iteração.

Para a solução numérica do Problema de Sensibilidade e do Problema Adjunto é utilizado o Método dos Volumes Finitos. O código computacional foi validado por meio da comparação da solução numérica do Problema Direto, via MVF, com a solução analítica apresentada no capítulo 4.

Em seguida, deriva-se o Problema de Sensibilidade que é fundamental para o cálculo da variação de temperatura $\Delta\theta(x, y, \tau)$, proveniente da perturbação do coeficiente de perfusão ($\text{Pf} = \text{Pf} + \Delta\text{Pf}$).

Para a determinação do Problema Adjunto, é necessário minimizar EQ. 5.1, satisfazendo o Problema Direto. Diante desta restrição na minimização, introduz-se o multiplicador de Lagrange $\lambda(x,y, \tau)$. A solução do Problema Adjunto fornece $\lambda(x,y, \tau)$ no tempo $\tau = \tau_f$. Logo, como o Problema adjunto é um problema de condição final e este é resolvido pelo Método dos Volumes Finitos, é necessário transformá-lo em um problema de condição inicial.

Durante a derivação do Problema Adjunto obtém-se a equação gradiente para o funcional, como poderá ser visto nas seções seguintes.

O processo iterativo do Método do Gradiente Conjugado é dado pela equação:

$$Pf^{k+1}(x, y) = Pf^k(x, y) + \alpha^k d^k(x, y) \quad (5.2)$$

onde a direção de descida d^k é dada por:

$$d^k(x, y) = -\nabla S[Pf^k(x, y)] + \gamma^k d^{k-1}(x, y) \quad (5.3)$$

e o coeficiente de conjugação γ^k pode ser obtido pela expressão de Fletcher-Reeves:

$$\gamma^k = \frac{\int_0^{x_f} \int_0^{y_f} \{\nabla S[Pf^k(x, y)]\}^2 dy dx}{\int_0^{x_f} \int_0^{y_f} \{\nabla S[Pf^{k-1}(x, y)]\}^2 dy dx}, \quad k = 1, 2, 3... \quad (5.4)$$

$$\gamma^k = 0, \quad k = 0 \quad (5.5)$$

A integral dupla acima se transforma em uma integral simples quando Pf é unidimensional. Da mesma forma, a integral se reduz a um número quando Pf é constante.

Analisando as EQs. 5.2 e 5.3, observa-se que caso existam pontos do domínio onde o gradiente do funcional seja nulo. Tem-se que a direção de descida nestes pontos também é nula. Consequentemente, a estimativa permanece no valor fornecido inicialmente nestas posições.

É válido ressaltar, que o procedimento iterativo inicia-se com a direção de descida do Método Steepest-Descent, conforme visto pelas EQs. 5.3 e 5.5.

O tamanho do passo de procura é determinado por meio da minimização do funcional com relação à α^k .

$$\min_{\alpha^k} S[\text{Pf}(x, y)] = \min_{\alpha^k} \int_0^{\tau_f} \left[\sum_{i=1}^M (\mu_i - \theta)^2 \right] d\tau \quad (5.6)$$

Então, por uma expansão de séries de Taylor a equação EQ. 5.6 torna-se:

$$\min_{\alpha^k} S[\text{Pf}(x, y)] = \min_{\alpha^k} \int_0^{\tau_f} \left[\sum_{i=1}^M (\mu_i + \alpha^k \Delta\theta - \theta)^2 \right] d\tau \quad (5.7)$$

Para minimizar a EQ. 5.7, deriva-se a equação em relação à α^k e iguala à mesma a zero.

$$\int_0^{\tau_f} \left[\sum_{i=1}^M 2(\mu_i + \alpha^k \Delta\theta - \theta) \Delta\theta \right] d\tau = 0 \quad (5.8)$$

Resolvendo-se a EQ. 5.8 obtém-se a seguinte equação para o tamanho do passo de procura:

$$\therefore \alpha^k = \frac{\int_0^{\tau_f} \sum_{i=1}^M [(\theta_i - \mu_i) \Delta\theta_i] d\tau}{\int_0^{\tau_f} \sum_{i=1}^M (\Delta\theta_i)^2 d\tau} \quad (5.9)$$

onde $\Delta\theta_i(x, y, \tau)$ é a solução do Problema de Sensibilidade.

Normalmente, o processo iterativo é interrompido quando o funcional objetivo atinge uma determinada tolerância pré-estabelecida. Isto ocorrerá para os casos cujas medidas são livres de erro. Todavia, nos casos em que são introduzidos erros experimentais nas medidas simuladas, este critério de parada não é adequado, pois, quando se utiliza um valor pequeno para a tolerância, as altas frequências dos ruídos podem gerar grandes oscilações entre as funções exata e estimada.

Com o objetivo de tornar as estimativas mais estáveis, será utilizado como critério de parada, o Princípio da Máxima Discrepância, onde o valor da função objetivo deverá atingir o valor de $M\sigma^2\tau_f$, onde M é a quantidade de sensores posicionados na região de interesse e σ é o desvio-padrão.

5.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DIRETO

O Método dos Volumes Finitos (MVF) caracteriza-se pela discretização do domínio em volumes de controle. Dentro de cada volume, as equações diferenciais de conservação são integradas no espaço e no tempo. Em seguida funções de interpolação são propostas para os fluxos convectivos e difusivos. Este procedimento resulta em uma equação algébrica para cada grandeza conservada em cada volume. Dessa forma, as leis de conservação são mantidas dentro de cada volume.

A FIG. 5.1 ilustra os volumes em uma região do domínio. O volume P é o volume onde as equações algébricas são obtidas. Os volumes vizinhos ao volume P são denominados com base nos pontos cardiais e colaterais norte (N), sul (S), oeste (W), leste (E), nordeste (NE), noroeste (NW), sudeste (SE) e sudoeste (SW), os quais são usados nas funções de interpolação propostas para aproximar os fluxos convectivos e difusivos. As letras minúsculas e, n, s, w representam, respectivamente, as faces leste, norte, sul e oeste de cada volume centrado em P. Para fins de representação, as grandezas conservadas estão associadas ao centro de cada volume finito.

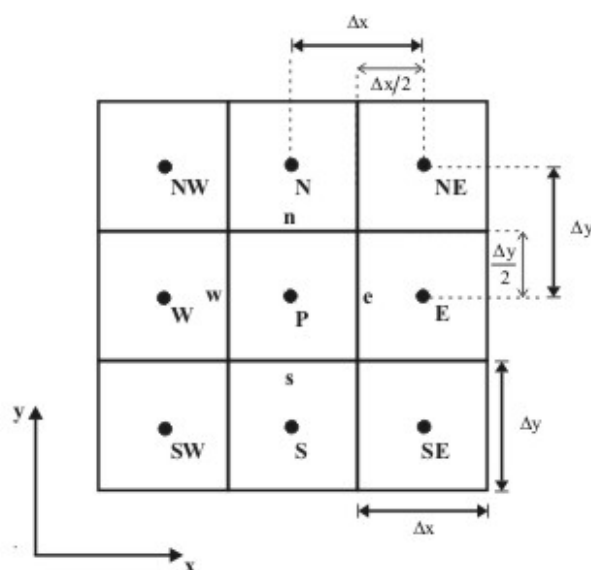


FIG. 5.1 Nomenclatura dos volumes finitos

No presente trabalho, adotou-se o intervalo de discretização no tempo, $\Delta\tau$, constante e malha uniforme. A aplicação das condições de contorno fundamentou-se na técnica de balanço para os volumes da fronteira por ser considerada a mais adequada devido ao seu

embasamento físico. A formulação empregada foi a totalmente implícita por ser incondicionalmente estável (MALISKA, 2004).

Integrando a EQ. 3.15 no espaço e no intervalo de tempo, $\Delta\tau$, no volume P mostrado na FIG. 5.1 obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{(\theta_P^{n+1} - \theta_P^n)}{\Delta\tau} \Delta X \Delta Y = & \left(\frac{\partial\theta}{\partial X} \Big|_e - \frac{\partial\theta}{\partial X} \Big|_w \right) \Delta Y + \left(\frac{\partial\theta}{\partial Y} \Big|_n - \frac{\partial\theta}{\partial Y} \Big|_s \right) \Delta X - \\ & - Pf\theta_P^{n+1} \Delta X \Delta Y + G \Delta X \Delta Y \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde os subscritos n, e, w, s indicam que as temperaturas são avaliadas sobre as faces do volume P. Por outro lado, o subscrito P indica que a temperatura é avaliada no interior do volume.

Os termos relativos à perfusão e a geração de calor foram considerados como uma média representativa dentro do volume P.

As aproximações para as derivadas associadas aos fluxos que atravessam as faces dos volumes são:

$$\frac{\partial\theta}{\partial X} \Big|_e \approx \frac{\theta_E^{n+1} - \theta_P^{n+1}}{\Delta X} \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial X} \Big|_w \approx \frac{\theta_P^{n+1} - \theta_W^{n+1}}{\Delta X} \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial Y} \Big|_n \approx \frac{\theta_N^{n+1} - \theta_P^{n+1}}{\Delta Y} \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial Y} \Big|_s \approx \frac{\theta_P^{n+1} - \theta_S^{n+1}}{\Delta Y} \quad (5.14)$$

Os subscritos N, S, E e W indicam que a temperatura é avaliada, respectivamente, nos volumes norte, sul, leste e oeste.

Introduzindo as aproximações para as derivadas EQs. 5.11-5.14 na EQ. 5.10, tem-se

$$\begin{aligned} (\theta_P^{n+1} - \theta_P^n) \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta\tau} = & (\theta_E^{n+1} - \theta_P^{n+1}) \frac{\Delta Y}{\Delta X} - (\theta_P^{n+1} - \theta_W^{n+1}) \frac{\Delta Y}{\Delta X} + \\ & + (\theta_N^{n+1} - \theta_P^{n+1}) \frac{\Delta X}{\Delta Y} - (\theta_P^{n+1} - \theta_S^{n+1}) \frac{\Delta X}{\Delta Y} - Pf\theta_P^{n+1} \Delta X \Delta Y + G \Delta X \Delta Y \end{aligned} \quad (5.15)$$

A EQ. 5.15 pode ser reescrita conforme a EQ. 5.16. Esta equação representa cada uma das equações algébricas associadas a cada volume.

$$A_p T_P = A_e T_E + A_w T_W + A_n T_N + A_s T_S + B_P \quad (5.16)$$

Os coeficientes da EQ. 5.16 são dados por:

$$A_e = \frac{\Delta Y}{\Delta X} \quad (5.17)$$

$$A_w = \frac{\Delta Y}{\Delta X} \quad (5.18)$$

$$A_n = \frac{\Delta X}{\Delta Y} \quad (5.19)$$

$$A_s = \frac{\Delta X}{\Delta Y} \quad (5.20)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y \quad (5.21)$$

$$B_P = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y \quad (5.22)$$

Os coeficientes A_p , A_e , A_w , A_n , A_s e B_p são utilizados na construção das equações algébricas associadas a todos os volumes do domínio. Entretanto, a forma apresentada nas EQs. 5.17-5.22 não se aplica aos volumes contíguos aos contornos. Nestes volumes, a introdução das condições de contorno modifica os coeficientes das equações algébricas.

As aproximações para as derivadas utilizadas nos fluxos em cada contorno são apresentadas a seguir:

Contornos leste e oeste (fluxo nulo)

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial X} \right|_e = 0, \quad \left. \frac{\partial \theta}{\partial X} \right|_w = 0 \quad (5.23)$$

Contorno norte (temperatura prescrita)

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial Y} \right|_n = \frac{\theta_n^{n+1} - \theta_P^{n+1}}{\frac{\Delta Y}{2}} \quad (5.24)$$

Contorno sul (convecção)

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial Y} \right|_s = \frac{\text{Bi}}{1 + \text{Bi} \frac{\Delta Y}{2}} (\theta_P^{n+1} - \theta_\infty) \quad (5.25)$$

Os coeficientes modificados em relação às EQs. 5.17-5.22 e utilizados nas equações algébricas em cada contorno são apresentados abaixo:

No contorno leste,

$$A_e = 0 \quad (5.26)$$

No contorno oeste,

$$A_w = 0 \quad (5.27)$$

No contorno norte,

$$A_n = 0 \quad (5.28)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \theta_n \quad (5.29)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + \text{Pf} \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \quad (5.30)$$

No contorno sul,

$$A_s = 0 \quad (5.31)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + \frac{\text{Bi} \Delta X}{1 + \frac{\text{Bi} \Delta Y}{2}} \theta_\infty \quad (5.32)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y + \frac{Bi \Delta X}{1 + Bi \frac{\Delta Y}{2}} \quad (5.33)$$

No contorno nordeste,

$$A_e = A_n = 0 \quad (5.34)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \theta_n \quad (5.35)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \quad (5.36)$$

No contorno noroeste,

$$A_w = A_n = 0 \quad (5.37)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \theta_n \quad (5.38)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y + 2 \frac{\Delta X}{\Delta Y} \quad (5.39)$$

No contorno sudeste,

$$A_e = A_s = 0 \quad (5.40)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + \frac{Bi \Delta X}{1 + \frac{Bi \Delta Y}{2}} \theta_\infty \quad (5.41)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y + \frac{Bi \Delta X}{1 + Bi \frac{\Delta Y}{2}} \quad (5.42)$$

No contorno sudoeste,

$$A_w = A_s = 0 \quad (5.43)$$

$$B_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} \theta_p^n + G \Delta X \Delta Y + \frac{Bi \Delta X}{1 + \frac{Bi \Delta Y}{2}} \theta_\infty \quad (5.44)$$

$$A_p = \frac{\Delta X \Delta Y}{\Delta \tau} + A_e + A_w + A_n + A_s + Pf \Delta X \Delta Y + \frac{Bi \Delta X}{1 + Bi \frac{\Delta Y}{2}} \quad (5.45)$$

O sistema de equações gerado pela EQ. 5.16 é resolvido por meio do Método dos Gradientes Biconjugados, o qual é empregado na resolução de sistemas lineares não-simétricos (PRESS et al., 1986).

5.3 VALIDAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA DO PROBLEMA DIRETO

Nesta seção, o modelo numérico implementado computacionalmente é validado através da comparação com os resultados analíticos obtido por AZEVEDO et al. (2006). Os parâmetros utilizados nestes testes foram: $G = 1$, $Y = 0.5$, $Bi = 5$, $\theta_0 = 0.003$, $T_a = 36.5$, $\theta_\infty = 0.001$, $Pf = 0.1$ e 5 . O tecido possui uma dimensão característica de 3 cm de altura por 3 cm de comprimento.

Como o uso de métodos numéricos exige a utilização de malhas para discretização, há uma influência do refinamento da malha adotada sobre os resultados. Portanto, é realizado um estudo em torno do tamanho da malha a ser empregada. Além disso, foram considerados diferentes passos de tempo para determinar o grau de influência do mesmo nos resultados.

As FIGs. 5.2 e 5.3 mostram, respectivamente, comparações dos perfis de temperatura no intervalo de tempo adimensional $[0,1]$, para $Pf = 0.1$ e $Pf = 5$. Nas duas simulações são apresentadas as soluções numéricas para 5 configurações de malhas, utilizando o passo no tempo igual a 0.001.

As FIGs. 5.4 e 5.5 apresentam os campos de temperatura para ambos os coeficientes de perfusão, adotando-se $d\tau = 0.01$.

Pode-se observar pelos resultados apresentados nas FIGs. 5.2, 5.3, 5.4 e 5.5, que para todas as malhas utilizadas os valores numéricos coincidem com os valores analíticos para ambos os coeficientes de perfusão sanguínea. Entretanto, para avaliar detalhadamente os resultados as TABs. 26 e 27 apresentam o erro relativo entre ambas as soluções, em cada malha.

As TABs. 5.1 e 5.2 mostram o erro relativo entre a solução analítica (AZEVEDO et al., 2006), para tempos distintos e valores para o coeficiente de perfusão. Em ambas as

simulações foram testadas 5 configurações de malhas e a temperatura foi avaliada no meio do tecido ($Y = 0.5$ e $X = 0.5$), como mencionado anteriormente.

A TAB. 5.1 também permite investigar onde a variação do passo no tempo gera maior influência na solução. Desta forma, verifica-se a diferença percentual entre os erros relativos para malha e tempo fixos. Assim, a mesma não supera 0.15%, sendo esta atingida para a malha com 5000 volumes e $\tau = 0.5$. Por outro lado, esta diferença não foi inferior a 0.02%. Com o mesmo critério empregado no parágrafo anterior, analisa-se a TAB. 5.2. Encontra-se a maior diferença percentual entre os erros relativos, que foi de 0.14%, para malha 50x50 e $\tau = 0.2$. Em contrapartida, a menor foi de 0.01%.

Observa-se que a solução numérica, no regime permanente, apresenta menores divergências em relação à solução analítica para $Pf = 5$ do que para $Pf = 0.1$. Para ambos, os resultados para a distribuição de temperatura referentes as malhas 100x100 e 150x150 apresentam um erro relativo inferior a 0.3%.

Os tempos computacionais apresentados nas TABs. 5.1 e 5.2 não ultrapassaram 2 min e 42 s. A primeira vista, não representa um esforço computacional significativo no contexto da solução do Problema Direto. Porém, pelo prisma do Problema Inverso, o qual utiliza o Problema Direto diversas vezes, o mesmo tempo mencionado torna-se expressivo.

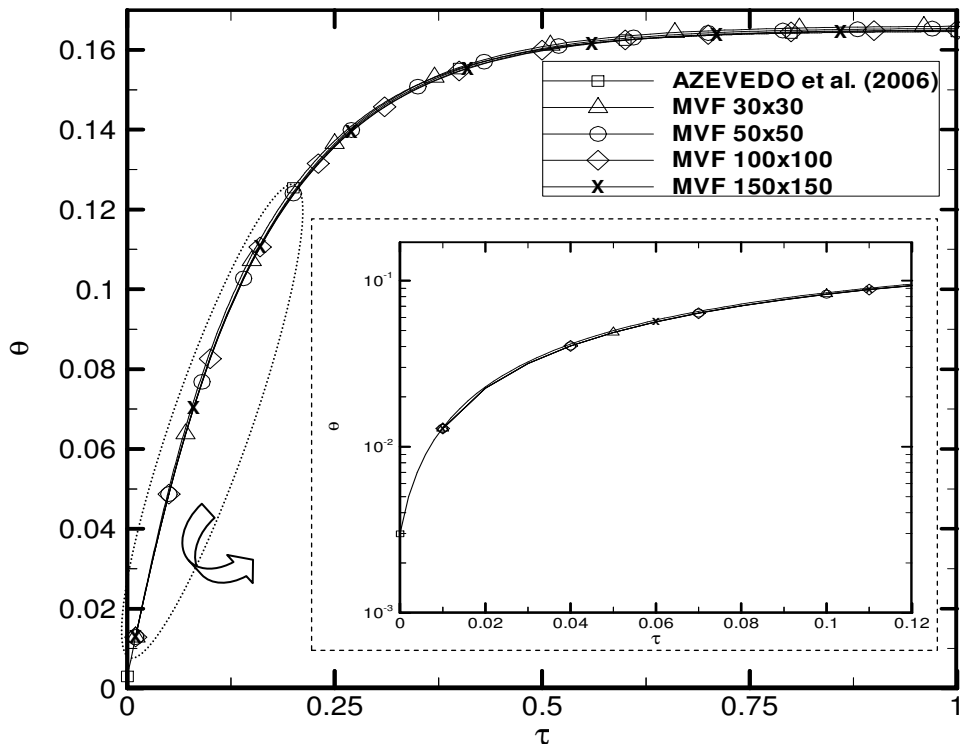


FIG. 5.2 Solução numérica e analítica, $Pf = 0.1$, $Y = 0.5$, $G = 1$ e $\Delta\tau = 0.001$

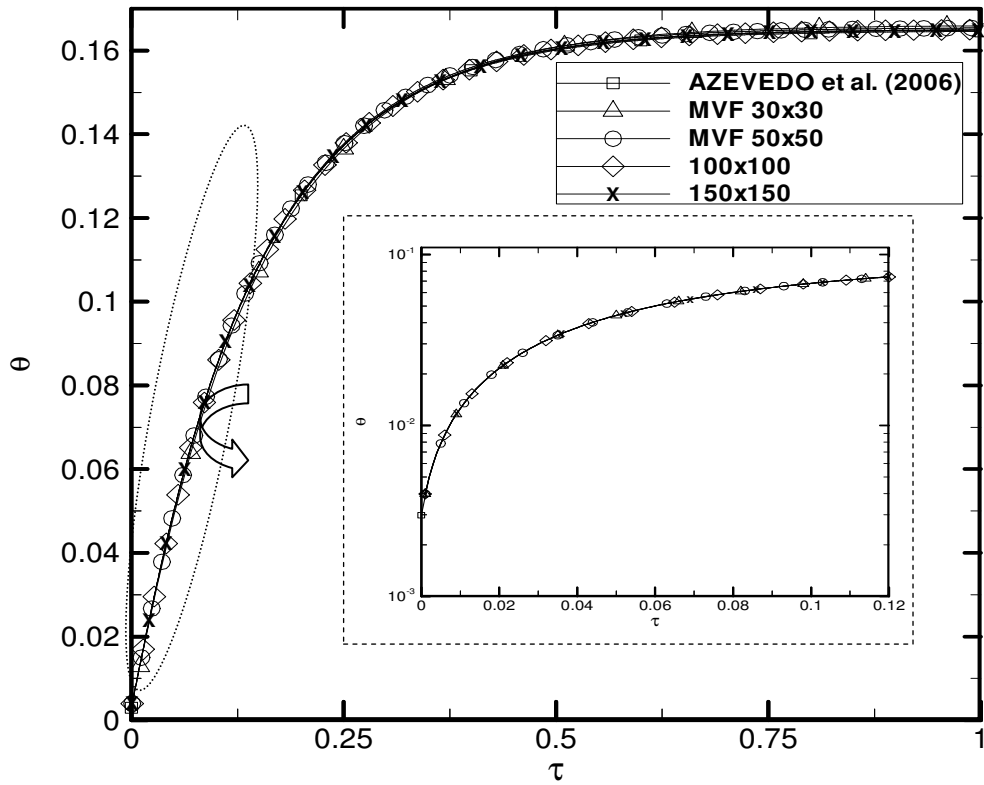


FIG. 5.3 Solução numérica e analítica, $Pf = 0.1$, $Y = 0.5$, $G = 1$ e $\Delta\tau = 0.01$

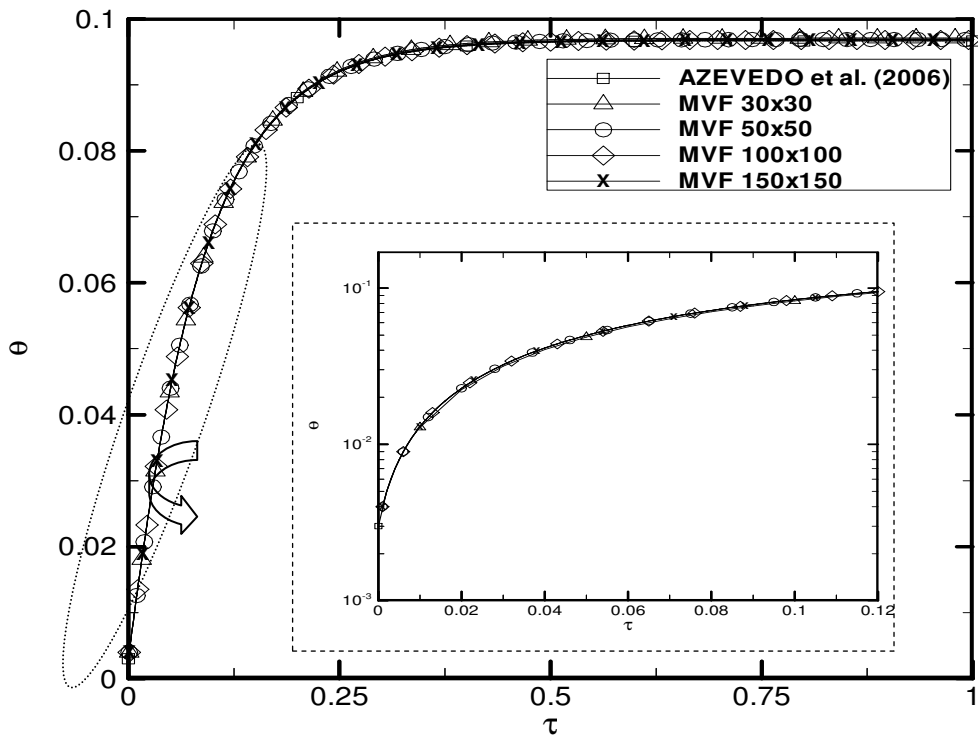


FIG. 5.4 Solução numérica e analítica, $Pf = 5$, $Y = 0.5$, $G = 1$ e $\Delta\tau = 0.001$

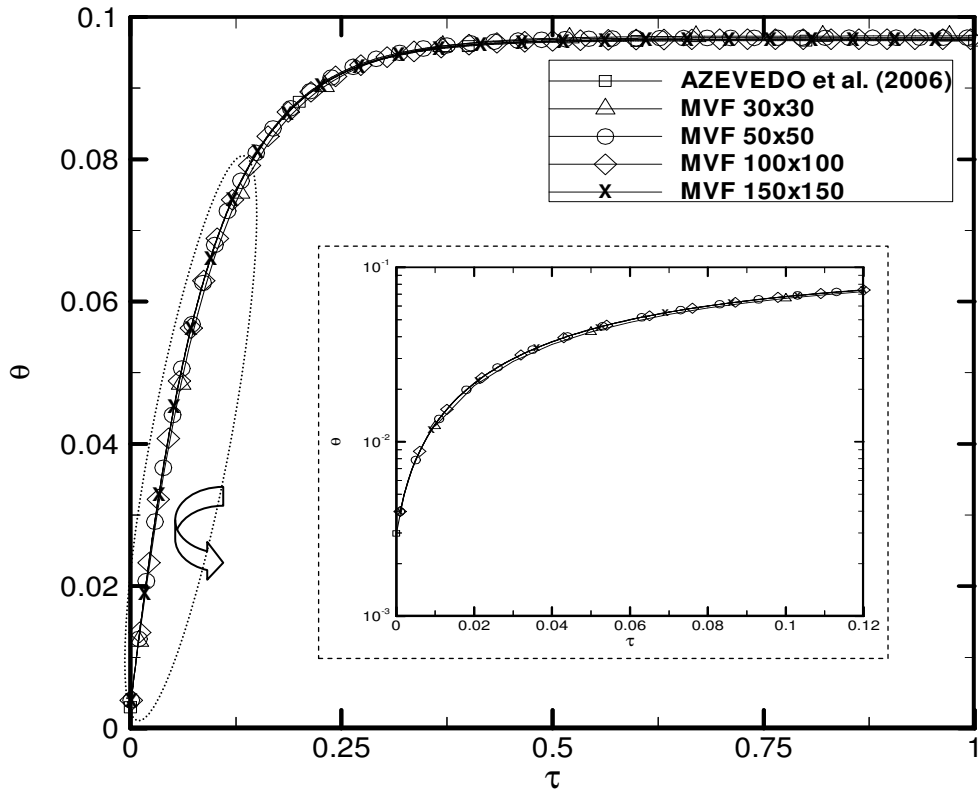


FIG. 5.5 Solução numérica e analítica, $Pf = 5$, $Y = 0.5$, $G = 1$ e $\Delta\tau = 0.01$

TAB. 5.1 Comparações entre solução numérica e analítica para o caso $Pf = 0.1$

$\Delta\tau$	Malha	$\tau = 0.2$		$\tau = 0.5$		$\tau = 0.7$		$\tau = 1$		Tempo (min)
		Num.	Erro %	Num.	Erro %	Num	Erro %	Num.	Erro %	
0.01	30x30	1.2585×10^{-1}	0.33	1.6083×10^{-1}	0.45	1.6475×10^{-1}	0.70	1.6591×10^{-1}	0.81	5.5×10^{-3}
	50x50	1.2579×10^{-1}	0.27	1.6083×10^{-1}	0.45	1.6440×10^{-1}	0.49	1.6539×10^{-1}	0.49	2.2×10^{-2}
	100x100	1.2552×10^{-1}	0.06	1.6043×10^{-1}	0.21	1.6399×10^{-1}	0.24	1.6498×10^{-1}	0.25	0.16
	150x150	1.2549×10^{-1}	0.04	1.6030×10^{-1}	0.12	1.6385×10^{-1}	0.15	1.6485×10^{-1}	0.17	1.5
0.001	30x30	1.2574×10^{-1}	0.24	1.6080×10^{-1}	0.43	1.6475×10^{-1}	0.70	1.6591×10^{-1}	0.81	1.9×10^{-2}
	50x50	1.2565×10^{-1}	0.18	1.6059×10^{-1}	0.30	1.6421×10^{-1}	0.37	1.6536×10^{-1}	0.48	6.6×10^{-2}
	100x100	1.2549×10^{-1}	0.04	1.6027×10^{-1}	0.11	1.6380×10^{-1}	0.12	1.6495×10^{-1}	0.23	1.3
	150x150	1.2545×10^{-1}	0.01	1.5998×10^{-1}	0.10	1.6378×10^{-1}	0.11	1.6481×10^{-1}	0.15	2.7
	An.	1.2544×10^{-1}		1.6010×10^{-1}		1.6360×10^{-1}		1.6457×10^{-1}		

TAB. 5.2 Comparações entre solução numérica e analítica para o caso $Pf = 5$

$\Delta\tau$	Malha	$\tau = 0.2$		$\tau = 0.5$		$\tau = 0.7$		$\tau = 1$		Tempo (min)
		Num.	Erro %	Num.	Erro %	Num	Erro %	Num.	Erro %	
0.01	30x30	8.8374×10^{-2}	0.33	9.7009×10^{-2}	0.57	9.7316×10^{-2}	0.67	9.7338×10^{-2}	0.68	8.3×10^{-3}
	50x50	8.8290×10^{-2}	0.24	9.6842×10^{-2}	0.40	9.7062×10^{-2}	0.41	9.7084×10^{-2}	0.41	4.2×10^{-2}
	100x100	8.8123×10^{-2}	0.05	9.6646×10^{-2}	0.20	9.6865×10^{-2}	0.20	9.6887×10^{-2}	0.21	0.4
	150x150	8.8097×10^{-2}	0.02	9.6579×10^{-2}	0.13	9.6798×10^{-2}	0.14	9.6820×10^{-2}	0.14	1.8
0.001	30x30	8.8300	0.25	9.6894	0.46	9.7305	0.66	9.7337	0.67	1.4×10^{-2}
	50x50	8.8168×10^{-2}	0.10	9.6757×10^{-2}	0.32	9.7051×10^{-2}	0.40	9.7083×10^{-2}	0.41	5.1×10^{-2}
	100x100	8.8105×10^{-2}	0.03	9.6561×10^{-2}	0.11	9.6854×10^{-2}	0.20	9.6886×10^{-2}	0.20	1.5
	150x150	8.8089×10^{-2}	0.01	9.6499×10^{-2}	0.05	9.6787×10^{-2}	0.13	9.6819×10^{-2}	0.13	2.2
	An.	8.8075×10^{-2}		9.6452×10^{-2}		9.6664×10^{-2}		9.6684×10^{-2}		

Os resultados apresentados até o momento mostraram concordância entre os valores analíticos e numéricos para todas as malhas. Considerando um custo computacional inferior a 1 minuto associado a um menor erro relativo entre a solução analítica e a numérica mostrados nas TABs. 5.1 e 5.2, a malha que será adotada nas próximas simulações será 100x100 e o tamanho do passo no tempo será igual a 0.01.

5. 4 PROBLEMA DE SENSIBILIDADE

O Problema de Sensibilidade é necessário para se calcular a quantidade $\Delta\theta$ que aparece na expressão para o passo de procura dado pela EQ. 5.9.

Na dedução do Problema de Sensibilidade considera-se que uma perturbação ΔPf na perfusão sanguínea provoca uma perturbação $\Delta\theta$ na temperatura.

Assim, substituindo a perfusão e a temperatura acrescentados com suas respectivas perturbações nas equações do Problema Direto, tem-se:

$$\frac{\partial^2(\theta + \Delta\theta)}{\partial X^2} + \frac{\partial^2(\theta + \Delta\theta)}{\partial Y^2} + G - (Pf + \Delta Pf)(\theta + \Delta\theta) = \frac{\partial(\theta + \Delta\theta)}{\partial \tau} \quad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < 1 \quad \tau > 0 \quad (5.50)$$

$$\frac{\partial(\theta + \Delta\theta)}{\partial X} = 0 \quad X = 0 \quad \tau > 0 \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial(\theta + \Delta\theta)}{\partial X} = 0 \quad X = 1 \quad \tau > 0 \quad (5.52)$$

$$-\frac{\partial\theta}{\partial Y} + Bi(\theta + \Delta\theta) = Bi\theta_\infty \quad Y = 0 \quad \tau > 0 \quad (5.53)$$

$$(\theta + \Delta\theta) = 0 \quad Y = 1 \quad \tau > 0 \quad (5.54)$$

$$(\theta + \Delta\theta) = \theta_0 \quad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < 1 \quad \tau = 0 \quad (5.55)$$

Subtraindo do Problema (5.50-55), o Problema Direto, dado pelas EQs. 3.15-20, obtém-se o Problema de Sensibilidade.

A discretização deste problema segue o mesmo procedimento realizado no Problema Direto, por meio do Método dos Volumes Finitos. Na implementação do método será utilizada a mesma malha do Problema Direto (malha 100x100).

$$\frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial Y^2} - Pf\Delta\theta - \Delta Pf\theta = \frac{\partial\Delta\theta}{\partial \tau} \quad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < 1 \quad \tau > 0 \quad (5.56)$$

$$\frac{\partial\Delta\theta}{\partial X} = 0 \quad X = 0 \quad \tau > 0 \quad (5.57)$$

$$\frac{\partial\Delta\theta}{\partial X} = 0 \quad X = 1 \quad \tau > 0 \quad (5.58)$$

$$-\frac{\partial\Delta\theta}{\partial Y} + Bi\Delta\theta = 0 \quad Y = 0 \quad \tau > 0 \quad (5.59)$$

$$\Delta\theta = 0 \quad Y = 1 \quad \tau > 0 \quad (5.60)$$

$$\Delta\theta = 0 \qquad 0 < Y < 1 \quad 0 < X < 1 \quad \tau = 0 \qquad (5.61)$$

A solução do Problema de Sensibilidade fornece $\Delta\theta$. Entretanto este problema está acoplado ao problema direto pelo termo $\theta\Delta Pf$. Desta forma, para se resolver o Problema de Sensibilidade, torna-se necessário armazenar todos os valores de temperaturas obtidas no Problema Direto, em todos os instantes de tempo, para sua posterior utilização na solução do Problema de Sensibilidade. Este processo de armazenamento e leitura torna o procedimento iterativo extremamente lento.

5.5 PROBLEMA ADJUNTO

O Problema Adjunto é necessário para o cálculo do gradiente da função objetivo, o qual aparecerá nas EQs. 5.3 e 5.4.

O desenvolvimento do Problema Adjunto inicia-se com a minimização do funcional dado pela EQ. 5.1. No entanto, as estimativas alcançadas devem satisfazer a solução do Problema Direto. Para trabalhar com um problema de minimização com restrições, introduz-se o multiplicador de Lagrange $\lambda(X, Y, \tau)$.

Multiplica-se o operador de Lagrange pela equação principal do problema direto, integra-se no tempo e espaço e adiciona-se ao funcional, definindo desta forma, um funcional estendido ou Lagrangeano como:

$$\bar{S}[Pf(x, y)] = \int_0^{\tau_f} \sum_{i=1}^M [\mu_i - \theta_i]^2 dt + \iiint_{\tau XY} \lambda \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} - Pf\theta + G - \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right] dYdXd\tau \qquad (5.62)$$

O primeiro termo da EQ. 5.62 é uma integral no tempo. Buscando torná-la uma integral no espaço, conforme o segundo termo da equação, utiliza-se o Delta de Dirac δ , onde X_i e Y_i são vetores com a posição dos sensores. Desta forma, pode-se reescrever a EQ. 5.62 como

$$\begin{aligned} \bar{S}[Pf(x, y)] = & \iiint_{\tau xy} \lambda \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} - Pf\theta + G - \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \right] + \\ & + [\mu_i - \theta_i]^2 \delta_x(X - X_i) \delta_y(Y - Y_i) dYdXd\tau \end{aligned} \qquad (5.63)$$

Seguindo o mesmo procedimento adotado no Problema de Sensibilidade, perturba-se o coeficiente de perfusão por uma quantidade ΔPf . Desta forma, tanto a temperatura, quanto o Lagrangeano também serão perturbados por quantidades $\Delta\theta$ e ΔS , respectivamente.

$$\bar{S} + \Delta S = \iiint_{\tau XY} \left\{ \lambda \left[\frac{\partial^2(\theta + \Delta\theta)}{\partial X^2} + \frac{\partial^2(\theta + \Delta\theta)}{\partial Y^2} - (Pf + \Delta Pf)(\theta + \Delta\theta) + G - \frac{\partial(\theta + \Delta\theta)}{\partial \tau} \right] \right. \\ \left. + [\mu_i - \theta_i]^2 \delta_x(X - X_i) \delta_y(Y - Y_i) \right\} dY dX d\tau dY \quad (5.64)$$

ou,

$$\Delta S(Pf) = \iiint_{\tau XY} \left\{ \lambda \left[\frac{\partial^2\theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial Y^2} - Pf\theta + \right. \right. \\ \left. \left. - Pf\Delta f - \Delta Pf\Delta\theta - \Delta Pf\theta + G - \frac{\partial\theta}{\partial \tau} - \frac{\partial\Delta\theta}{\partial \tau} \right] \right. \\ \left. + [\mu_i^2 - \mu_i\theta_i - \mu_i\Delta\theta_i - \mu_i\theta + \theta_i^2 + \theta_i\Delta\theta - \Delta\theta\mu_i + \theta_i\Delta\theta + (\Delta\Delta\theta)] \cdot \right. \\ \left. \cdot \delta_x(X - X_i) \delta_y(Y - Y_i) \right\} dY dX d\tau \quad (5.65)$$

Subtraindo EQ. 5.64. de 5.65 e desprezando os termos de 2ª ordem, tem-se:

$$\Delta S(Pf) = \iiint_{\tau xy} \left\{ \lambda \left[\frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\Delta\theta}{\partial Y^2} - Pf\Delta f - \Delta Pf\theta - \frac{\partial\Delta\theta}{\partial \tau} \right] \right. \\ \left. + 2[\theta_i - \mu_i] \Delta\theta \delta_x(X - X_i) \delta_y(Y - Y_i) \right\} dY dX d\tau \quad (5.66)$$

Integrando por partes a EQ. 5.66, impondo a condição inicial e as condições de contorno do Problema de Sensibilidade, tem-se:

$$\Delta S(Pf) = \iiint_{\tau xy} 2[\theta_i - \mu_i] \Delta\theta \delta_x(X - X_i) \delta_y(Y - Y_i) + \\ + \Delta\theta \left[\frac{\partial^2\lambda}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\lambda}{\partial Y^2} + \frac{\partial\lambda}{\partial \tau} \right] - \lambda(Pf\Delta\theta + \Delta Pf\theta) dY dX d\tau + \\ + \iint_{\tau y} -\Delta\theta \frac{\partial\lambda}{\partial X} \Big|_{X=1} dY d\tau + \iint_{\tau y} \Delta\theta \frac{\partial\lambda}{\partial X} \Big|_{X=0} dY d\tau + \\ - \iint_{xy} \lambda \Delta\theta \Big|_{\tau=\tau_f} dXdY + \iint_{\tau x} \lambda \frac{\partial\Delta\theta}{\partial Y} \Big|_{Y=1} dXd\tau + \iint_{\tau x} \Delta\theta \left(\frac{\partial\lambda}{\partial Y} - \lambda Bi \right) \Big|_{Y=0} dXd\tau \quad (5.67)$$

O Problema Adjunto é obtido fazendo os termos contendo $\Delta\theta$ na EQ. 5.67 serem iguais a zero.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial Y^2} - \lambda Pf + \\ + 2[\theta_i - \mu_i] \delta_x (X - X_i) \delta_y (Y - Y_i) = -\frac{\partial \lambda}{\partial \tau} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} 0 < Y < 1, \\ 0 < X < 1 \\ \tau < \tau_f \end{array} \quad (5.68)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial X} = 0 \quad \begin{array}{l} X = 0 \\ \tau < \tau_f \end{array} \quad (5.69)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial X} = 0 \quad \begin{array}{l} X = 1 \\ \tau < \tau_f \end{array} \quad (5.70)$$

$$-\frac{\partial \lambda}{\partial Y} + Bi\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} Y = 0 \\ \tau < \tau_f \end{array} \quad (5.71)$$

$$\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} Y = 1 \\ \tau < \tau_f \end{array} \quad (5.72)$$

$$\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} 0 < Y < 1, \\ 0 < X < 1, \\ \tau = \tau_f \end{array} \quad (5.73)$$

Como o Problema Adjunto é um problema de condição final, é necessário realizar uma mudança de variável para transformá-lo em um problema de condição inicial. Assim definindo τ^* como: $\tau^* = \tau_f - \tau$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial Y^2} - \lambda Pf + \\ + 2[\theta_i - \mu_i] \delta_x (X - X_i) \delta_y (Y - Y_i) = -\frac{\partial \lambda}{\partial \tau^*} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} 0 < Y < 1 \\ 0 < X < 1 \\ \tau^* > 0 \end{array} \quad (5.74)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial X} = 0 \quad \begin{array}{l} X = 0 \\ \tau^* > 0 \end{array} \quad (5.75)$$

$$\frac{\partial \lambda}{\partial X} = 0 \quad \begin{array}{l} X = 1 \\ \tau^* > 0 \end{array} \quad (5.76)$$

$$-\frac{\partial \lambda}{\partial Y} + Bi\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} Y = 0 \\ \tau^* > 0 \end{array} \quad (5.77)$$

$$\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} Y = 1 \\ \tau^* > 0 \end{array} \quad (5.78)$$

$$\lambda = 0 \quad \begin{array}{l} 0 < Y < 1 \\ 0 < X < 1 \\ \tau^* = 0 \end{array} \quad (5.79)$$

A discretização deste problema segue o mesmo procedimento da discretização realizada no Problema Direto, por meio do Método dos Volumes Finitos, com a mesma malha do Problema Direto (100x100).

5.6 EQUAÇÃO GRADIENTE

A equação gradiente é derivada da etapa em que os termos contendo $\Delta\theta$ da EQ. 5.67 são igualados a zero.

Assim, o seguinte termo sobra no processo de obtenção das EQs. 5.68-5.73 a partir da EQ. 5.67

$$\Delta S(\text{Pf}) = \iiint_{\tau XY} (-\lambda\theta\Delta\text{Pf})dYdXd\tau \quad (5.80)$$

Admitindo que a função a ser estimada pertença ao espaço de Hilbert, onde o quadrado das funções é integrável no espaço e no tempo (OZISIK e ORLANDE, 2000), pode-se escrever, para a função constante:

$$\Delta S(\text{Pf}) = \nabla S(\text{Pf})\Delta\text{Pf} \quad (5.81)$$

Desta forma, comparando-se as EQs. 5.80 e 5.81, tem-se a equação gradiente.

$$\nabla S(\text{Pf}) = \iiint_{\tau XY} (-\lambda\theta)dYdXd\tau \quad (5.82)$$

De forma análoga, pode-se escrever, para a função unidimensional,

$$\Delta S[\text{Pf}(X)] = \int_X \nabla S[\text{Pf}(X)]\Delta\text{Pf}dX \quad (5.83)$$

Assim, comparando-se as EQs. 5.80 e 5.83, obtém-se a equação gradiente.

$$\nabla S[\text{Pf}(X)] = \iint_{\tau Y} (-\lambda\theta)dYd\tau \quad (5.84)$$

Baseando-se no mesmo procedimento utilizado acima, a variação do funcional para a função bidimensional pode ser escrita da forma,

$$\Delta S[\text{Pf}(X, Y)] = \iint_{XY} \nabla S[\text{Pf}(X, Y)]\Delta\text{Pf}dYdX \quad (5.85)$$

Portanto, comparando-se as EQs. 5.80 e 5.85, tem-se a equação gradiente.

$$\nabla S[\text{Pf}(X, Y)] = \int_{\tau} (-\lambda\theta) d\tau \quad (5.86)$$

5.7 RESULTADOS PARA A ESTIMATIVA DE FUNÇÃO DA PERFUSÃO SANGUÍNEA

A fim de avaliar o grau de precisão nas estimativas, nesta seção são apresentados os resultados para as estimativas da perfusão sanguínea na forma funcional constante, triangular, quadrada e degrau, conforme a exposição do tecido ao tratamento por hipertermia.

Nas simulações numéricas foram estudados dois casos, onde as medidas simuladas foram obtidas pela solução do Problema Direto. Na primeira simulação, os sensores foram distribuídos em todos os pontos da malha e, no segundo, os sensores foram posicionados em $Y = 0.9$, equivalente a 3 mm abaixo da superfície do tecido. Vale salientar que o primeiro não representa nenhuma situação real, porém auxilia na identificação de um possível erro na dedução do Problema Adjunto ou na implementação do Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto. As medições das temperaturas simuladas foram realizadas em 100 instantes de tempo, uma a cada 75 segundos. Considerou-se o tempo total do experimento de 2 h 43 min 37 s, o qual está associado ao coeficiente de perfusão adimensional equivalente a 5, conforme visto na TAB. 4.1. Foi adotado este valor para Pf, devido a sua representatividade em uma situação real.

É importante destacar que nas próximas simulações, para contornar os aumentos repentinos do funcional, o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto é reiniciado, usando a direção de busca do Método Steepest Descent. Em outras palavras, o coeficiente de conjugação é zerado, por conseguinte, a direção de descida é fornecida pelo gradiente do funcional. Assim, a estimativa inicial passa a ser o valor da perfusão na posição do domínio computacional onde houve o aumento da função objetivo.

A seguir têm-se as formas funcionais estudadas para a perfusão:

Forma Constante

$$\text{Pf} = 5 \quad 0 \leq X \leq 1 \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (5.87)$$

Forma Senoidal (Unidimensional)

$$\text{Pf}(X) = \text{sen}(\pi X) \quad 0 \leq X \leq 1 \quad 0 \leq Y \leq 1 \quad \text{e} \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (5.88)$$

Forma Triangular (Unidimensional)

$$\text{Pf}(X) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.2 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ (10/3)X - 2/3 & 0.2 \leq X \leq 0.5 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ -(10/3)X + (8/3) & 0.5 < X \leq 0.8 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.8 < X \leq 1 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.89)$$

Forma Quadrada (Unidimensional)

$$\text{Pf}(X) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.3 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 1 & 0.3 \leq X \leq 0.7 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.7 < X \leq 1 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.90)$$

Forma Degrau (Unidimensional)

$$\text{Pf}(X) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.5 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 1 & 0.5 \leq X < 1 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.91)$$

Forma Quadrada (Bidimensional)

$$\text{Pf}(X, Y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.3 & 0 \leq Y < 0.3 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 1 & 0.3 \leq X \leq 0.7 & 0.3 \leq Y \leq 0.7 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.7 < X \leq 1 & 0.7 < Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.92)$$

5.7.1 ESTIMATIVA DA PERFUSÃO SANGUÍNEA NA FORMA FUNCIONAL CONSTANTE

A perfusão constante a ser estimada é $\text{Pf} = 5$, a qual corresponde a um tecido adiposo (BRIX et al., 2002). O tecido foi exposto ao tratamento, assumindo-se $G = 2.48$. As estimativas iniciais avaliadas para a perfusão sanguínea foram 4.5 e 10. Nas FIGs. 5.6 e 5.7, os sensores foram distribuídos em todos os pontos da malha e, nas FIGs. 5.8 e 5.9, os sensores foram posicionados em $Y = 0.9$, equivalente a 3 mm abaixo da superfície do tecido. A FIG. 5.7 é um aumento da FIG. 5.6 da mesma forma que a FIG. 5.9 é um aumento da FIG. 5.8.

As FIGs. 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9 ilustram as estimativas para diferentes malhas com uma tolerância de 10^{-6} . Percebe-se que as estimativas com sensores em todos os pontos da região estudada recuperaram a função exata. Além disso, a inserção de sensores próximos da camada mais externa do tecido também fornece valores numéricos com precisão significativa. Nota-se ainda, que o uso da malha refinada faz com que existam mais informações do problema, uma vez que o número de sensores aumenta. Assim, refinando a malha, a estimativa melhorou.

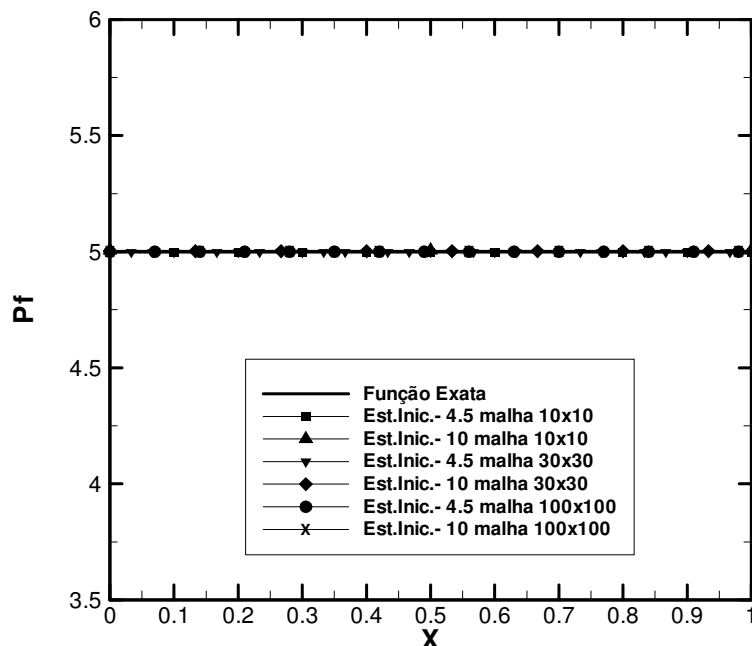


FIG. 5.6 Estimativa da perfusão com sensores em todos os pontos, $P_f = 5$ e $G = 2.48$

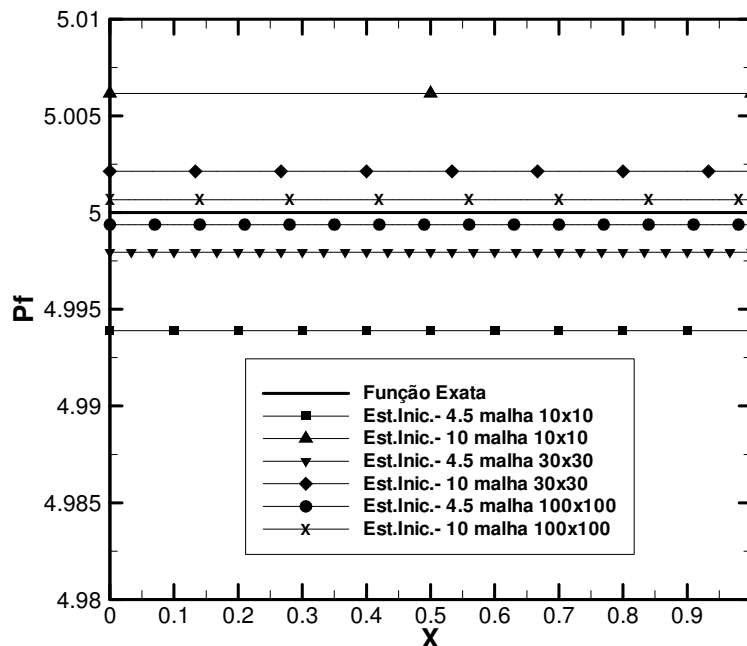


FIG. 5.7 Estimativa ampliada da perfusão com sensores em todos os pontos, $P_f = 5$ e $G = 2.48$ (detalhe)

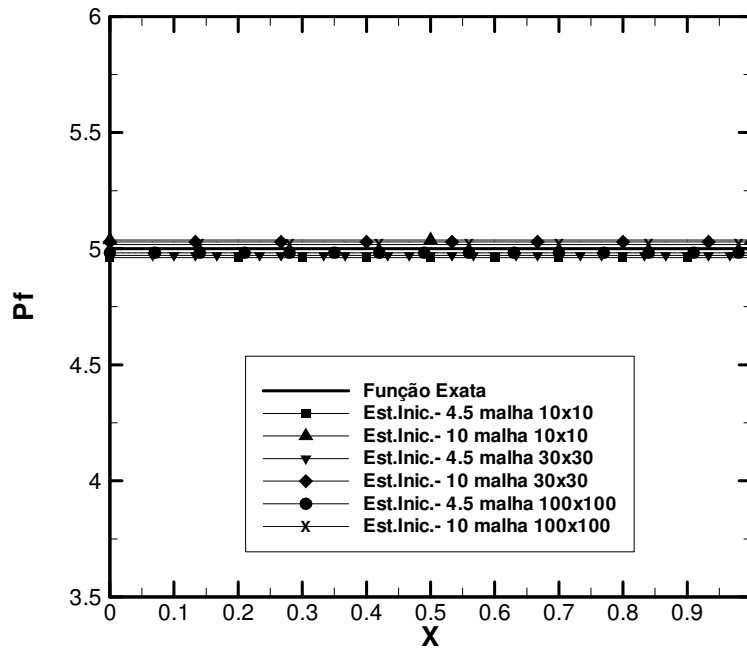


FIG. 5.8 Estimativa da perfusão com sensores em $Y = 0.9$, $Pf = 5$ e $G = 2.48$

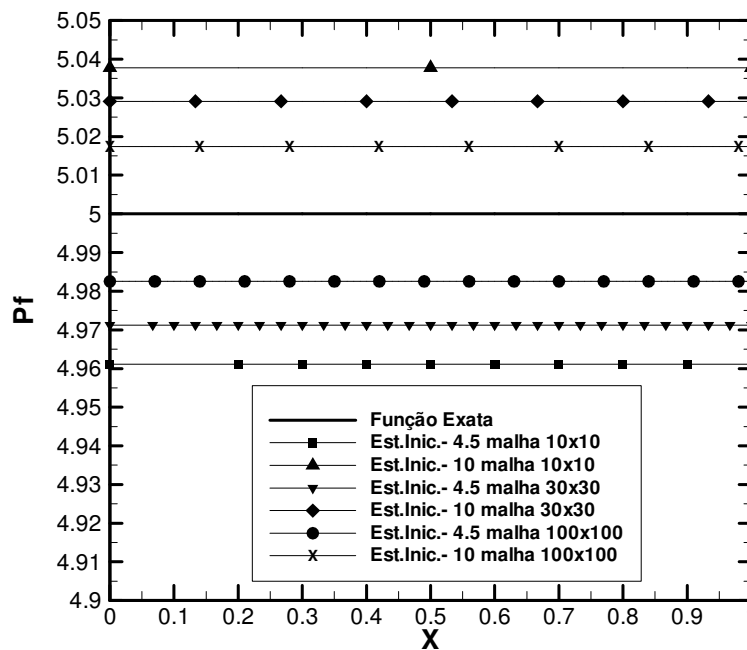


FIG. 5.9 Estimativa ampliada da perfusão com sensores em $Y = 0.9$, $Pf = 5$ e $G = 2.48$ (detalhe)

Tendo em vista os resultados anteriores, propõe-se um estudo mais detalhado das estimativas alcançadas. Para examinar a proximidade das funções exatas com suas respectivas funções estimadas será utilizado o erro RMS (Root Mean Square), dado pela seguinte equação:

$$\text{Erro} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mu_i - \theta_i)^2} \quad (5.93)$$

onde,

N – número de medidas tomadas

μ_i – Temperatura medida

θ_i – Temperatura estimada

As TABs. 5.3 e 5.4 mostram o erro RMS entre os valores da função estimada e os da função exata. A malha foi refinada até alcançar convergência do Problema Direto, que se deu com o terceiro refinamento (malha com 10000 volumes). Para ambas estimativas iniciais o erro RMS foi de 6×10^{-3} , enquanto o erro RMS mínimo foi de 6×10^{-4} . Nota-se ainda, que não há influência significativa da estimativa inicial, visto que os valores para os erros RMS são iguais.

É importante citar em termos de custos computacionais, que utilizando um computador com processador Intel Pentium IV 3GHz e 2Gb de memória RAM, o tempo de processamento da malha 100x100 é muito superior ao tempo utilizado pelas outras malhas.

TAB. 5.3 Erro relativo na estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em todos os pontos e estimativa inicial 4.5

Pf = 5, G = 2.48 e $\sigma = 0$				
Malha	Estimativa inicial 4.5			Tempo computacional
	Estimativa	Erro RMS	Iterações	
10x10	4.9938	0.0061	56	6.06×10^{-2} min
30x30	4.9979	0.0020	69	0.8 min
100x100	4.9993	0.0006	83	34 min

TAB. 5.4 Erro relativo na estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em todos os pontos e estimativa inicial 10

Pf = 5, G = 2.48 e $\sigma = 0$				
Malha	Estimativa inicial 10			Tempo computacional
	Estimativa	Erro RMS	Iterações	
10x10	5.0061	0.0061	79	8.18×10^{-2} min
30x30	5.0021	0.0020	92	1.1 min
100x100	5.0006	0.0006	105	40 min

As TABs. 5.5 e 5.6 listam o erro RMS na estimativa para os sensores localizados próximos à superfície do tecido. Nota-se que a estimativa inicial não influenciou a estimativa, visto que o erro RMS foi o mesmo para ambas.

Equiparando aos resultados das TABs. 5.3 e 5.4 nota-se uma pequena discrepância nas estimativas alcançadas, conforme esperado. Tal fato decorre do efeito da quantidade de sensores utilizados. No entanto, dentre as estimativas obtidas com sensores localizados próximo à superfície, a melhor precisão obtida possui erro RMS de 7×10^{-4} .

TAB. 5.5 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em $Y = 0.9$ e estimativa inicial 4.5

Pf = 5, G = 2.48 e $\sigma = 0$				
Malha	Estimativa inicial 4.5			Tempo computacional
	Estimativa	Erro RMS	Iterações	
10x10	4.9610	0.0062	50	0.2 min
30x30	4.9712	0.0021	55	1.1 min
100x100	4.9825	0.0007	64	40 min

TAB. 5.6 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, sensores em $Y = 0.9$ e estimativa inicial 10

Pf = 5, G = 2.48 e $\sigma = 0$				
Malha	Estimativa inicial 10			Tempo computacional
	Estimativa	Erro	Iterações	
10x10	5.0377	0.0062	88	0.3 min
30x30	5.0291	0.0021	91	1.8 min
100x100	5.0173	0.0007	101	55 min

Nas FIGs. 5.10 e 5.11 encontram-se a evolução do funcional objetivo (em escala logarítmica) em relação ao número de iterações, com suas respectivas malhas e estimativas iniciais adotadas. Pode ser observado, que conforme se refina a malha o valor inicial da função objetivo aumenta. Isto ocorre porque aumentar a quantidade de volumes equivale aumentar o número de sensores. Assim, pela EQ. 5.1, com uma quantidade maior de sensores, o acúmulo de erro no cálculo da função objetivo será maior. Logo, será necessária a realização de um número maior de iterações para que a função objetivo alcance a minimização desejada.

Ainda analisando as figuras, os valores iniciais dos funcionais apresentados na FIG. 5.11 são, em geral, menores que os da FIG. 5.10, pois, na FIG. 5.10 os resultados apresentados utilizaram uma quantidade maior de sensores do que na FIG. 5.11. Contudo, em ambas as

situações o funcional atingiu a precisão desejada. Tal fato pode ser elucidado por meio das TABs. 5.3, 5.4, 5.5 e 5.6, onde nota-se que os erros RMS são, praticamente, iguais para essas duas configurações de sensores

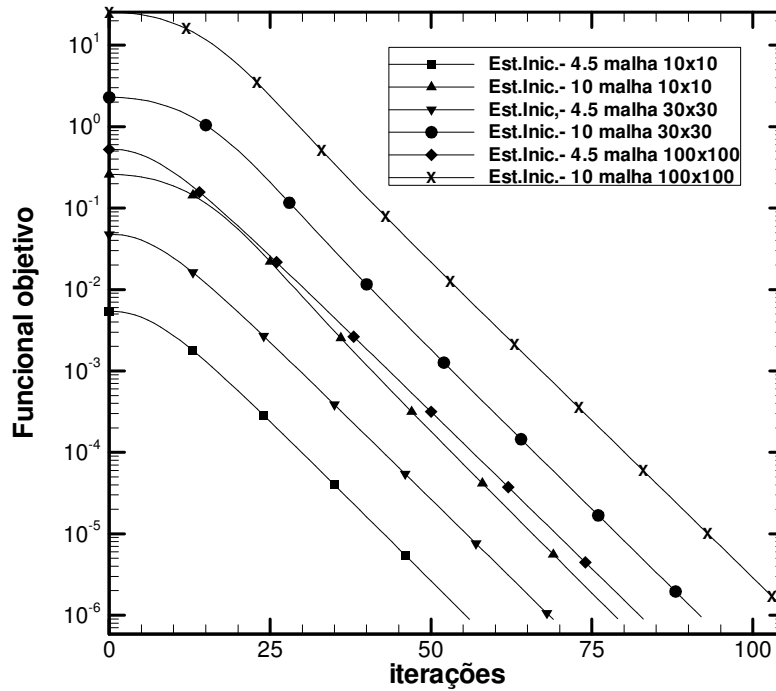


FIG. 5.10 Evolução do funcional objetivo com sensores em todos os pontos, para a estimativa da perfusão com variação constante

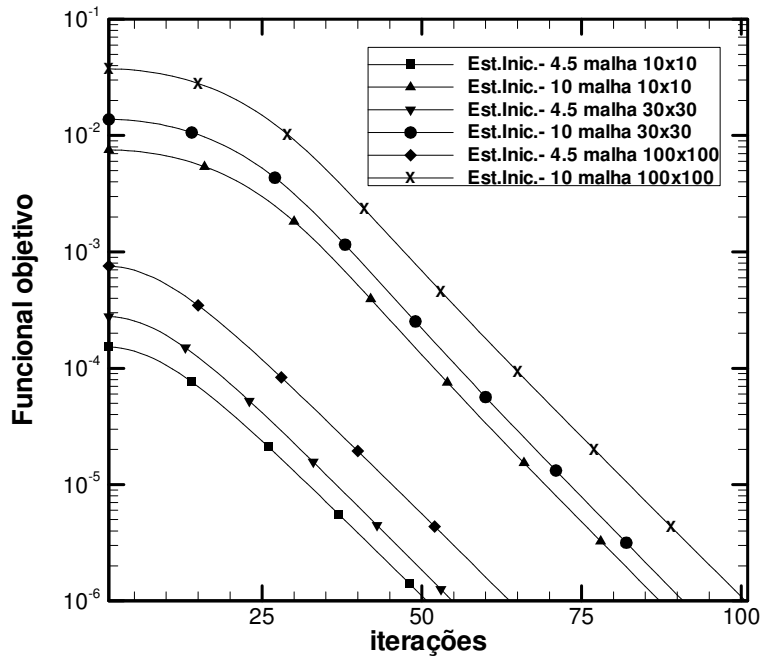


FIG. 5.11 Evolução do funcional objetivo com sensores em $Y = 0.9$, para a estimativa da perfusão com variação constante

5.7.2 ESTIMATIVA DA PERFUSÃO SANGUÍNEA COM FORMA FUNCIONAL UNIDIMENSIONAL

Nesta seção, encontra-se a estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional unidimensional. Inicialmente avaliou-se a forma senoidal para a perfusão sanguínea. A tolerância do funcional adotada foi 10^{-7} em todas as malhas, com um número máximo de iterações limitado em 200. Fez-se um refinamento da malha utilizada para estudar a influência da mesma nas estimativas. Portanto, o número de medidas simuladas varia conforme a quantidade de volumes em cada malha. No entanto, para todas as malhas a medições foram feitas em 100 instantes de tempo, do período total do experimento. Adotaram-se as mesmas estimativas iniciais empregadas nas simulações para a perfusão constante.

As FIGs. 5.12 e 5.13 permitem visualizar que as estimativas estão qualitativamente boas, pois a amplitude da função seno foi razoavelmente capturada. Entretanto, os extremos e o valor base da referida função não foram bem capturados, uma vez que a tolerância adotada não foi adequada para a recuperação dos mesmos. Analisando as duas simulações, observa-se na FIG. 5.12, que o refinamento da malha não teve muita influência na função exata, visto que, as estimativas praticamente coincidem. Nota-se na FIG. 5.13 há pequenas divergências em relação às curvas estimadas.

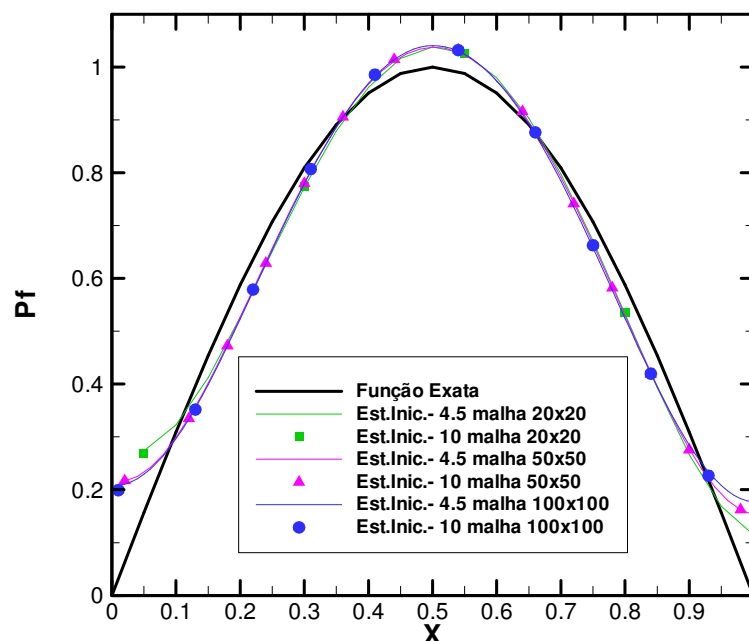


FIG. 5.12 Estimativa da perfusão com forma senoidal e sensores em todos os pontos

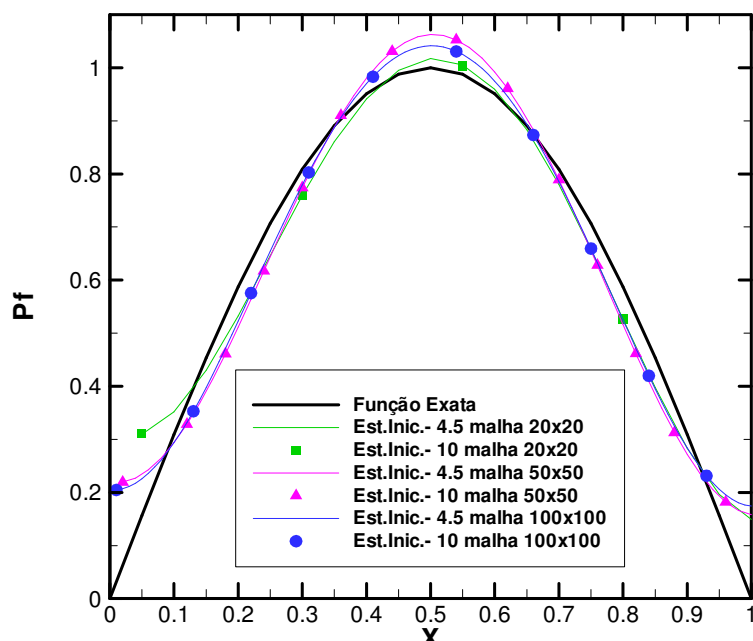


FIG. 5.13 Estimativa da perfusão com forma senoidal e sensores localizados em $Y = 0.9$

As TAB. 5.7 e 5.8 exibem os erros RMS na estimativa da função com variação senoidal. Os resultados revelam, de uma maneira geral, a diminuição dos erros RMS à medida que a malha é refinada, independentemente da quantidade de sensores. No entanto, uma malha mais refinada exige a realização de mais iterações para minimizar o funcional, visto que o aumento da quantidade de volumes gera um aumento no valor inicial do funcional objetivo.

Nota-se que com sensores posicionados próximos a superfície do tecido, é possível obter uma estimativa razoável, do coeficiente de perfusão. Observa-se também a pouca relevância do valor inicial para a estimativa em relação à estimativa final, conforme pode ser visto nas TABs. 5.7 e 5.8.

TAB. 5.7 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal com estimativa inicial 4.5

$P_f = \text{sen}(\pi x)$, $G = 2.48$ e $\text{Tol.} = 10^{-7}$				
	Malha	Estimativa inicial 4.5 $\sigma = 0$		Tempo computacional
		Erro RMS	Iterações	
Sensores em todos os pontos	20x20	0.0582	200	1 min
	50x50	0.0532	200	12 min
	100x100	0.0517	200	1h36 min
Sensores próximo a sup. $Y = 0.9$	20x20	0.0598	130	1 min
	50x50	0.0563	141	8 min
	100x100	0.0547	156	1h18 min

TAB. 5.8 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal com estimativa inicial 10

Pf = sen(πx), G = 2.48 e Tol. = 10^{-7}				
	Malha	Estimativa inicial 10		Tempo computacional
		$\sigma = 0$		
		Erro RMS	Iterações	
Sensores em todos os pontos	20x20	0.0614	200	1 min
	50x50	0.0556	200	13 min
	100x100	0.0529	200	1h37 min
Sensores próximo a sup. Y = 0.9	20x20	0.0615	133	1 min
	50x50	0.0607	145	11 min
	100x100	0.0549	158	1h20 min

As FIGs. 5.14 e 5.15 ilustram a minimização do funcional em relação ao número de iterações realizadas. O comportamento do funcional objetivo é mantido comparado a estimativa da perfusão com forma constante, ou seja, quanto maior o número de volumes no domínio, maior é o valor inicial do funcional objetivo.

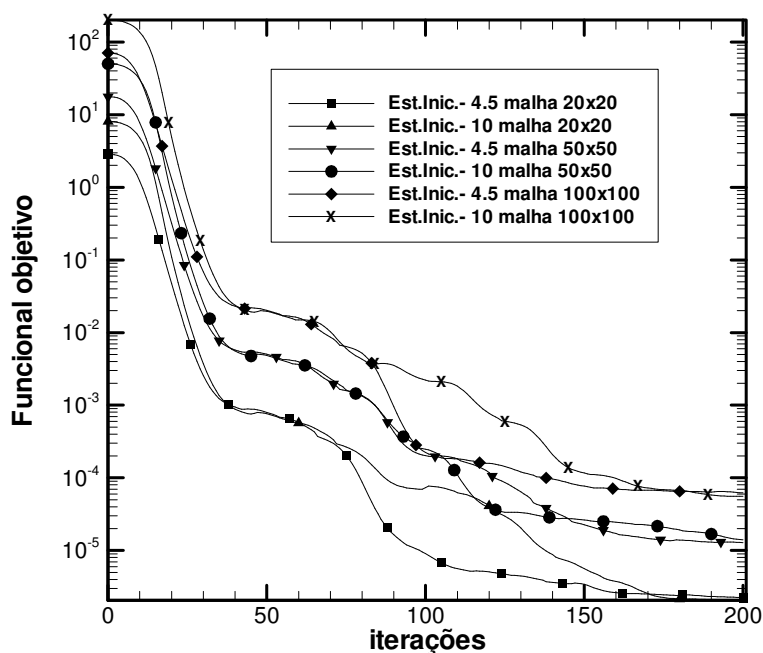


FIG. 5.14 Evolução do funcional objetivo com sensores em todos os pontos, para a estimativa da perfusão com variação senoidal

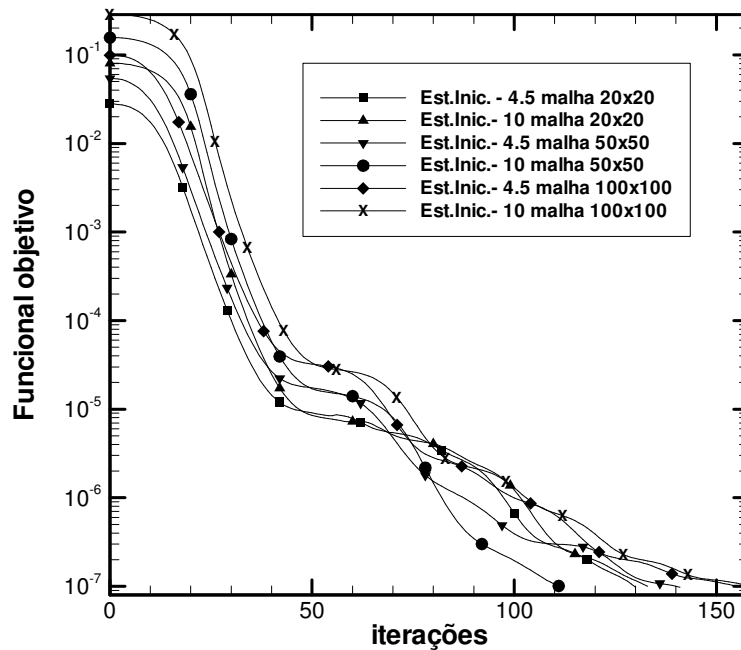


FIG. 5.15 Evolução do funcional objetivo com sensores em $Y = 0.9$, para a estimativa da perfusão com variação senoidal

Uma vez realizada esta análise preliminar da influência da malha e da estimativa inicial na recuperação de uma função senoidal e de uma função constante, partiu-se para a estimativa de formas funcionais mais complexas, como por exemplo, a variação triangular e quadrada. Estas funções foram escolhidas por serem matematicamente difíceis de serem estimadas, possuindo descontinuidades na própria função (quadrada) e na sua primeira derivada (triangular). Também foi estudado o caso da variação do coeficiente de perfusão na forma de uma função degrau, de forma a se analisar uma função descontínua que não possui simetria espacial.

A seguir, têm-se as estimativas obtidas para a perfusão sanguínea com variação senoidal, triangular, quadrada e degrau. Em virtude da convergência do Problema Direto, foi adotada uma malha com 10000 volumes. Além disso, procurou-se representar uma situação ideal, onde os sensores sejam introduzidos de forma menos intrusiva possível, posicionou-se 100 sensores em $Y = 0.9$, que corresponde a 3 mm abaixo da superfície do tecido. Nestas simulações não foram inseridos ruídos nas temperaturas medidas e o valor inicial para a estimativa foi igual a 4.5. Não houve necessidade de realizar outras estimativas iniciais, pois diante dos resultados já apresentados anteriormente não existiu diferença significativa nas estimativas para quaisquer valores iniciais. Em busca de uma melhor precisão nos resultados, foi empregada no critério de parada uma tolerância de 10^{-11} . Contudo, devido ao esforço

computacional que o método exige, foram fixadas 2000 iterações, caso a tolerância não fosse alcançada.

As FIGs. 5.16 e 5.17 ilustram a estimativa da perfusão com variação senoidal e a evolução do funcional objetivo, respectivamente. Como esperado, a estimativa apresenta uma qualidade excelente, com um erro RMS de 0.0062. Tal fato reside no comportamento da função seno, especificamente, devido à diferenciabilidade da mesma no domínio estudado. Vale destacar que este resultado difere da curva (malha 100x100 e estimativa inicial 4.5) apresentada na FIG. 5.13, em relação à tolerância empregada. Na FIG. 5.13 utilizou-se 10^{-7} , enquanto para esta estimativa adotou-se 10^{-11} . Tal tolerância mostrou-se adequada para a estimativa, visto que foi possível capturar os extremos e o valor de base da função seno.

As FIGs. 5.18 e 5.19 mostram a estimativa da perfusão com variação triangular e a evolução do funcional objetivo, respectivamente. A estimativa alcançada possui ótima precisão, com um erro RMS de 0.0081. No entanto, equiparada à estimativa da função senoidal nota-se uma pequena dificuldade em recuperar a função triangular. Isto acontece porque a derivada é descontínua em alguns pontos da função triangular. Entretanto, o funcional objetivo para a estimativa da função triangular apresentou comportamento similar ao funcional para a função seno, apresentado na FIG. 35.

As FIGs. 5.20 e 5.21 apresentam a estimativa da perfusão com variação quadrada e a evolução do funcional objetivo, respectivamente. Convém ressaltar que esta situação é um caso mais difícil para a estimativa, em consequência dos pontos de descontinuidade da função quadrada. Nestes, por sua vez, residem as maiores discrepâncias em relação à função exata. No entanto, foi possível capturar os patamares superior e inferior, que poderiam corresponder a uma mudança brusca de perfusão entre um tecido sadio e a região onde se encontra o tumor. O mesmo ocorre com a estimativa da função degrau exposta na FIG. 5.22. Isto garante que o método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto funciona mesmo para uma função sem simetria.

A TAB. 5.9 apresenta os erros RMS para os casos com funcional senoidal, triangular, quadrada e degrau. Com base nestes dados, pode-se observar que os maiores erros foram obtidos na estimativa da função quadrada e degrau, como previsto. Nota-se ainda que ambas as funções não conseguiram minimizar o funcional objetivo dentro do critério de tolerância especificado, alcançando assim o máximo de iterações pré-estabelecidas (2000 iterações). Como decurso disso, o custo computacional foi maior. Além disso, verifica-se que o erro RMS foi maior para a função degrau do que para a função quadrada. De fato, como pode ser

visto nas FIGs. 5.20 e 5.22, a função degrau não apresenta simetria como a função quadrada, o que dificulta a recuperação da função.

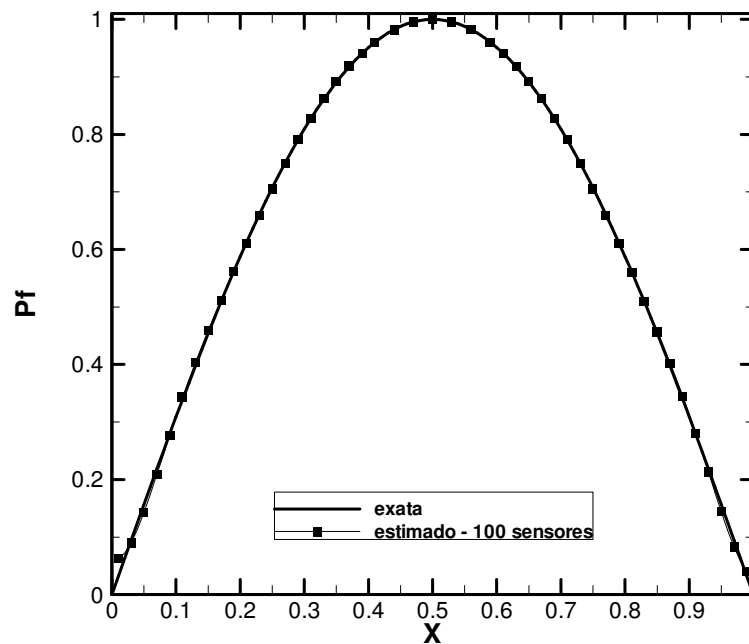


FIG. 5.16 Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

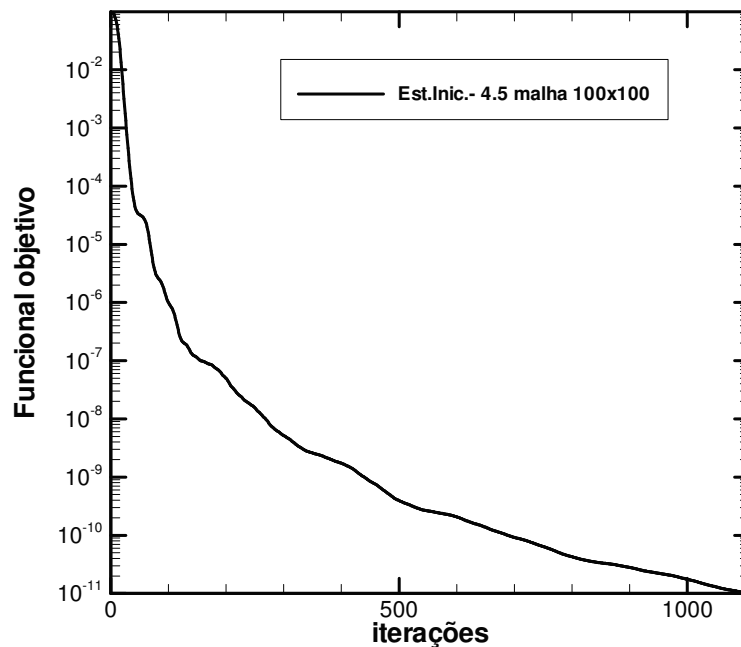


FIG. 5.17 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal utilizando malha 100×100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

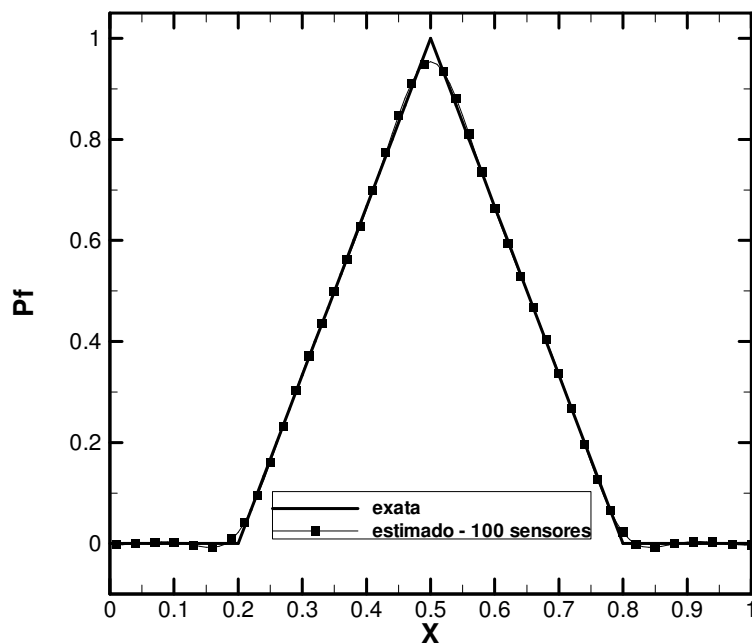


FIG. 5.18 Estimativa da perfusão com forma funcional triangular utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

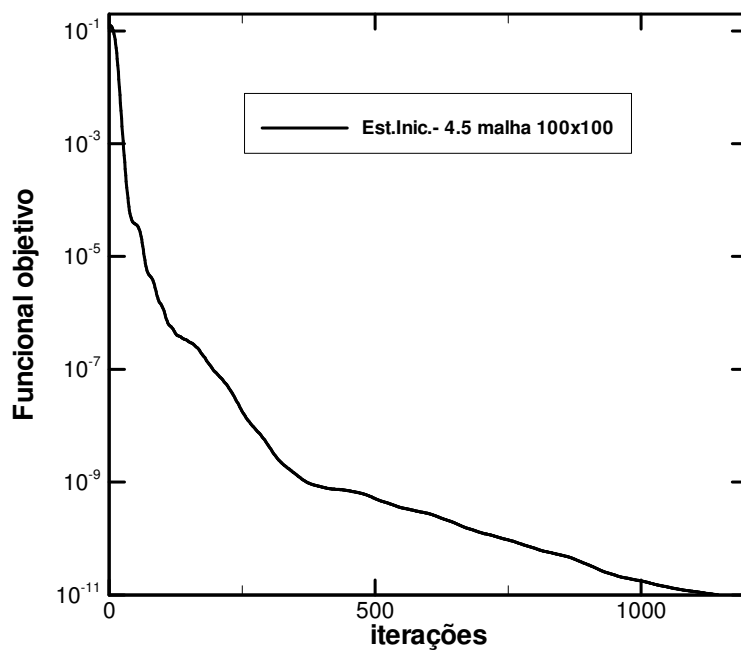


FIG. 5.19 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

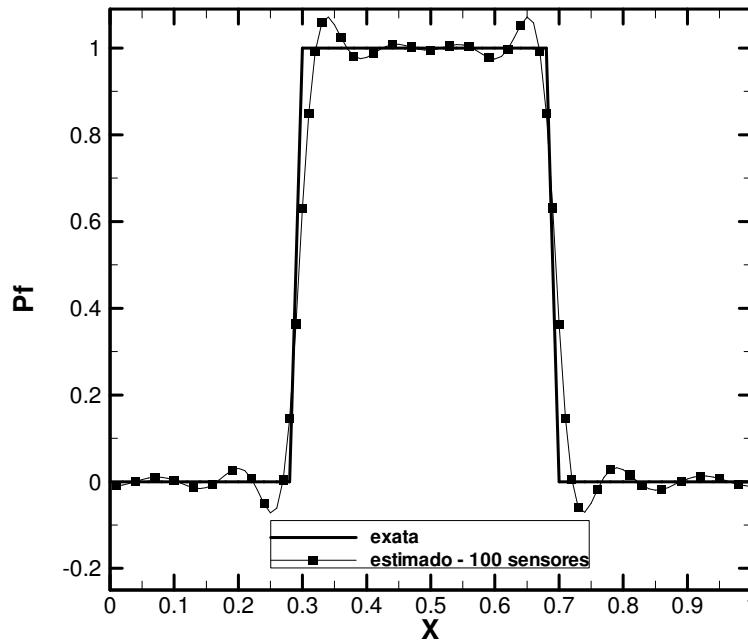


FIG. 5.20 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

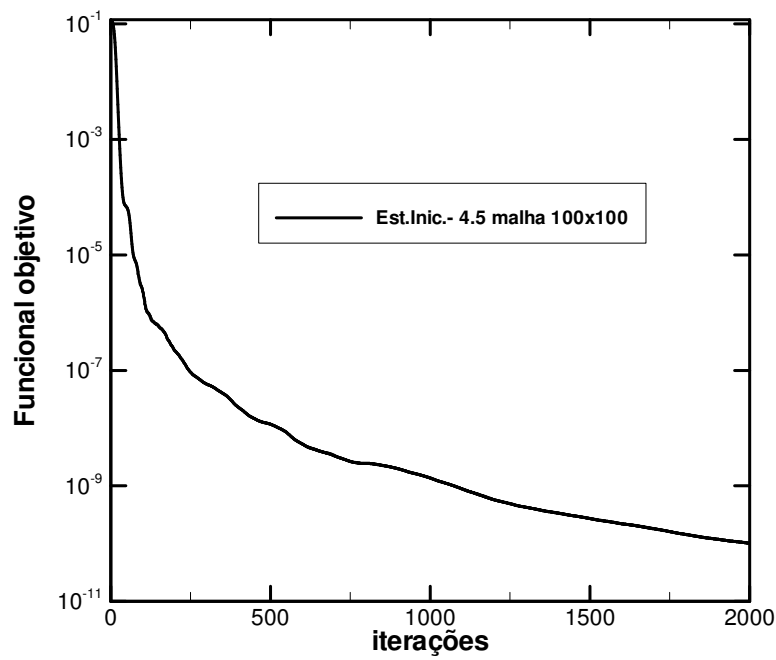


FIG. 5.21 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

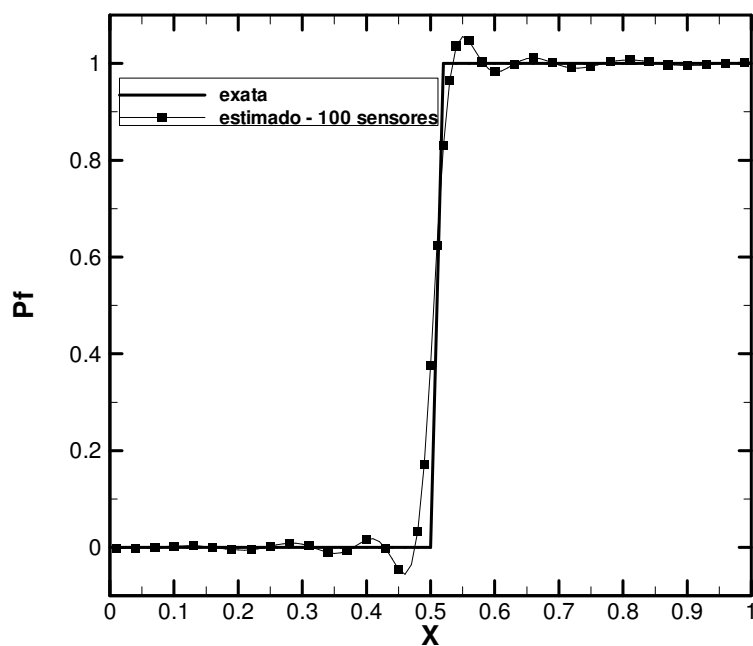


FIG. 5.22 Estimativa da perfusão com forma funcional degrau utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

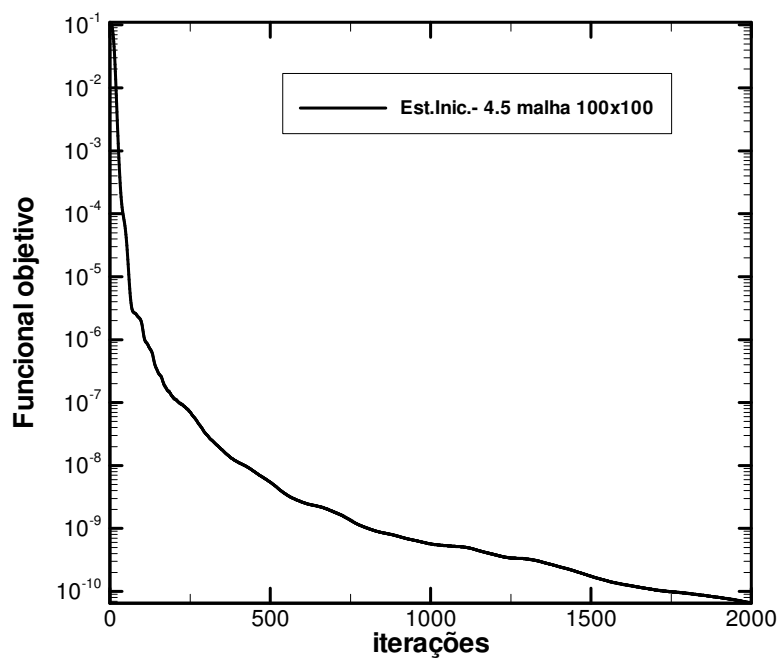


FIG. 5.23 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau utilizando malha 100x100 e sensores localizados em $Y = 0.9$

TAB. 5.9 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal, triangular, quadrada, degrau, utilizando malha 100x100 e 100 sensores

Malha 100x100, G = 2.48 e Tol. = 10⁻¹¹				
Funções	Estimativa inicial 4.5			Tempo computacional
	$\sigma = 0$			
	Sensores Y = 0.9	Erro RMS	Iterações	
Senoidal	100	0.0062	1108	9h 10 min
Triangular		0.0081	1145	9h 46min
Quadrada		0.0827	2000	16h 16 min
Degrau		0.0602	2000	16h 20 min

Em virtude da imprecisão dos sensores, as temperaturas medidas podem conter erros que são capazes de provocar discrepâncias nas estimativas. Portanto, a fim de avaliar a influência de ruídos nas medidas simuladas, nas próximas simulações serão introduzidos erros nas temperaturas medidas, obtidas por meio da solução do Problema Direto.

Mediante os resultados já apresentados para estimativa da perfusão com forma funcional unidimensional, mostrou-se que a variação do valor inicial para a perfusão não acarretou em mudanças significativas na estimativa da função. Portanto, adotou-se apenas a estimativa inicial 4.5. Os sensores térmicos foram instalados a 3 mm da superfície do tecido e monitoram a temperatura com uma frequência de 0.01 Hz.

Os sensores foram distribuídos de duas maneiras. No primeiro caso, utilizaram 100 sensores equidistantes (0.3 mm). Para a segunda situação, foram usados apenas 50 sensores a uma distância de 0.6 mm um do outro.

Consideraram-se diferentes níveis de desvios padrão: 1 e 5% do valor da temperatura local. Tais ruídos são atribuídos da seguinte maneira: $\theta_{med} = \theta_{exa} + \epsilon\sigma$, onde θ_{med} é a medida da temperatura local adimensional, θ_{exa} é a medida simulada por meio da solução do problema direto, ϵ é a variável aleatória contínua distribuída normalmente com média zero tal que $-2.576 < \epsilon < 2.576$ e $\sigma = \delta \theta_{exa}$ é o desvio padrão, com δ igual a 0.01 e 0.05. O processo iterativo é interrompido com o número máximo de 2000 iterações. As estimativas sem ruído serão rerepresentadas, onde como critério de parada é adotada uma tolerância de 10^{-11} , para que seja possível a comparação com as estimativas com ruídos.

A FIG. 5.24 mostra, aparentemente, que o uso de 100 sensores térmicos para as medidas simuladas com 5% de ruído, não forneceu informações suficientes para a estimativa da função constante, equiparado às estimativas sem ruído. Tal análise é confirmada pela TAB. 5.10, onde a mesma configuração apresentou o maior erro RMS, equivalente a 0.0682. Certifica-se

deste fato, pela FIG. 5.25, em que o funcional associado a curva mencionada atingiu o maior valor, dentre os demais.

Além disso, na FIG. 5.24, a estimativa com erros experimentais de 1% não apresentou influência relevante na quantidade de sensores. De fato, por meio da TAB. 5.10, observa-se uma sutil discrepância entre os erros RMS. Por outro lado, as estimativas sem ruídos nas medidas simuladas foram satisfatórias e o funcional minimizado, conforme visto na FIG. 5.25.

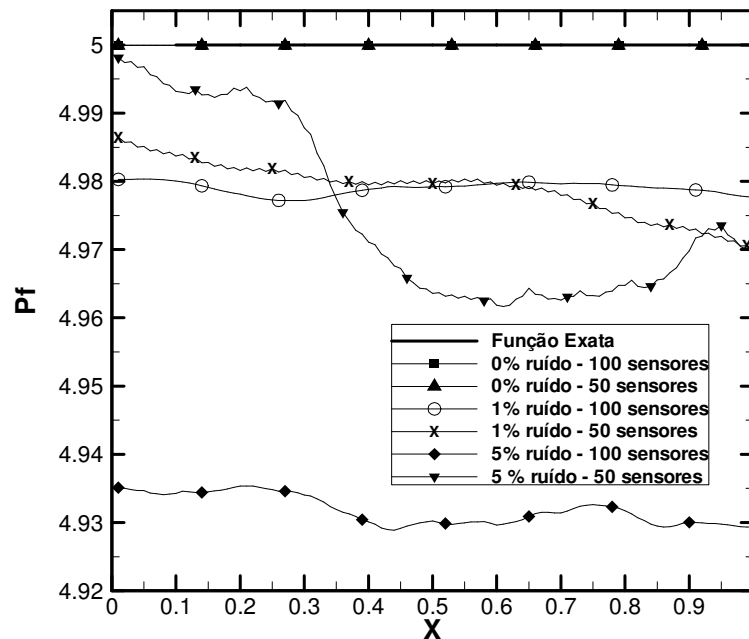


FIG. 5.24 Estimativa da perfusão com forma funcional constante, utilizando uma malha 100x100 e com 100 e 50 sensores

A FIG. 5.25 apresenta a evolução da função objetivo ao longo do processo iterativo, onde o funcional decresce nas iterações iniciais. Contudo, para as situações em que as medidas simuladas continham erros experimentais, o funcional era menos minimizado. Por conseguinte, o processo iterativo foi interrompido com a quantidade máxima de iterações, previamente estabelecida.

Na TAB. 5.10 verifica-se que o acréscimo do erro experimental simulado nas temperaturas medidas acarretou alterações expressivas nas estimativas da função constante. Nas estimativas com desvio-padrão de 5% da temperatura local, observa-se uma maior influência da diminuição da quantidade de sensores, comparado aos outros valores do desvio-padrão. Entretanto, para as medidas simuladas sem erro não houve mudanças significativas na estimativa, conforme visto na FIG. 5.24 e mostrado na TAB. 5.10. Desta forma, introduzindo ruídos nas medidas tem-se um acúmulo maior de erro com 100 sensores do que 50 sensores.

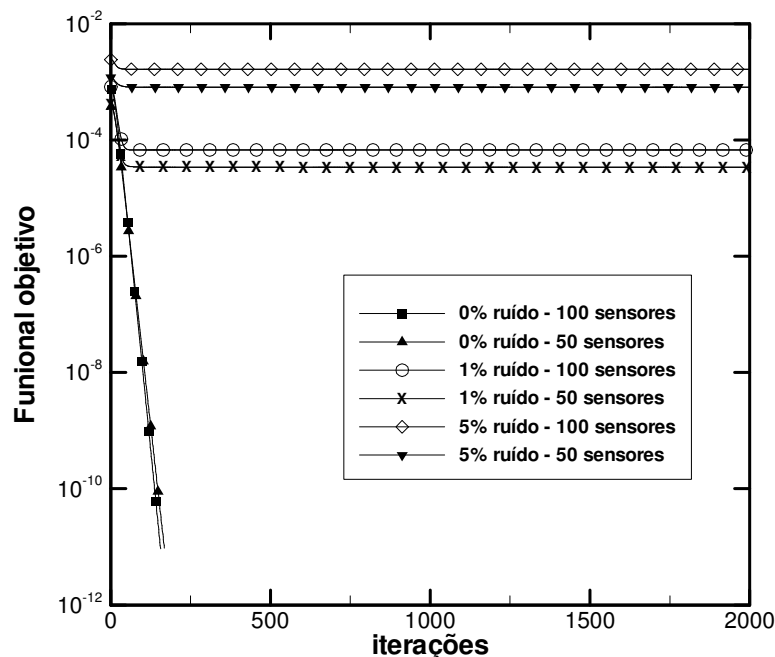


FIG. 5.25 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional constante, utilizando malha 100x100 e com 100 e 50 sensores

TAB. 5.10 Estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional constante, utilizando malha 100x100 e 100 ou 50 sensores

Malha 100x100, $G = 2.48$ e $Tol. = 10^{-11}$					
Função	Desvio-padrão	Sensores	Estimativa inicial 4.5		Tempo computacional
			Erro RMS	Iterações	
Const.	$\sigma = 0$	100	0.00005	156	1h 4 min
		50	0.00007	168	1h 12 min
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	100	0.0214	2000	16h 48min
		50	0.0210	2000	15h 42min
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	100	0.0682	2000	15h 48min
		50	0.0279	2000	16h 9min

Nas FIGs. 5.26 a 5.32 são comparados os resultados das estimativas da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal, triangular, quadrada e degrau. A quantidade e o posicionamento dos sensores térmicos, usados nas simulações seguintes, apresentam a mesma configuração da estimativa da função constante. Preservou-se também a forma de inserção dos ruídos, bem como, o valor atribuído ao desvio-padrão.

Vale ressaltar, que devido ao custo computacional, foram utilizados três computadores diferentes. Um computador com processador Intel Pentium IV 3GHz e 2Gb de memória RAM, e dois computadores com processador Intel Core 2 Quad 2.83GHz e 2.96 Gb de RAM. Desta forma, não será possível comparar os tempos de CPU para esses casos.

Analisando a FIG. 5.26 observam-se oscilações significativas nas estimativas oriundas das medidas simuladas com erros experimentais. Porém, graficamente não é possível avaliar, dentre as curvas, qual apresenta o melhor resultado.

No resultado gráfico apresentado na FIG. 5.26, a influência da quantidade de sensores não ficou evidente para os casos com ruído. Porém, pela FIG. 5.27, existem indícios que as curvas com maiores discrepâncias foram aquelas com um desvio-padrão de 5% da temperatura local, visto que os valores atingidos pela função objetivo foram os maiores. De fato, pelas TABs. 5.11 e 5.12 verifica-se que o erros RMS para este desvio-padrão é o maior para a estimativa da função seno com 100 sensores, sendo este iguais a 0.1398.

A FIG. 5.28 mostra a estimativa para a função triangular. Nesta estimativa as maiores oscilações decorrem do aumento das perturbações nas medidas simuladas. Tal fato pode ser elucidado com o auxílio da FIG. 5.29. Na posição $X = 0.5$, equivalente a 1.5 cm, não foi estimado o valor máximo da função exata, como esperado.

Sem desvio-padrão nas medidas simuladas foi possível capturar o valor de máximo da função triangular, bem como a base. Por outro lado, com a inserção de ruído nas medidas, a estimativa não recuperou estes valores, exceto para o caso com 100 sensores e 1% de ruído. As estimativas apresentadas na FIG. 5.28 apresentaram oscilações menores equiparadas as estimativas para a função seno, mostradas na FIG. 5.26.

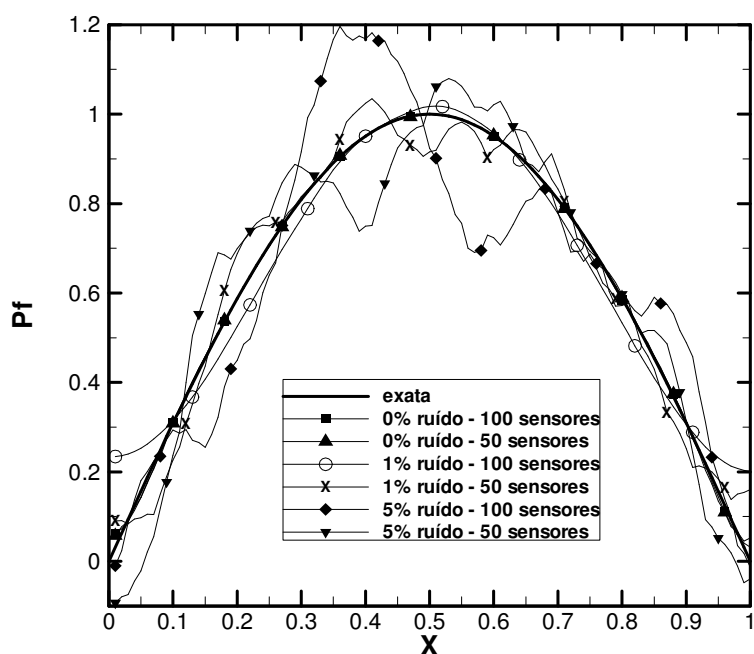


FIG. 5.26 Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 e 50 sensores

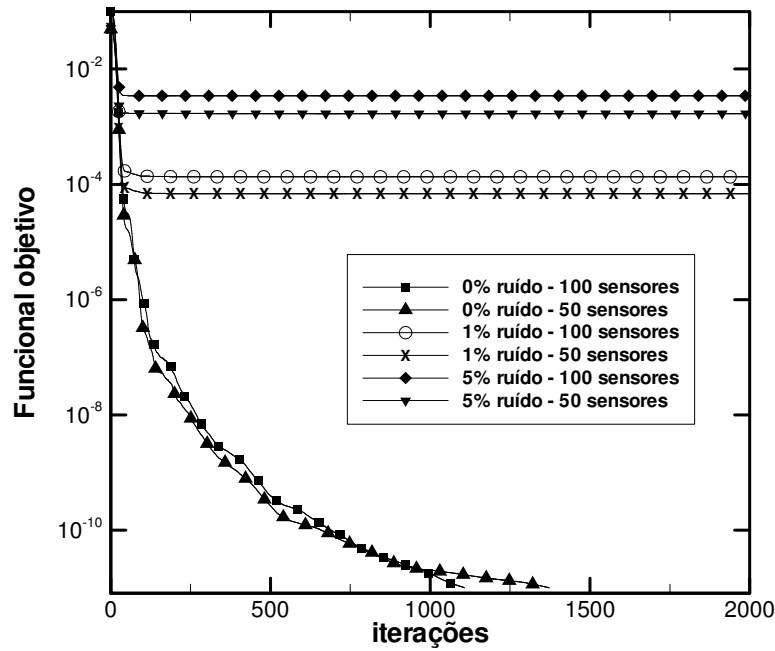


FIG. 5.27 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

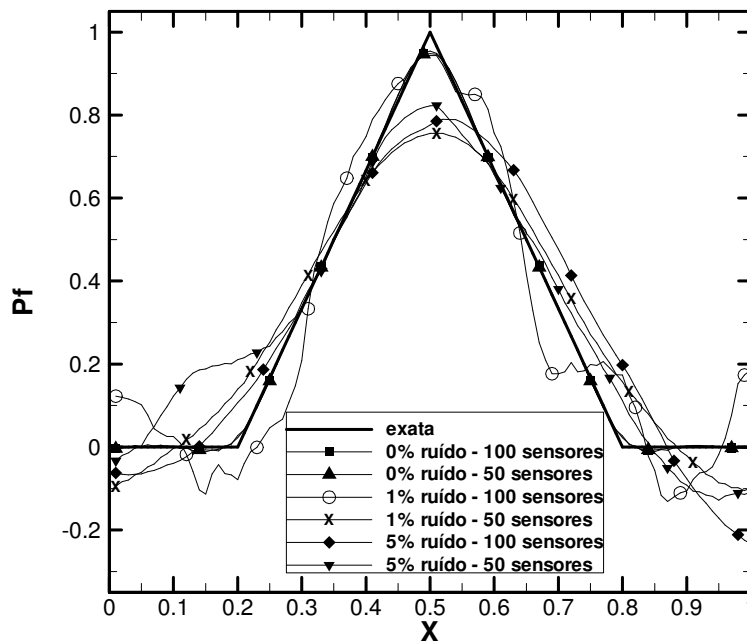


FIG. 5.28 Estimativa da perfusão com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 e 50 sensores

A FIG. 5.29 ilustra a evolução do funcional objetivo para a estimativa da função triangular. O funcional apresentou comportamento similar ao da FIG. 5.27, onde a minimização foi atingida apenas para as medidas livres de erro. No entanto, o funcional foi mais minimizado na estimativa da função senoidal do que para função triangular, conforme visto nas TABs. 5.11 e 5.12.

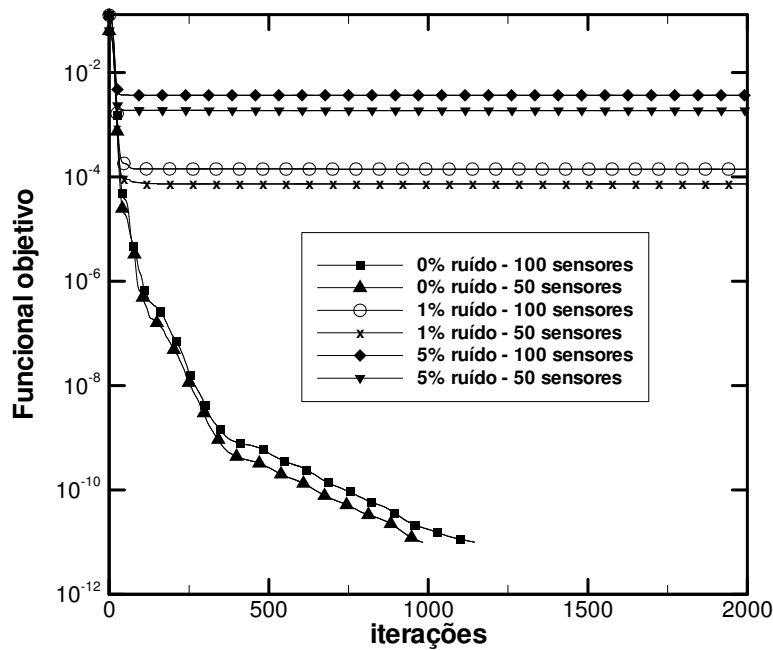


FIG. 5.29 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

A FIG. 5.30 apresenta a estimativa do coeficiente de perfusão na forma degrau. Observa-se novamente, que o caso sem ruído nas medidas obteve um resultado satisfatório, pois tanto os patamares superior e inferior foram capturados. Em contrapartida, a FIG. 5.30 indica que 5% de ruído combinado com 100 sensores, ocasionou as curvas com maiores discrepâncias em relação a função exata. Esta observação é aferida por meio da FIG. 5.31, onde o valor atingido pelo funcional foi o maior.

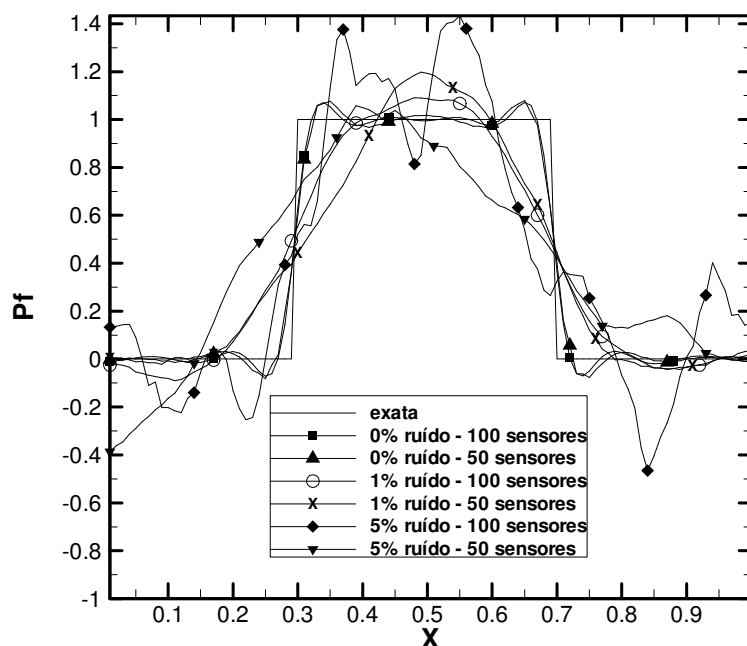


FIG. 5.30 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

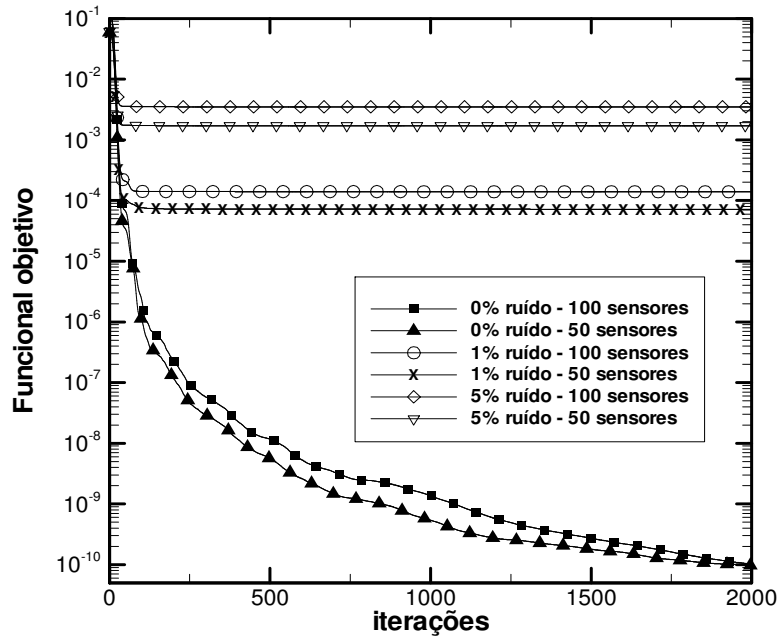


FIG. 5.31 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

Diferentemente do ocorrido nos casos anteriores, a FIG. 5.31 mostra que o funcional referente as medidas sem erros experimentais, não atingiu a tolerância de 10^{-11} .

A FIG. 5.32 mostra a estimativa da função degrau. Conforme esperado, as curvas estimadas da FIG. 5.32 e as da FIG. 5.33 apresentam um comportamento similar às obtidas na situação anterior, para a função quadrada.

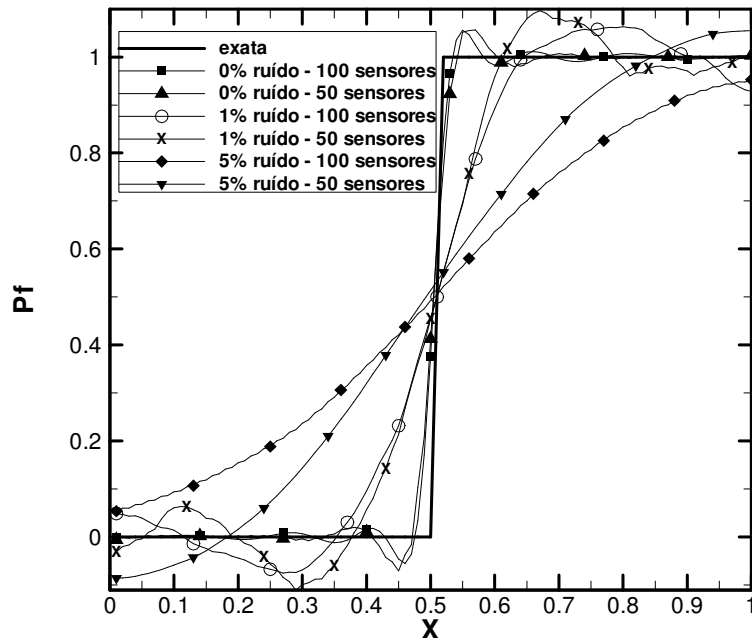


FIG. 5.32 Estimativa da perfusão com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

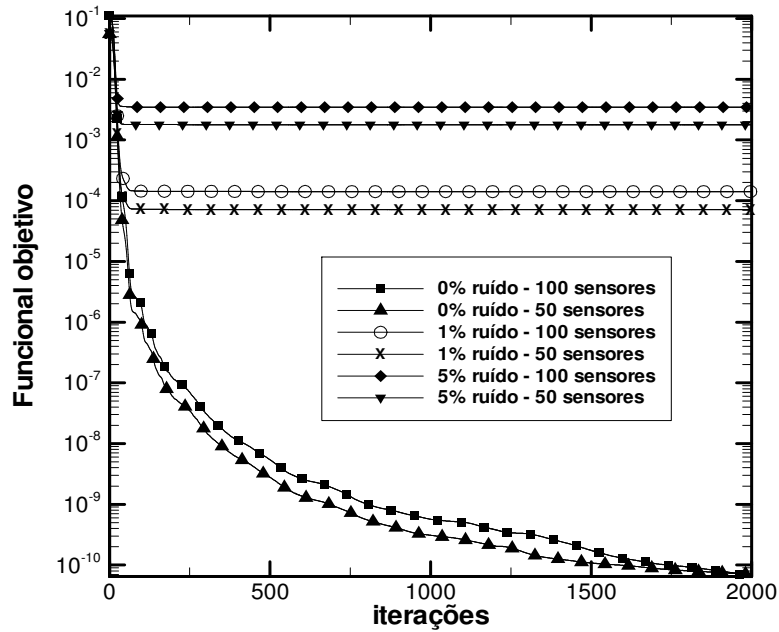


FIG. 5.33 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 ou 50 sensores

Os resultados mostrados nas TAB. 5.11 e 5.12 indicam o erro RMS, o número de iterações realizadas e o valor do funcional objetivo na última iteração para as estimativas da perfusão sanguínea com forma funcional unidimensional.

O número de sensores e a quantidade de ruído colocado nas medidas mostraram-se fatores importantes. O aumento de ruído provocou um desvio maior entre as curvas estimadas e exatas.

Nas medidas livres de erro experimentais, a quantidade de sensores utilizados exerceu um efeito moderado nos resultados, pois a diminuição no número de sensores implicou em um aumento sutil na discrepância entre as curvas. Em contrapartida, nas estimativas cuja medida contém ruído, obteve-se um efeito contrário: a diminuição no número de sensores implicou em desvios menores entre as curvas. Isto ocorre, porque como as estimativas sem erro nas medidas foram parecidas para ambos os arranjos de sensores, ao inserir ruídos nas medidas tem-se que, quanto maior o número de sensores, maior será o erro acumulado no funcional. Como consequência, espera-se que o funcional para 50 sensores, se comparado ao de 100, seja mais rapidamente minimizado, conforme mostrado nas TABs. 5.11 e 5.12 e ilustrado nas FIGs. 5.27, 5.29, 5.31 e 5.33.

TAB. 5.11 Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, degrau, com 100 sensores

Malha 100x100, G = 2.48 e Tol. = 10 ⁻¹¹				
Funções	Desvio-padrão	Estimativa inicial 4.5 100 sensores em Y = 0.9		Funcional objetivo
		Erro RMS	Iterações	
Senoidal	$\sigma = 0$	0.0062	1108	9.9840x10 ⁻¹²
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0596	2000	1.3471x10 ⁻⁴
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.1398	2000	3.4147x10 ⁻³
Triangular	$\sigma = 0$	0.0081	1145	9.9918x10 ⁻¹²
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0946	2000	1.4205x10 ⁻⁴
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.1083	2000	3.6799x10 ⁻³
Quadrada	$\sigma = 0$	0.0827	2000	1.0142x10 ⁻¹⁰
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.1782	2000	1.4984x10 ⁻⁴
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.2792	2000	3.8992x10 ⁻³
Degrau	$\sigma = 0$	0.0602	2000	7.4910x10 ⁻¹¹
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.1422	2000	1.4097x10 ⁻⁴
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.2574	2000	3.7724x10 ⁻³

TAB. 5.12 Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, com 50 sensores

Malha 100x100, G = 2.48 e Tol. = 10 ⁻¹¹				
Funções	Desvio-padrão	Estimativa inicial 4.5 50 sensores em Y = 0.9		Funcional objetivo
		Erro RMS	Iterações	
Senoidal	$\sigma = 0$	0.0079	1373	9.9740x10 ⁻¹²
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0551	2000	6.8568x10 ⁻⁵
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.0933	2000	1.6857x10 ⁻³
Triangular	$\sigma = 0$	0.0092	983	9.9801x10 ⁻¹²
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0905	2000	7.3789x10 ⁻⁵
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.0942	2000	1.8897x10 ⁻³
Quadrada	$\sigma = 0$	0.0895	2000	9.7157x10 ⁻¹¹
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0953	2000	7.6936x10 ⁻⁵
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.0996	2000	1.9986x10 ⁻³
Degrau	$\sigma = 0$	0.0680	2000	7.0648x10 ⁻¹¹
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.1393	2000	7.5861x10 ⁻⁵
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.2159	2000	1.9759x10 ⁻³

Nota-se claramente que determinadas características da função, tal como a suavidade ou pontos de descontinuidades, podem gerar ou não, um aumento representativo na precisão dos

resultados. De fato, o funcional foi mais minimizado na estimativa da função seno, ao contrário da função quadrada, que apresentou o maior valor para o funcional.

Em decorrência, o método apresentou melhor desempenho na recuperação da função senoidal. Verifica-se ainda, que os resultados para a função degrau foram ligeiramente superiores àqueles obtidos na função quadrada.

Por fim, os resultados provenientes das estimativas com desvio-padrão de 1% da temperatura local foram satisfatórias, com erros RMS inferiores a 0.18. Mais ainda, os resultados bem sucedidos oriundos da estimativa da perfusão com variação funcional unidimensional custaram um esforço computacional elevado.

A fim de avaliar o desempenho do método mediante a utilização do critério da discrepância (Ozisk et al., 2000), os sensores foram distribuídos de maneira equidistantes (0,3 mm). Além disso, consideraram-se diferentes níveis de desvios padrão: 0.1, 1 e 5% do valor da temperatura local. Tais ruídos são atribuídos da seguinte forma: $\theta_{med} = \theta_{exa} + \varepsilon\sigma$, onde θ_{med} é a medida da temperatura local adimensional, θ_{exa} é a medida simulada por meio da solução do problema direto, ε é a variável aleatória contínua distribuída normalmente com média zero tal que $-2.576 < \varepsilon < 2.576$ e $\sigma = \delta \theta_{exa}$ é o desvio padrão, com δ igual a 0.001, 0.01 e 0.05. Conforme mencionado anteriormente, o processo iterativo é interrompido quando o valor da função objetivo começa minimizar atingindo o valor de $N\sigma^2$, onde N é a quantidade de sensores utilizados. Contudo, para o cálculo da tolerância do princípio da discrepância considerou-se uma percentagem da média de todas as temperaturas do domínio do tecido.

As FIGs. 5.34 a 5.41 apresentam os resultados das estimativas da perfusão sanguínea com forma funcional senoidal, triangular, quadrada e degrau com a utilização do princípio da discrepância.

Na FIG. 5.34 observa-se que com a inserção de 1 e 5 % nas medidas não é possível estimar o comportamento da função seno. Por outro lado, com desvio-padrão de 0.1% da temperatura local a estimativa recupera a amplitude senoidal. No entanto, as extremidades não são estimadas. Tal fato justifica-se também pelo comportamento do funcional objetivo mostrado na FIG. 5.35, onde a curva correspondente a 0.1% de ruído é mais minimizada. Equiparando as FIGs. 5.34 e 5.26 observam-se que oscilações significativas nas estimativas oriundas das medidas simuladas com erros experimentais ocorrem quando não é utilizado o princípio da discrepância, como esperado.

O mesmo ocorre para as estimativas da função triangular, quadrada e degrau, exibidas nas FIGs. 5.36, 5.38, 5.40, respectivamente.

Ainda analisando estas figuras, verifica-se que para as estimativas da função triangular e quadrada não é possível capturar o valor de máximo de ambas as funções. Fato decorrente da existência de pontos de descontinuidade na função ou na derivada da mesma.

No resultado apresentado na FIG. 5.40, a influência de erros experimentais nas medias também é evidente. Porém, o método teve um melhor desempenho na estimativa com 1% de ruído, comparado as funções anteriores.

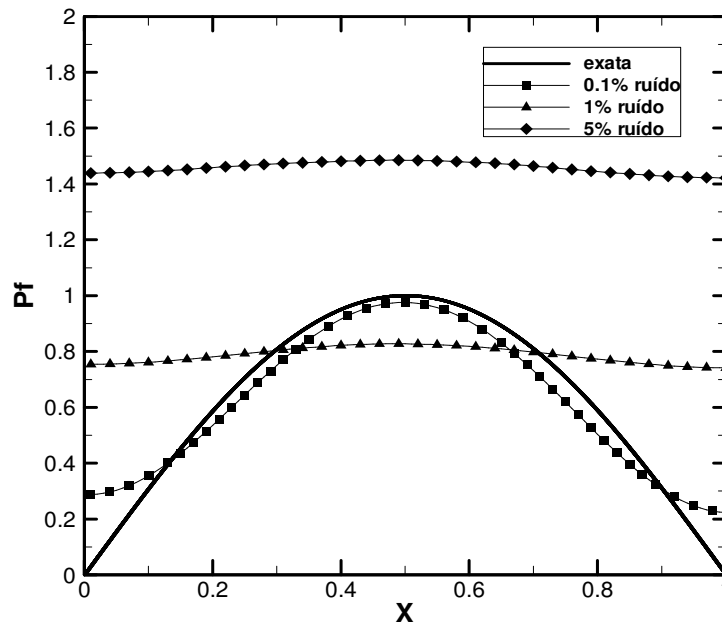


FIG. 5.34 Estimativa da perfusão com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

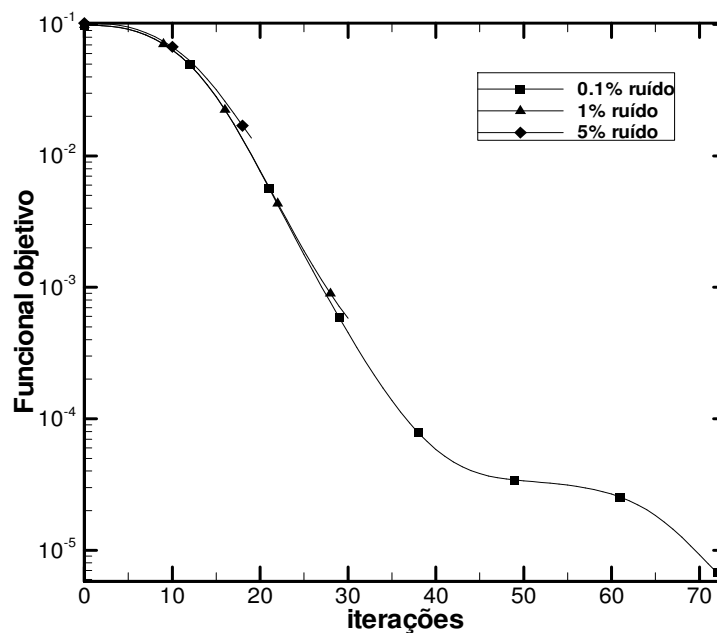


FIG. 5.35 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional senoidal, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

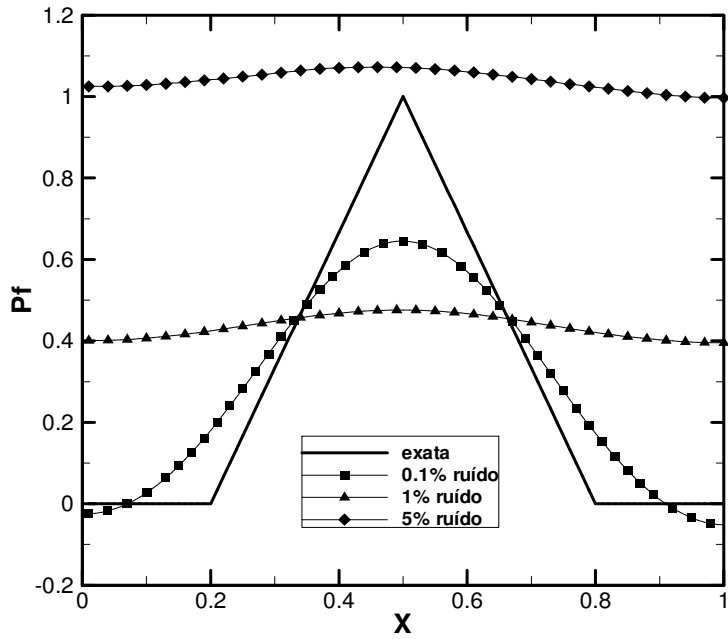


FIG. 5.36 Estimativa da perfusão com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

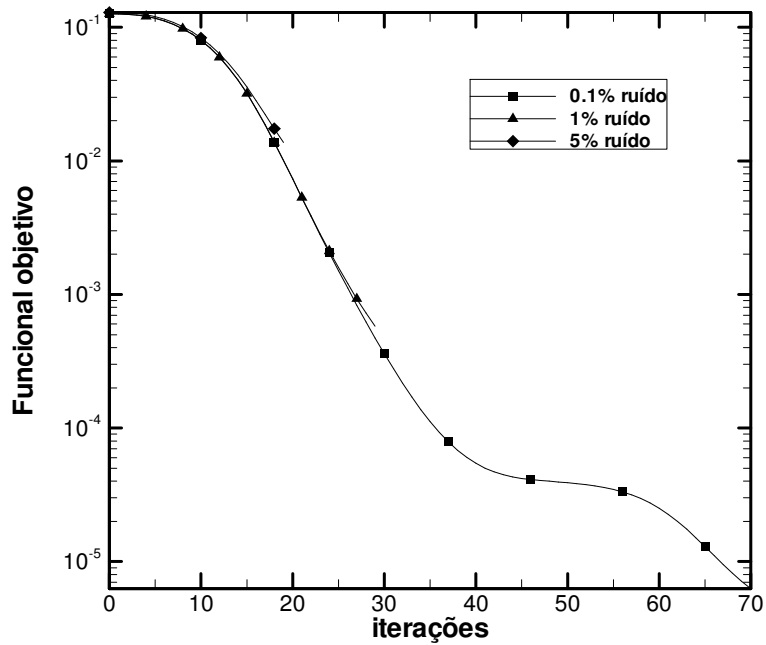


FIG. 5.37 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional triangular, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

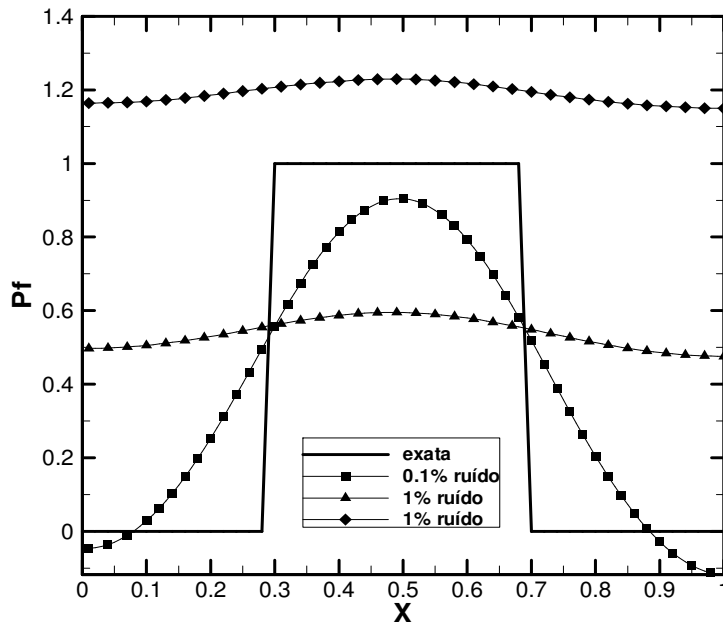


FIG. 5.38 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

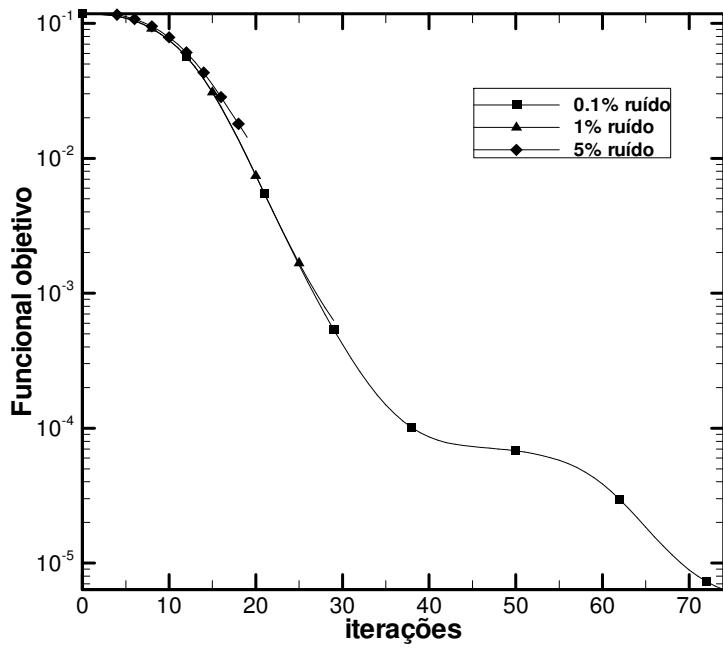


FIG. 5.39 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

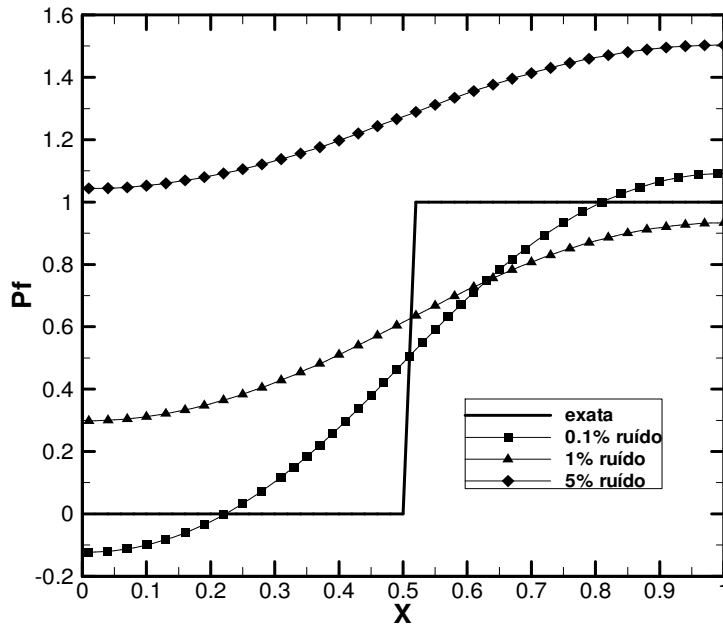


FIG. 5.40 Estimativa da perfusão com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

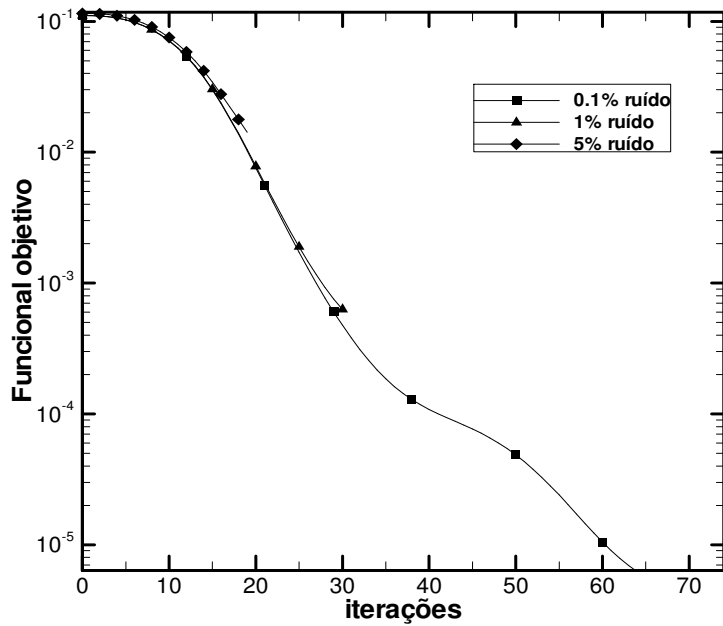


FIG. 5.41 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional degrau, utilizando uma malha 100x100 e com 100 sensores

A TAB. 5.13 exibe o erro RMS alcançado na estimativa e o número de iterações realizadas para as estimativas da perfusão sanguínea com forma funcional unidimensional, utilizando-se o princípio da discrepância.

Verifica-se, claramente, que o aumento de ruído gerou um desvio maior entre as curvas estimadas e exatas.

Comparando as TABs. 5.13 e 5.11, tem-se um aumento significativo do erro RMS. Por outro lado, o princípio da discrepância gerou um decaimento considerável no número de iterações realizadas.

Analisando as FIGs. 5.34, 5.36, 5.38 e 5.40, juntamente com os erros RMS indicados na TAB. 5.13. Conclui-se que a estimativa é razoável para uma quantidade de ruído inferior a 1%, caso contrário, utilizando o princípio da discrepância, neste problema, não é possível obter uma boa estimativa.

TAB. 5.13 Estimativa da perfusão sanguínea com forma senoidal, triangular, quadrada e degrau, com 100 sensores

Malha 100x100, G = 2.48			
Funções	Desvio-padrão	Estimativa inicial 4.5	Iterações
		100 sensores em Y = 0.9	
		Erro RMS	
Senoidal	$\sigma = 0.001 \theta_{\text{exa}}$	0.0079	73
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.3187	30
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.8715	19
Triangular	$\sigma = 0.001 \theta_{\text{exa}}$	0.1256	70
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.3344	29
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	1.2006	19
Quadrada	$\sigma = 0.001 \theta_{\text{exa}}$	0.2446	74
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.4771	29
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.9186	19
Degrau	$\sigma = 0.001 \theta_{\text{exa}}$	0.2098	64
	$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.3313	31
	$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.8538	19

A seguir, será investigada, a quantidade ótima de sensores, a fim de avaliar o número mínimo de medidas que forneçam informações suficientes para a estimativa da perfusão sanguínea, na forma funcional com variação quadrada. Neste estudo foram empregados 100, 50, 25 e 10 sensores, posicionados a 3 mm abaixo da superfície da região de interesse. Os sensores foram dispostos da seguinte maneira: 100 sensores distanciados a 0.3 mm cada, 50

sensores distanciados a 0.6 mm cada, 25 sensores distanciados a 0.9 mm cada e 10 sensores distanciados a 3 mm cada.

As estimativas conseguidas e apresentadas na FIG. 5.42, para a função quadrada, permitem inferir que a quantidade de 10 sensores não resulta em uma estimativa satisfatória. Por outro lado, com 25 sensores é possível conseguir uma boa estimativa. Contudo, independentemente, da quantidade de sensores, o funcional objetivo não atingiu a tolerância especificada de 10^{-11} , conforme visto na FIG. 5.43. Verifica-se ainda, que aproximadamente após 300 iterações, não há variação significativa da função objetivo para 10 sensores.

Verifica-se que o valor final da função objetivo na FIG. 5.43 é o mesmo para 25, 50 e 100 sensores. Por isso, as estimativas na FIG. 5.43 são parecidas para essas configurações.

O mesmo estudo foi realizado para medidas simuladas com desvio-padrão de 1% da temperatura local, como examinado na FIG. 5.44. As estimativas divergem claramente da função exata. Em função da inviabilidade de analisar qualitativamente as curvas do gráfico e obter a quantidade mínima de sensores térmicos, é importante direcionar uma investigação minuciosa da proximidade entre a função exata e a estimada, por meio do cálculo do erro RMS. Esta investigação será apresentada mais adiante.

A FIG. 5.45 expõe a variação do funcional, conforme a quantidade de sensores. Nota-se que quanto menos sensores, mais o funcional é minimizado. De fato, com 10 sensores, o valor final do funcional é da ordem de 10^{-5} , enquanto que para 100 sensores, tal valor é uma ordem de grandeza maior do que o obtido por 10 sensores.

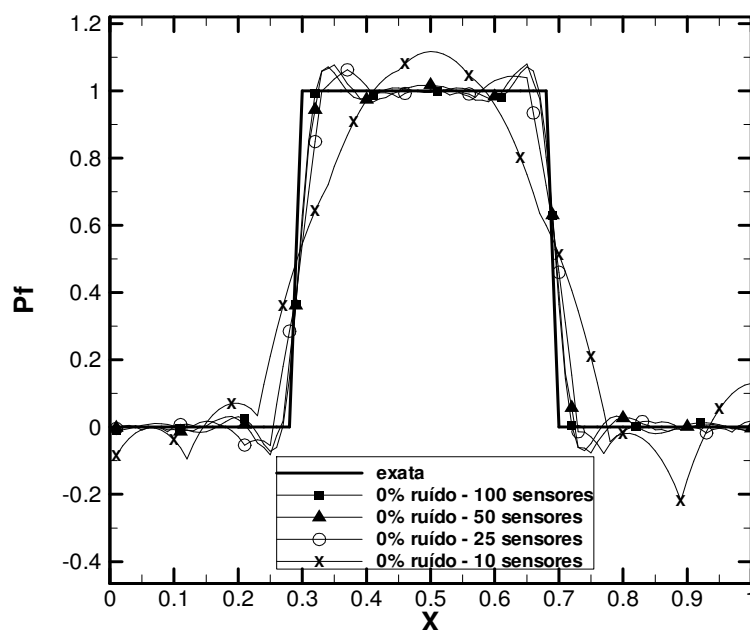


FIG. 5.42 Estimava da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com medidas livres de erros

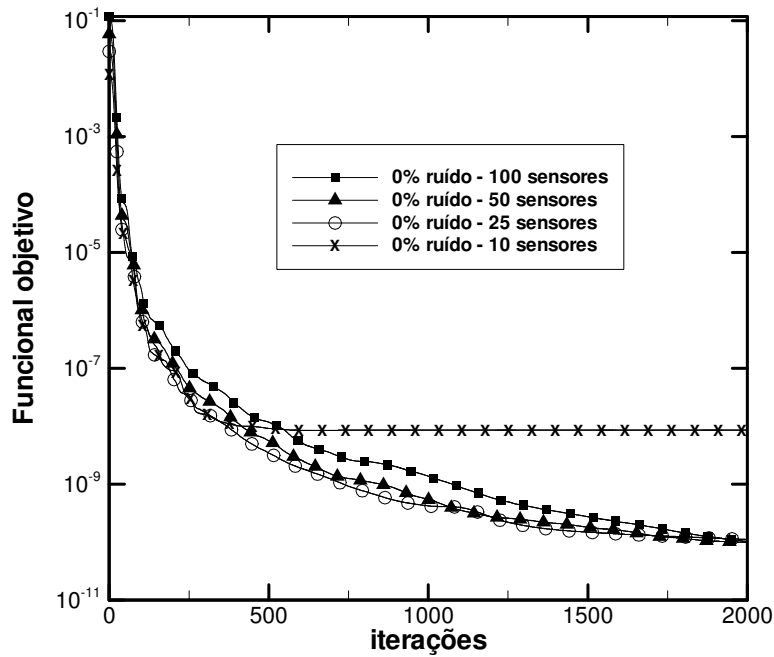


FIG. 5.43 Evolução do funcional objetivo para a estimativa com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com medidas livre de erros

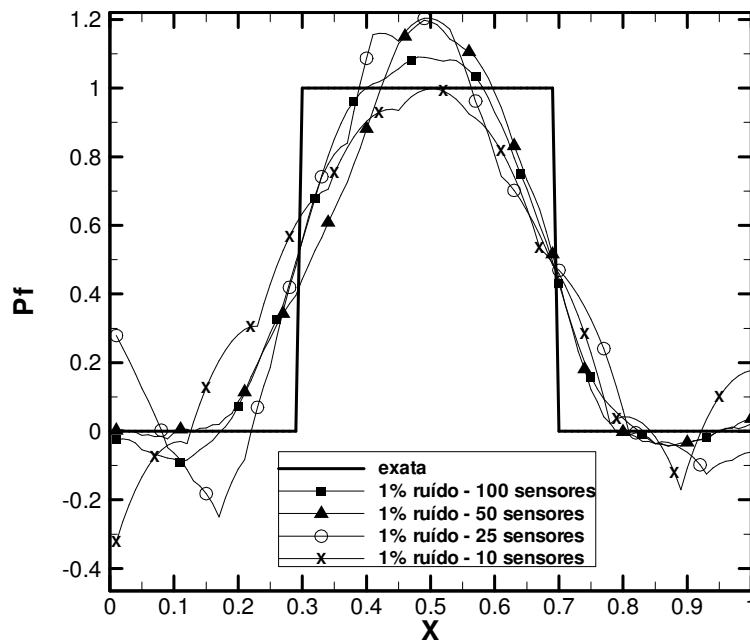


FIG. 5.44 Estimava da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 1% da temperatura local

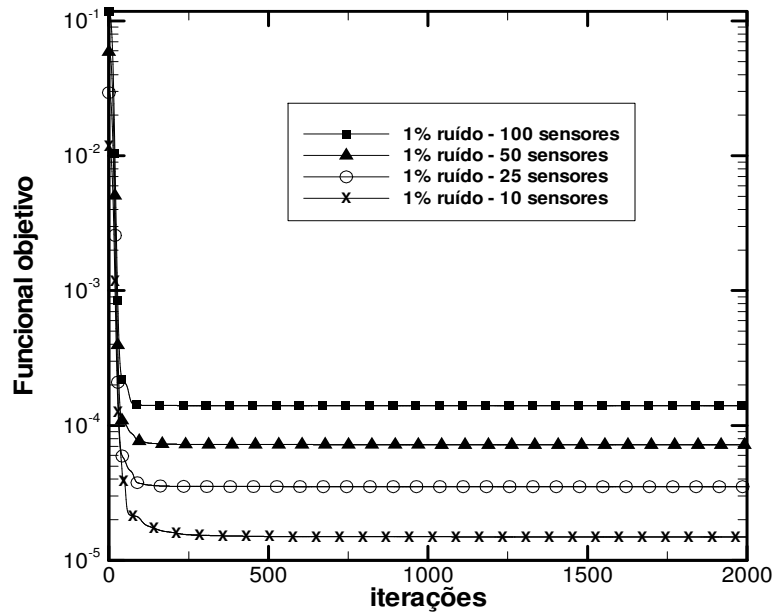


FIG. 5.45 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 1% da temperatura local

A próxima situação, a ser tratada na FIG. 5.46, constitui na variação da quantidade de sensores e a inserção de medidas com erros experimentais de 5% da temperatura local.

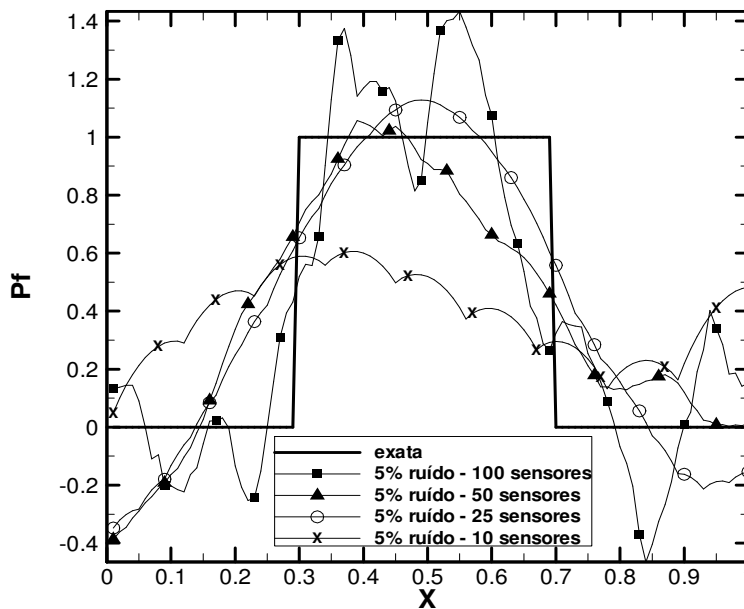


FIG. 5.46 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 5% da temperatura local

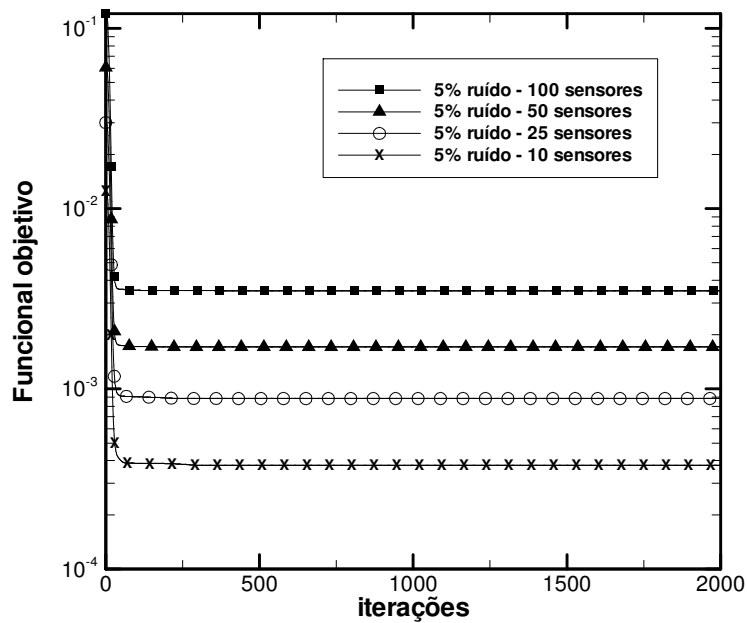


FIG. 5.47 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, para diversos arranjos de sensores e com desvio-padrão de 5% da temperatura local

Os resultados apresentados revelam que, neste caso, o método foi ineficiente na recuperação do comportamento da perfusão sanguínea na forma funcional quadrada, com 10 sensores. As estimativas com 50 e 25 sensores foram parecidas com aquelas obtidas na FIG. 5.44, para a mesma quantidade de sensores. De fato, pela TAB. 5.14 observa-se uma variação insignificante no erro RMS das mesmas. Em contrapartida, a estimativa com 100 sensores apresentou maiores oscilações equiparada a da FIG. 5.44.

A fim de complementar o presente estudo, foi desenvolvida uma investigação a respeito do número ótimo de sensores para a estimativa de cada uma das formas funcionais analisadas neste trabalho. Os resultados obtidos nas três simulações anteriores são avaliados por meio do erro RMS, na TAB. 5.14.

Verifica-se pela TAB. 5.14, que o incremento de ruído na medida, ocasionou um desvio significativo entre a estimativa e a função exata. Por exemplo, a inserção de 5% de ruído gerou um erro RMS de 0.2792, enquanto com medidas livres de erro o erro RMS foi de 0.0827. Este desvio entre as curvas estimadas e exatas pode ser observado pelo comportamento do funcional, mostrados nas FIGs. 5.45 e 5.47. Para medidas sem ruído o funcional é da ordem de 10^{-10} . Em contrapartida, com um desvio-padrão de 5% da temperatura local, o funcional permanece, praticamente, constante e da ordem de 10^{-3} .

Adotando-se o erro RMS e valor do funcional alcançado na última iteração, como critério de comparação entre todas as combinações de sensores empregadas, observa-se que o erro RMS e o funcional possuem o mesmo comportamento, pois à medida que se aumenta o ruído nas medidas simuladas, o valor do funcional também aumenta. Por outro lado, os arranjos de 100 e 50 sensores apresentaram curvas de estimativas parecidas, conforme ilustrado na FIG. 5.42. De fato, como mostram as TABs. 5.11 e 5.12, os erros RMS destas duas configurações são, praticamente, iguais. Assim, quando ruídos são introduzidos nas medidas, espera-se que o arranjo de 50 sensores apresente uma estimativa melhor, visto que este acumulará menos erro no funcional do que com 100 sensores.

TAB. 5.14 Estimativa da perfusão sanguínea com forma quadrada para diversos arranjos de sensores

Malha 100x100, G = 2.48 e Tol. = 10 ⁻¹¹						
Função	Sensores	Desvio-padrão	Estimativa inicial 4.5 Sensores localizados em Y = 0.9		Função objetivo	
			Erro RMS	Iterações		
Quadrada	100	$\sigma = 0$	0.0827	2000	1.0142×10^{-10}	
		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.1782	2000	1.3984×10^{-4}	
		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.2792	2000	3.4992×10^{-3}	
	50	$\sigma = 0$	0.0895	2000	2000	9.7157×10^{-11}
		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.0953	2000	2000	7.1876×10^{-5}
		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.0996	2000	2000	1.7086×10^{-3}
	25	$\sigma = 0$	0.1112	2000	2000	1.1034×10^{-10}
		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.2213	2000	2000	3.5177×10^{-5}
		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.2383	2000	2000	8.8316×10^{-4}
	10	$\sigma = 0$	0.1869	2000	2000	8.5395×10^{-9}
		$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	0.2334	2000	2000	1.4936×10^{-5}
		$\sigma = 0.05 \theta_{\text{exa}}$	0.4302	2000	2000	3.7707×10^{-4}

Como um caso teste mais exigente para a função unidimensional, procurou-se estimar a seguinte função, a qual consiste em uma função sem simetria e com dois pontos com descontinuidades.

$$\text{Pf}(X) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.3 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 1 & 0.3 \leq X \leq 0.6 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.6 < X \leq 0.7 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 2 & 0.7 < X \leq 0.8 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.8 < X \leq 1 & 0 \leq Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.94)$$

Visando uma aplicação prática deste caso, os dois maiores valores desta função representariam valores da perfusão sanguínea referente a dois possíveis tumores no tecido. Contudo, é importante esclarecer que, nesta situação não estão sendo investigados os efeitos da quantidade de sensores. Portanto, adotou-se a utilização de sensores térmicos em todos os pontos da malha, com medidas simuladas sem erro experimental. Além disso, manteve-se a estimativa inicial igual a 4.5 e considerou-se uma tolerância de 10^{-11} ou o número máximo de 2000 iterações.

Evidencia-se na curva estimada apresentada na FIG. 5.48 que ao compará-la com a função exata, os pontos onde a função possui os maiores valores, praticamente, são detectados pelo método de estimativa. Contudo, a função não é bem capturada, em virtude da presença de pontos de descontinuidades na função. O valor do patamar inferior não foi recuperado no intervalo (0.6 e 0.7), por outro lado no intervalo (0 e 0.3) o valor foi identificado. Desta forma, conclui-se que quanto mais próximos estiverem os pontos de descontinuidades, mais difícil será a estimar a função nesta região.

O funcional exposto na FIG. 5.49 exibe algumas oscilações. Como mencionado anteriormente, para contornar esses aumentos repentinos do funcional o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto é reiniciado, usando a direção do Método Steepest Descent, até o momento em que o funcional começa novamente a decair.

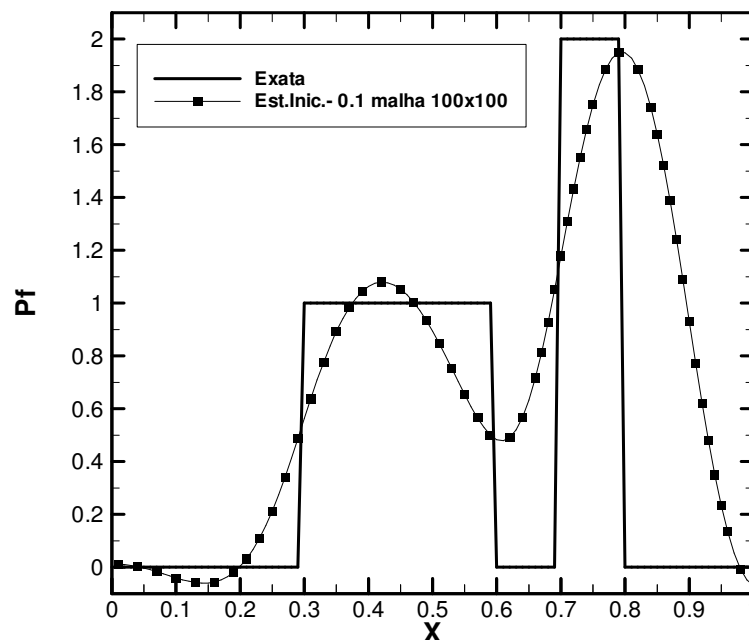


FIG. 5.48 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 10000 sensores e medidas livres de erros

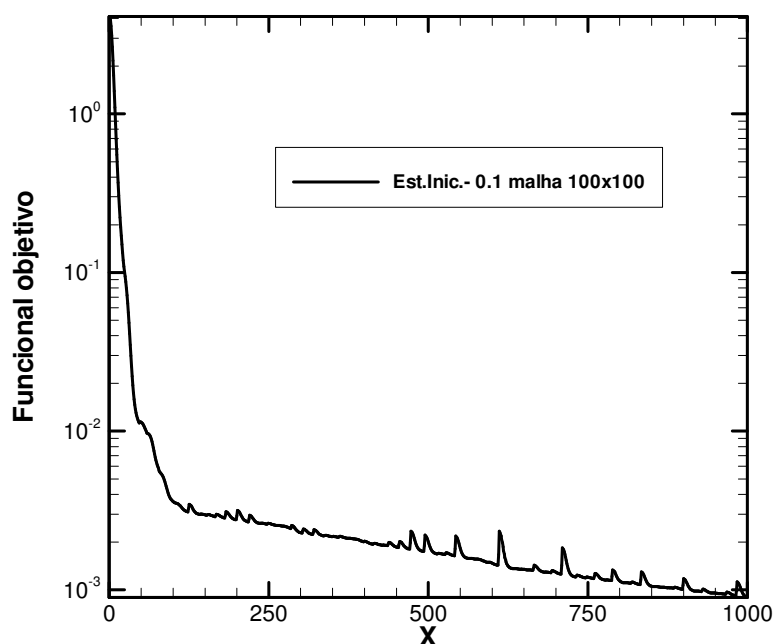


FIG. 5.49 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 10000 sensores e medidas livres de erros

5.7.3 ESTIMATIVA DA PERFUSÃO SANGUÍNEA COM FORMA FUNCIONAL BIDIMENSIONAL

Nesta seção serão apresentados alguns casos para a estimativa da perfusão sanguínea com forma funcional quadrada (bidimensional), em um tecido submetido à hipertermia. Para aferir o desempenho do Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto, foi adotada malha 30x30, pois esta configuração gerou erro relativo inferior a 1% entre as soluções numérica e analítica (vide TABs. 5.1 e 5.2) e baixo custo computacional.

Inicialmente, os sensores foram localizados em todos os pontos do domínio e as temperaturas medidas eram livres de erro. Com o intuito de avaliar a eficácia do método, foram empregadas duas estimativas iniciais: 0.1 e 4.5. O processo iterativo cessou com uma precisão de 10^{-5} .

As FIGs. 5.51 e 5.52 são comparadas com a FIG. 5.50, função exata dada pela EQ. 5.92. Nota-se pela FIGs. 5.43 e 5.44 que a estimativa no contorno norte (camada mais externa do tecido) permanece no valor inicial atribuído a mesma. Este fato decorre em função do

Gradiente, dado pela equação EQ. 5.86, o qual depende da posição em X e Y. Como no contorno norte, $\lambda = 0$, tem-se para os pontos desta fronteira um gradiente nulo. Portanto, quanto maior for a distância entre o valor inicial, para a estimativa, e o valor exato, maior será a discrepância na estimativa alcançada.

Nas FIGs. 5.51 e 5.52 com exceção do comentário anterior, os resultados foram satisfatórios, ou seja, o método conseguiu capturar a variação da perfusão sanguínea. Assim, verifica-se que a restrição com relação a estimativa inicial não será um problema para o presente estudo, salvo se o tumor estiver localizado nos contornos da região de interesse, visto que o valor inicial para a estimativa será o valor da perfusão sanguínea de um tecido sadio. Assim, tem-se o menor valor para a estimativa conhecido e, na região onde o tumor se localiza, a perfusão será sempre maior do que a do tecido sadio.

A FIG. 5.53 exibe o comportamento do funcional objetivo para cada caso estudado. Nota-se que nas curvas existem alguns picos, decorrentes do aumento repentino do funcional em alguns pontos do processo iterativo, onde a minimização do funcional torna-se mais difícil. Observa-se também a influência da estimativa inicial, como já mencionado, pois para o valor inicial de 0.1, houve uma melhor minimização da função objetivo do que para 4.5.

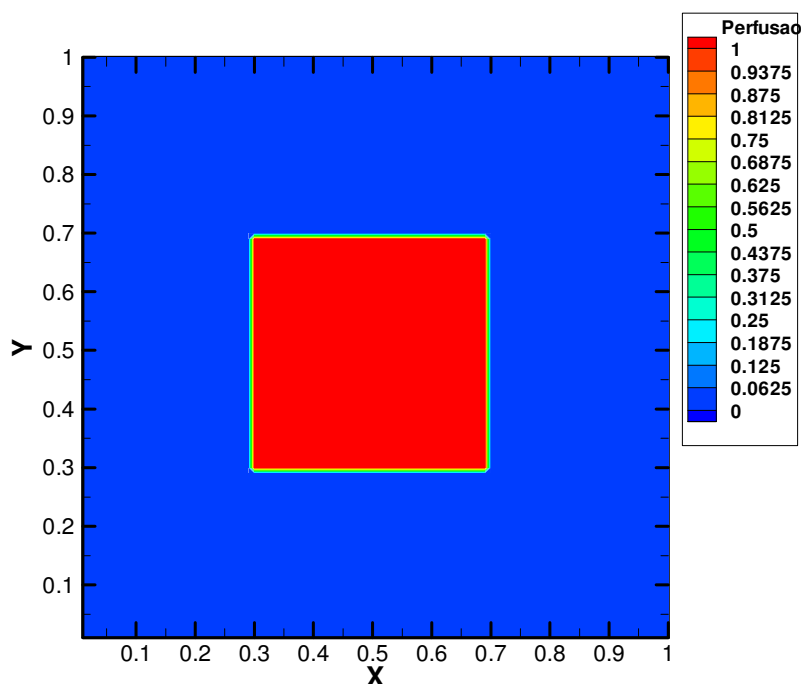


FIG. 5.50 Função Quadrada (Bidimensional)

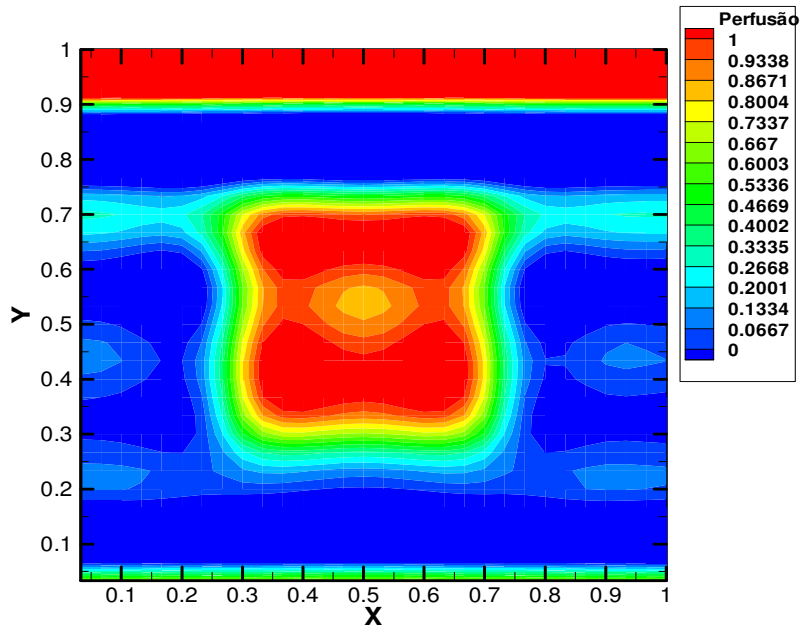


FIG. 5.51 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-5} , estimativa inicial 4.5, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30

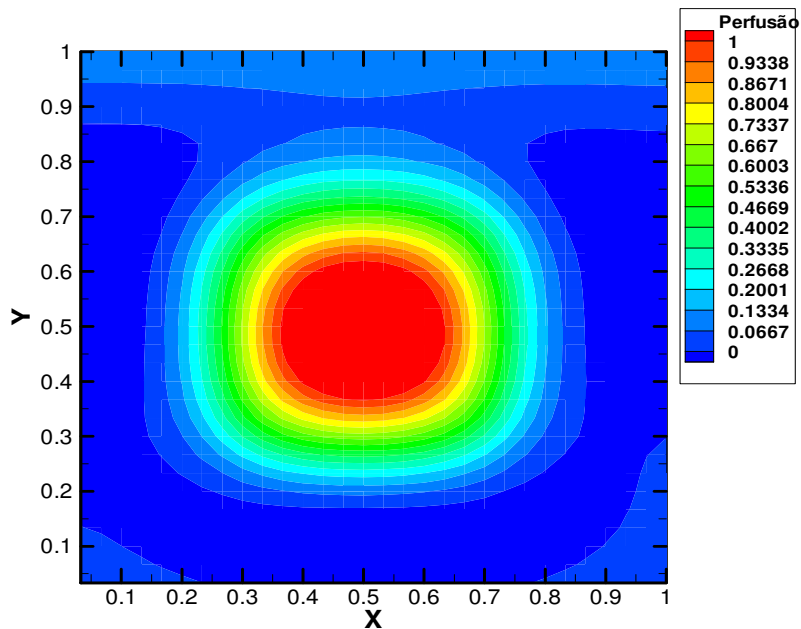


FIG. 5.52 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-5} , estimativa inicial 0.1, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30

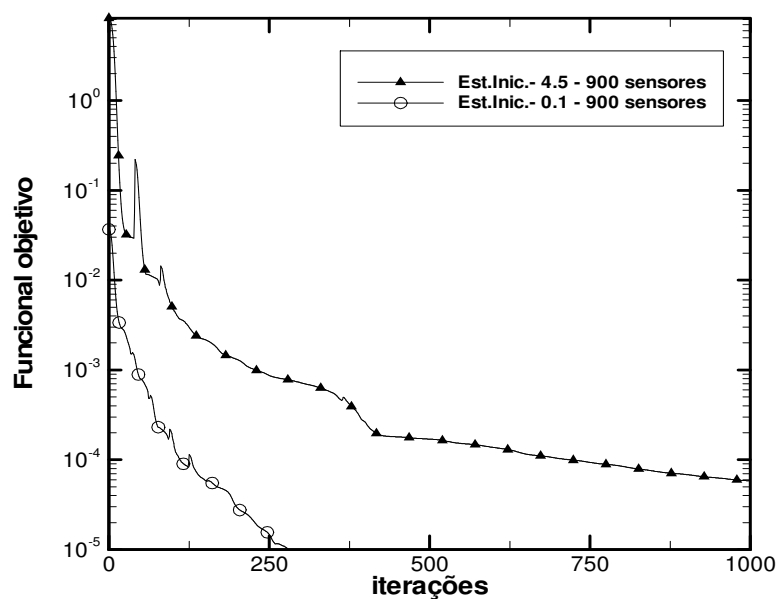


FIG. 5.53 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 30x30

De posse dos resultados obtidos, foi constatado que há uma restrição para a estimativa inicial. Resta apenas avaliar o efeito do número de sensores necessários para obter uma estimativa, onde seja viável a identificação do tumor. Para esta finalidade, foi utilizada uma malha cuja solução do Problema Direto é convergida (10000 volumes) e uma estimativa inicial igual a 0.1 para o coeficiente de perfusão.

Duas configurações foram empregadas para os sensores. Inicialmente, os sensores foram inseridos em todos os pontos da malha e, em seguida, 100 sensores foram posicionados 3 mm abaixo da superfície. Em ambas as situações, os sensores foram igualmente espaçados, com uma distância de 0.3 mm entre si. Neste caso a ser tratado, manteve-se as temperaturas medidas livres de erro experimentais. Para o critério de parada, considerou-se uma tolerância de 10^{-11} ou um número máximo de 2000 iterações.

Nota-se no resultado apresentado pela FIG. 5.54, que o método mostrou um bom desempenho, sendo possível com a estimativa alcançada, detectar a localização do tumor. Pela FIG. 5.55, percebe-se um decaimento mais acentuado do funcional objetivo até 1000 iterações. Na FIG. 5.56 para o caso onde os sensores foram localizados apenas a 3 mm abaixo da superfície, observa-se a imprecisão acerca da região e da forma do tumor. Tal fato está correlacionado com a falta de informações para a estimativa da perfusão sanguínea com variação bidimensional. Assim, torna-se inviável a utilização de sensores apenas próximo ao

contorno. Contudo, verifica-se na região central do tecido um discreto aumento da perfusão sanguínea. Este problema também pode ser identificado por meio da visualização do funcional objetivo apresentado na FIG. 5.57, o qual não conseguiu ser minimizado como o funcional da estimativa do coeficiente de perfusão com 10000 sensores, mostrado na FIG. 5.55.

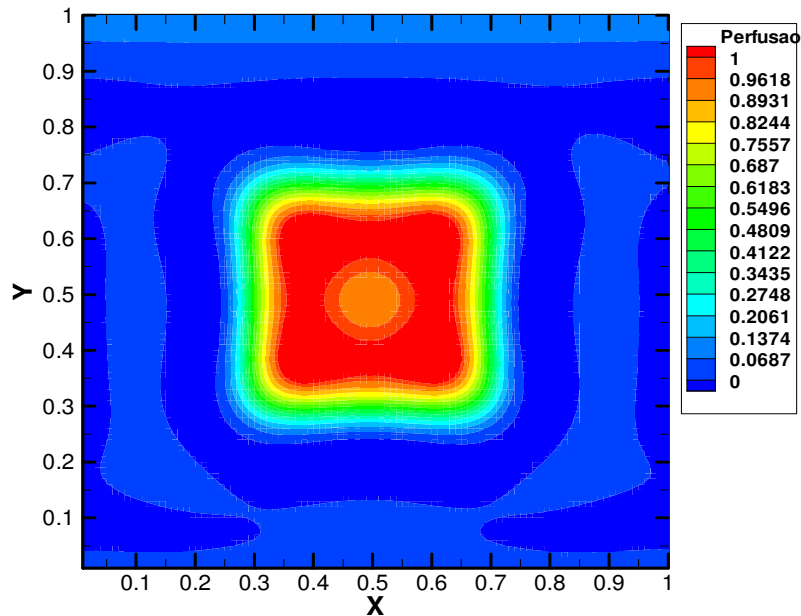


FIG. 5.54 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), tolerância 10^{-11} , estimativa inicial 0.1, sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 100x100

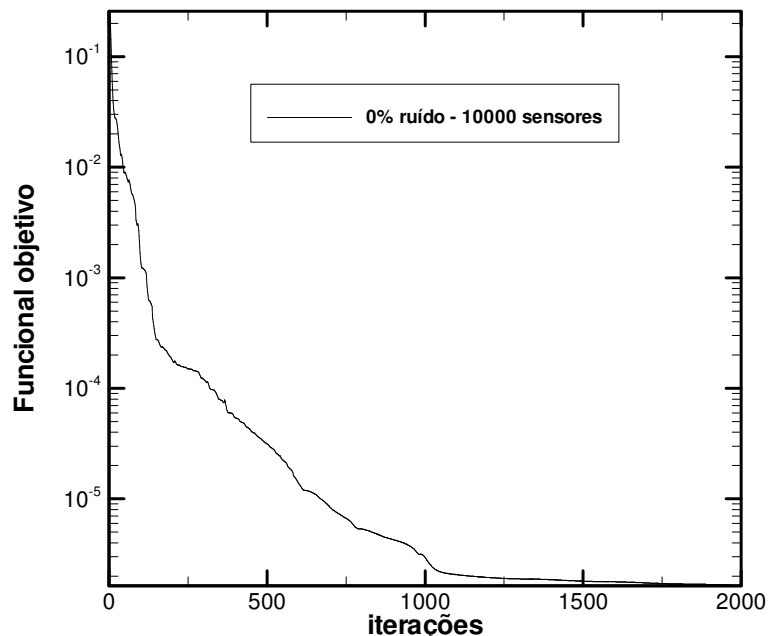


FIG. 5.55 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio e uma malha 100x100

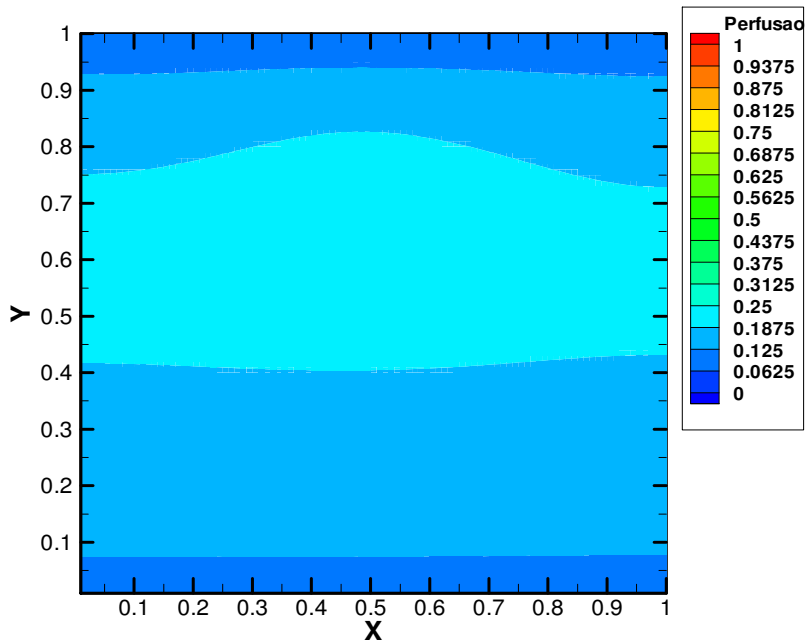


FIG. 5.56 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e uma malha 100x100

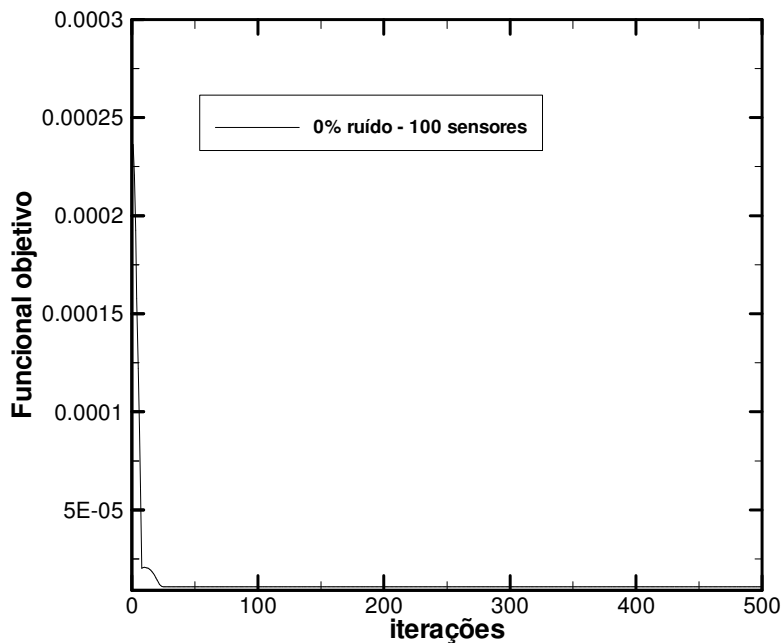


FIG. 5.57 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e uma malha 100x100

Os casos tratados nas FIGs. 5.58 e 5.59 estudam a influência do desvio-padrão de 1% da temperatura local, referentes a quantidade de 10000 e 100 sensores. Fica evidente, que com o uso de sensores em todos os pontos do domínio, a localização do tumor foi obtida com sucesso, mesmo para medidas com erro. Vale ressaltar que os pontos de descontinuidade da função pouco afetaram a estimativa. No entanto, com 100 sensores houve um desvio relativamente grande, entre a função exata e estimada, como esperado. Pois, o resultado já não

foi satisfatório sem ruídos nas medidas, conforme a FIG. 5.56. As estimativas exibidas nas FIGs. 5.58 e 5.54 são similares, apresentando pouca variação nos erros RMS, conforme visto na TAB. 5.13. Entretanto, a estimativa com medidas livres de erro obteve a forma do tumor com um pouco mais de precisão.

A FIG. 5.60 ilustra uma informação já constatada na realização nos casos anteriores, relativa à inserção de ruído.

Foi observado, que o após o decaimento repentino da função objetivo há uma estagnação no seu valor. Por outro lado, na FIG. 5.61, a curva do funcional apresenta oscilações significativas, antes que seu valor permaneça constante.

Analisando concomitantemente as FIGs. 5.54, 5.56, 5.58, 5.59 e a TAB. 5.15, verifica-se a concordância do erro RMS com as estimativas apresentadas. Nesta situação é necessário o uso de sensores em todos os pontos do tecido, pois este apresentou o menor valor de RMS, fornecendo um erro máximo de 0.16.

É importante citar em termos de custos computacionais, que utilizando um computador com processador Intel Pentium IV 3GHz e 2Gb de memória RAM, o tempo de processamento foi alto. O fator que contribui para isto é a necessidade de armazenar todos os valores de temperaturas obtidas no Problema Direto, da solução do Problema de Sensibilidade e do Problema Adjunto, em todos os instantes de tempo, para sua posterior utilização na direção de busca, dada pela EQ. 5.3.

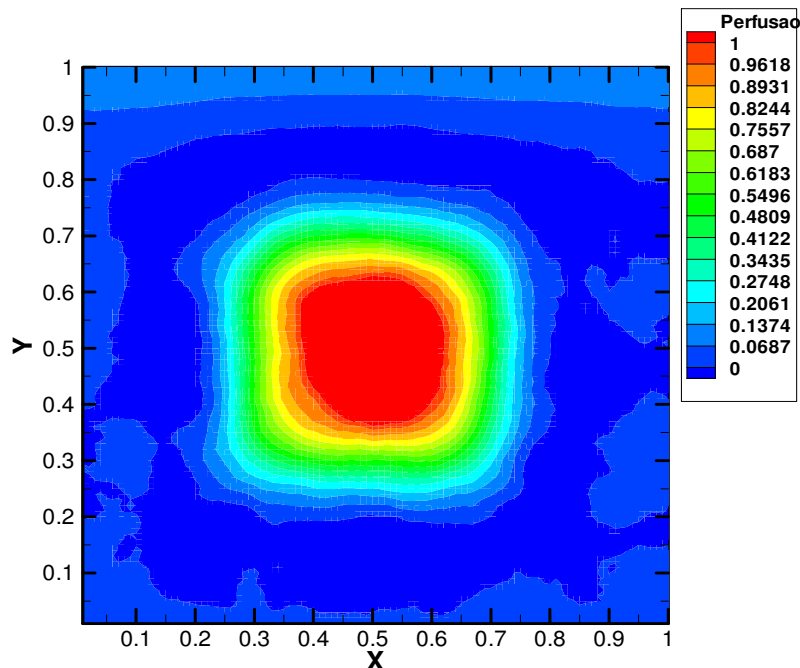


FIG. 5.58 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com sensores em todos os pontos do domínio, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura

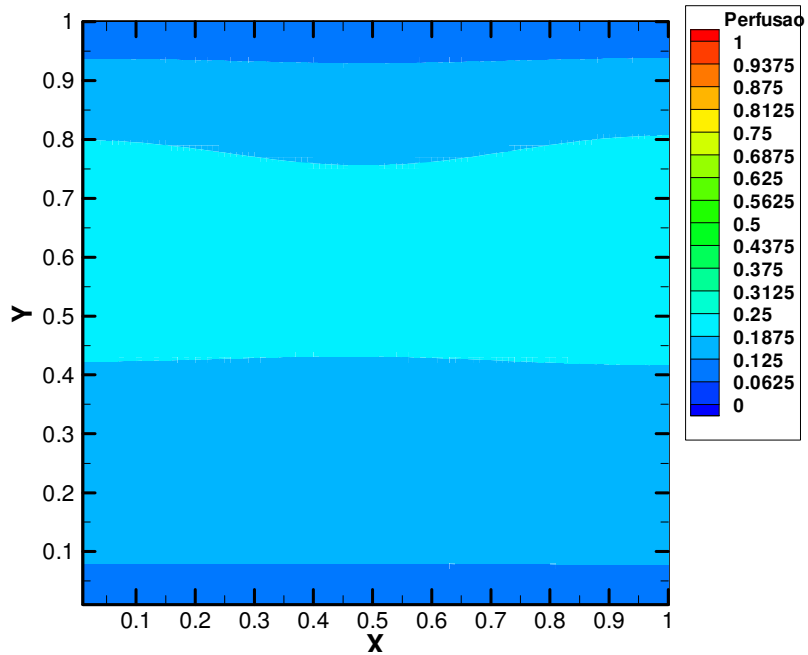


FIG. 5.59 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada, com 100 sensores, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local

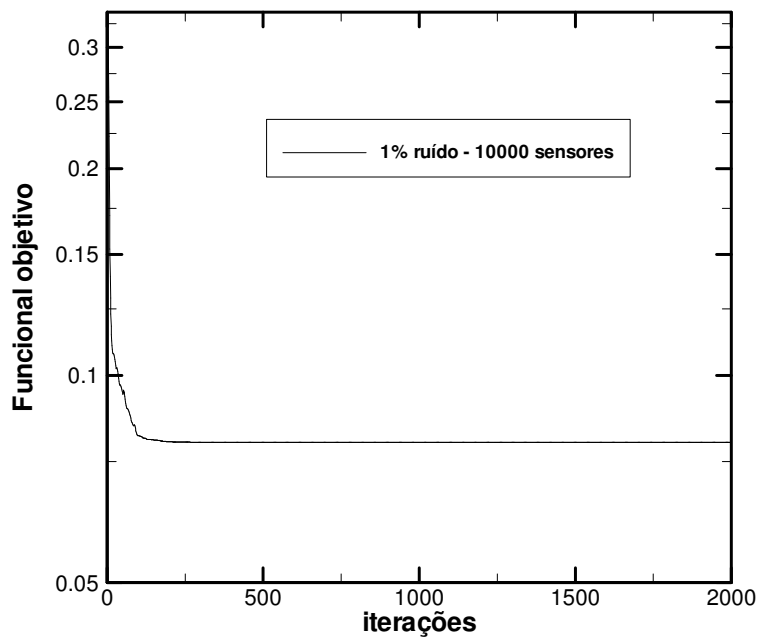


FIG. 5.60 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada com sensores em todos os pontos do domínio, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local.

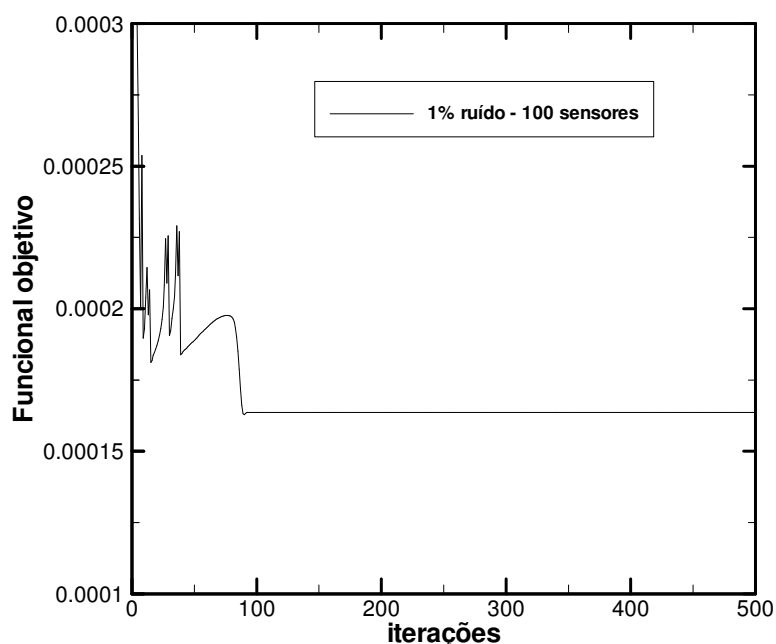


FIG. 5.61 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada), com 100 sensores, malha 100x100 e desvio-padrão de 1% da temperatura local.

TAB. 5.15 Estimativa da perfusão sanguínea com forma bidimensional, com 10000 ou 100 sensores

Função Quadrada Bidimensional – 1 tumor				
Desvio- Padrão	Sensores	Estimativa Inicial 0.1 Malha 100x100, $G = 2.48$ e Tol. = 10^{-11}		Tempo computacional
		Erro RMS	Iterações	
$\sigma = 0$	10000	0.1125	2000	39h 36min
	100	0.3572	2000	39h 12min
$\sigma = 0.01 \theta_{\text{exa}}$	10000	0.1606	2000	50h 30min
	100	0.4195	2000	50h 24min

Para o estudo e análise do desempenho do método na localização de dois tumores, foram realizadas três simulações diferentes. Nesta simulação, foi utilizada uma malha com 10000 volumes e uma estimativa inicial, conveniente, igual a 0.1 para o coeficiente de perfusão. O processo iterativo é interrompido com uma tolerância de 10^{-11} ou um número máximo de 2000 iterações. Variou-se o número de sensores térmicos, bem como, o posicionamento dos mesmos. Contudo, a influência dos erros experimentais nas medidas simuladas foi desprezada. A função exata é dada pela EQ. 5.95, a qual está apresentada graficamente na FIG. 5.62. Este caso teste teve o intuito de analisar uma situação sem simetria espacial. Além disso, representaria um caso onde dois tumores com valores de perfusão diferentes estariam

próximos um do outro. Os resultados numéricos apresentados a seguir, são da comparação com a FIG. 5.62.

$$Pf(X) = \begin{cases} 0 & 0 \leq X < 0.3 & 0 \leq Y < 0.3 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 3 & 0.3 \leq X \leq 0.6 & 0.3 \leq Y \leq 0.6 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.6 < X \leq 0.7 & 0.6 < Y \leq 0.7 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 2 & 0.7 < X \leq 0.9 & 0.7 < Y \leq 0.9 & 0 \leq \tau \leq 1 \\ 0 & 0.9 < X \leq 1 & 0.9 < Y \leq 1 & 0 \leq \tau \leq 1 \end{cases} \quad (5.95)$$

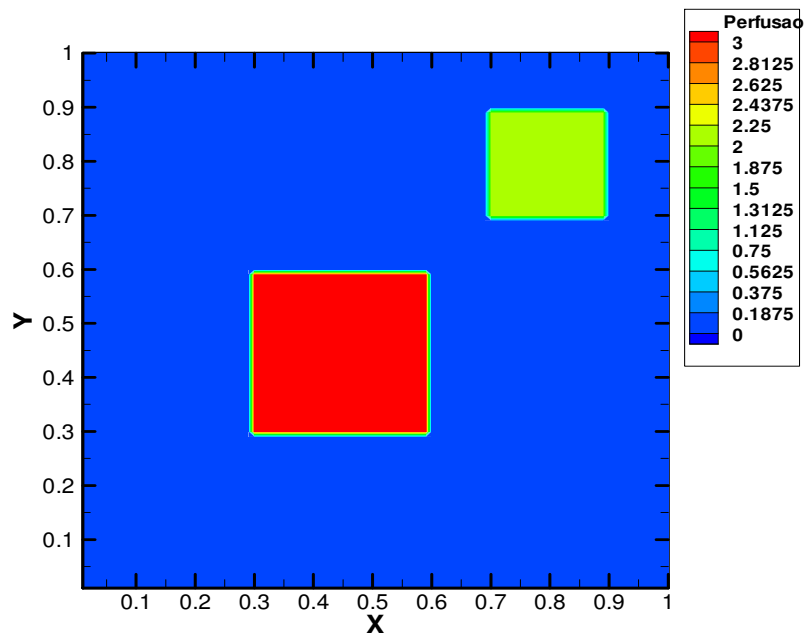


FIG. 5.62 Função Quadrada (Bidimensional – 2 quadrados)

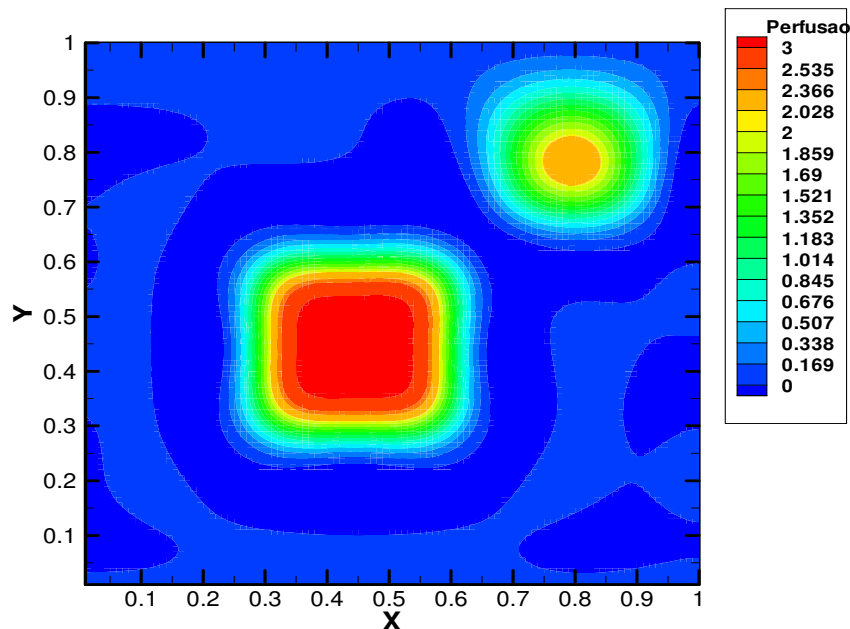


FIG. 5.63 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio

A estimativa exposta na FIG. 5.63 mostrou-se bastante satisfatória, na identificação dos tumores, posicionando os sensores em todos os pontos do tecido. Outra informação importante que a FIG. 5.63 traz, diz respeito à dificuldade de alcançar o valor da perfusão do tumor nos pontos de descontinuidade da função. Verifica-se na FIG.5.64, um aumento repentino do funcional objetivo após 1000 iterações.

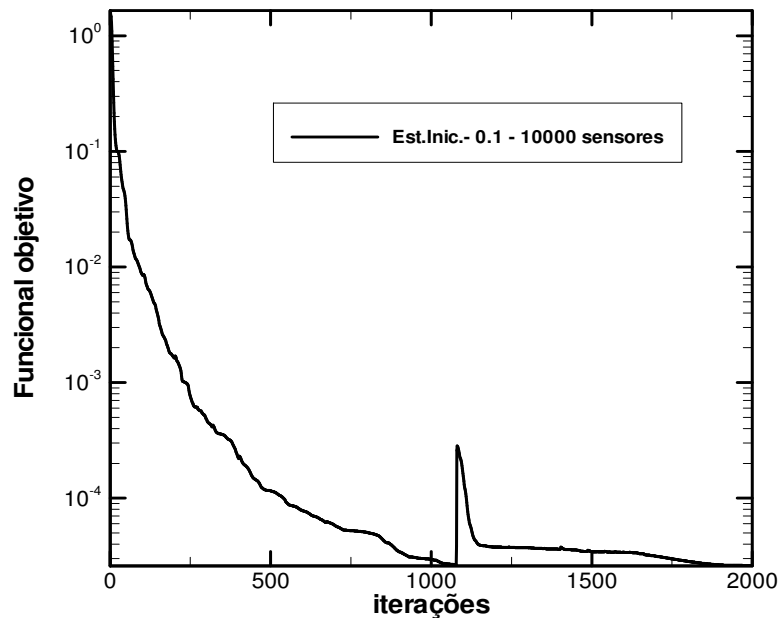


FIG. 5.64 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com sensores em todos os pontos do domínio

Diferentemente do caso anterior, a situação tratada na FIG. 5.65 consiste no uso de 199 sensores térmicos, ordenados da seguinte forma: posicionaram-se 100 sensores a 3 mm abaixo da superfície, distanciados a 0.3 mm um do outro e 99 sensores foram dispostos de maneira mais intrusiva, no meio do tecido ($X = 0.5$) para diferentes profundidades (Y). O resultado revela que a estimativa não foi satisfatória. Todavia, é possível perceber um aumento da perfusão sanguínea em duas regiões, comparada a perfusão do restante do tecido.

O resultado a seguir, exposto pela FIG. 5.66, distingue-se do anterior pela retirada dos 99 sensores localizados no meio do tecido. Tal ação foi suficiente para gerar uma estimativa ruim, visto que as maiores variações ocorridas em torno de 12 mm abaixo da superfície, não foram capturadas. De fato, como pode ser observado na TAB. 5.16, o erro RMS foi o dobro do mesmo obtido para o caso com sensores em todos os pontos. Ainda, nesta figura, pode-se observar que a perfusão sanguínea para o tumor menor ($P_f = 2$) foi identificada. Porém, as dimensões do mesmo não foram detectadas.

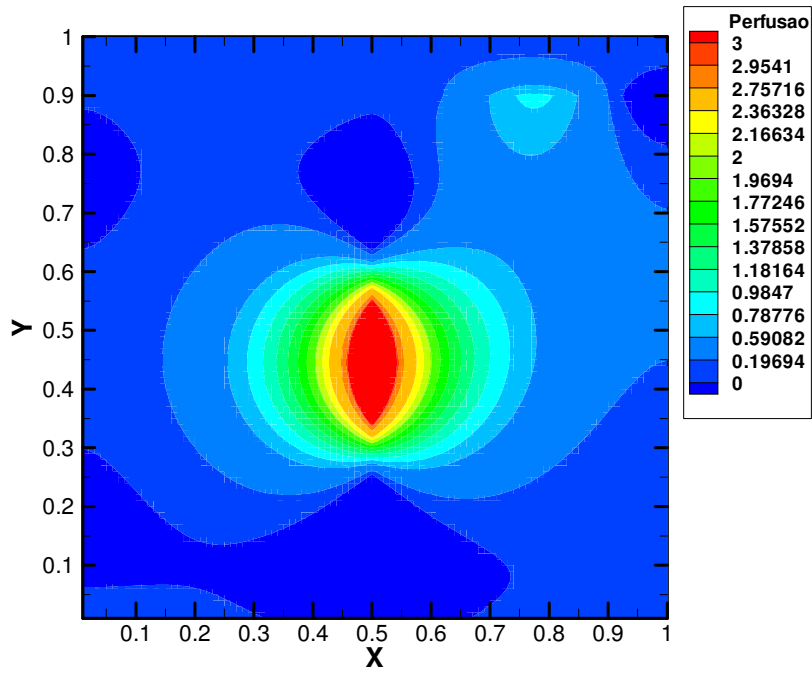


FIG. 5.65 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com **199 sensores e malha 100x100**

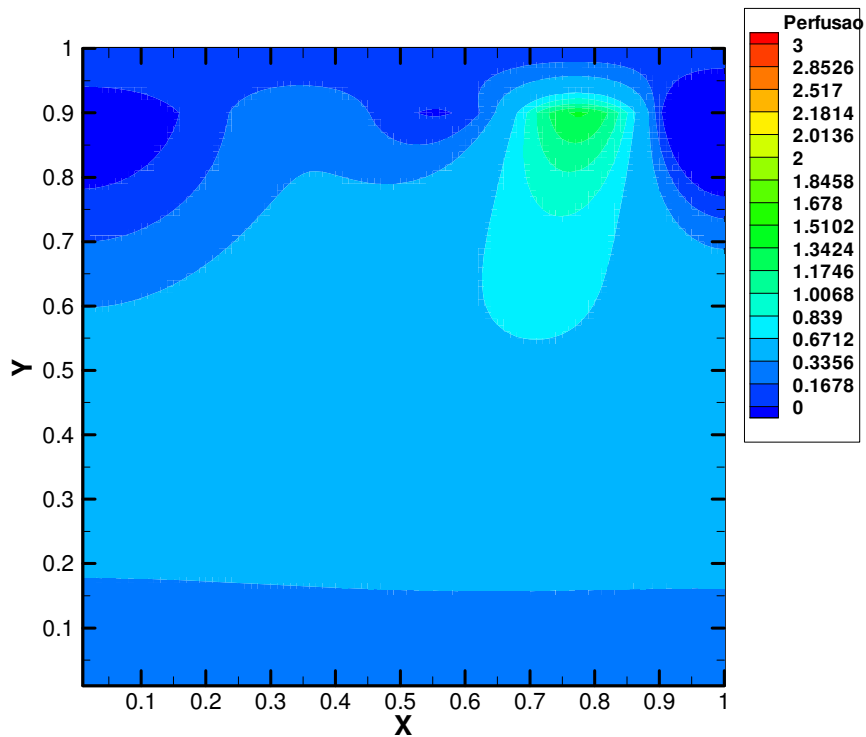


FIG. 5.66 Estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com **100 sensores e malha 100x100**

A redução do funcional objetivo com respeito ao número de iterações realizadas, para os casos para 199 e 100 sensores, pode ser acompanhada nas FIGs. 5.67 e 5.68, respectivamente.

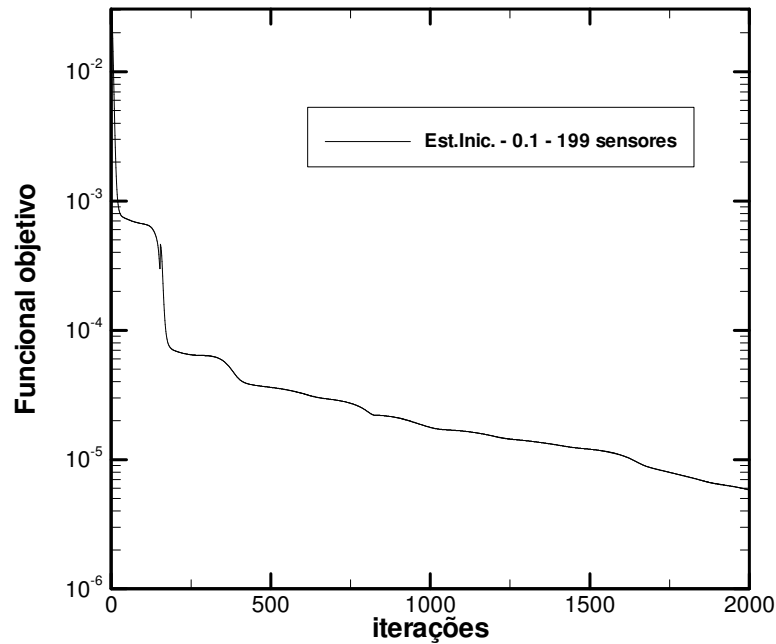


FIG. 5.67 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 199 sensores e malha 100x100

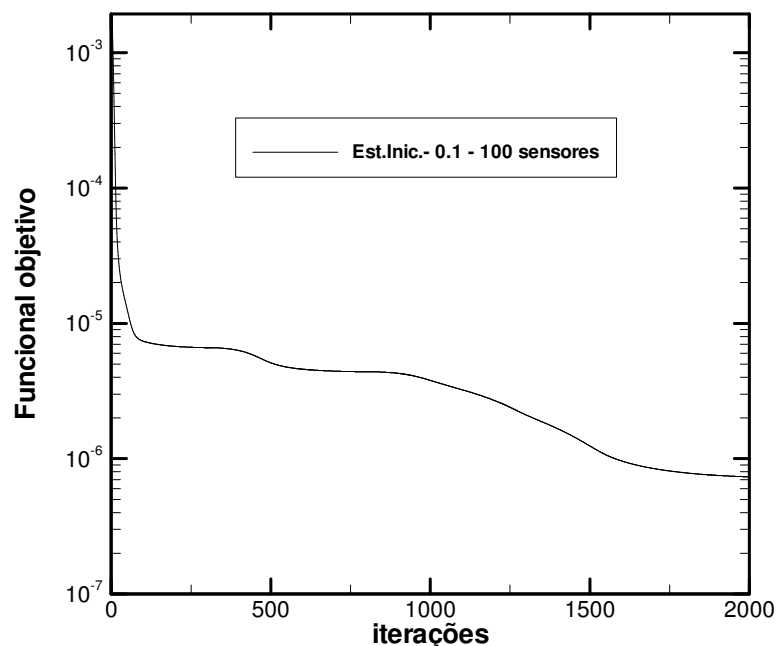


FIG. 5.68 Evolução do funcional objetivo para a estimativa da perfusão com forma funcional quadrada (bidimensional), com 100 sensores e malha 100x100

Nota-se que o valor inicial do funcional na FIG. 5.67 é maior do que o da FIG. 5.68. Isto decorre do efeito da quantidade de sensores, pois quanto maior o número de sensores maior é

quantidade de termos usados no somatório da EQ. 5.1. Assim, espera-se que com mais sensores a minimização exija mais iterações. O que justifica o fato do funcional ter atingido um valor menor na FIG. 5.68, em relação ao funcional obtido com 199 sensores, mostrado na FIG. 5.67.

É válido ressaltar que nenhum dos três casos, o funcional objetivo evoluiu para um valor constante, o que demonstra que com mais iterações fosse possível alcançar uma minimização melhor.

Os erros RMS apresentados na TAB. 5.16 confirmam os indícios já apresentados nas estimativas das figuras anteriores. Desta forma, torna-se evidente o efeito do aumento de sensores na melhora da estimativa.

TAB. 5.16 Estimativa da perfusão sanguínea com forma bidimensional para diversos arranjos de sensores

Função Quadrada – 2 tumores – Sem ruído				
Função	Sensores	Estimativa Inicial 0.1 Malha 100x100, G = 2.48 e Tol. = 10⁻¹¹		Tempo computacional
		Erro RMS	Iterações	
Bidimensional	10000	0.4235	2000	60h 54min
	199	0.6141	2000	42h 36min
	100	0.8658	2000	42h 36min

Por fim, foi estudada uma situação real, tendo em vista as limitações impostas pela modelagem matemática do problema, quanto à estimativa bidimensional. Assim, foram efetuadas duas simulações, para as quais a função exata possui uma variação degrau. O valor de base da função corresponde a perfusão do tecido sadio, equivalente a uma perfusão igual a 6, que corresponde dimensionalmente a $8.33 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} (\text{m}_s/\text{m}_t)^3$ (VULPEN et al., 2002). Como não foram encontrados dados corretos na literatura, em relação ao valor do coeficiente de perfusão de um tumor na próstata, foram simulados dois casos diferentes, onde o valor adimensional da perfusão foi tomado como 12 e 60.

Manteve-se a localização de 100 sensores a 3 mm abaixo da camada mais externa do tecido, pois segundo VULPEN et al. (2002), é possível determinar a perfusão sanguínea de um tumor submetido a hipertermia, com uma média de 89 sensores ou até no máximo 112 sensores. Considerou-se como 30 minutos a duração do tratamento. Os sensores térmicos monitoraram as medidas a cada 10 segundos, ou seja, a uma frequência de 0.1 Hz. Nas medidas simuladas foram atribuídos erros experimentais de 0.01% da temperatura máxima medida e a estimativa inicial para o coeficiente de perfusão foi igual a 4.5.

A estimativa para o tumor com $Pf = 12$, exibida na FIG. 5.69 foi razoavelmente boa, apresentando alguns desvios significantes entre as funções e um erro RMS de 1.1037.

Na FIG. 5.70 a estimativa para $Pf = 60$ sofreu uma maior influência dos efeitos das medidas com ruídos, apresentando um erro RMS de 10.2471.

O gráfico mostrado na FIG. 5.71 representa a redução do funcional objetivo ao longo do processo iterativo, tendo como critério de parada o princípio da máxima discrepância, ou 2000 iterações, caso esta não seja atingida. Verifica-se que o funcional para o caso $Pf = 12$ conseguiu ser minimizado. Por outro lado, o funcional não foi minimizado satisfatoriamente para a situação em que $Pf = 60$. Diante disso e em posse dos erros RMS, concluí-se que quanto maior for a variação entre os patamares superior e inferior da função quadrada, mais difícil é a recuperação dos mesmos.

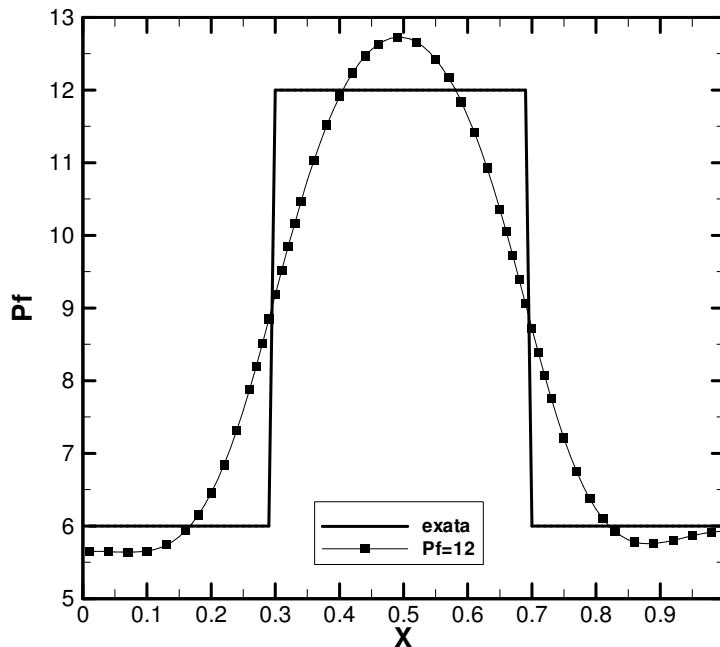


FIG. 5.69 Estimativa da perfusão de um tumor na próstata, com 100 sensores, $Pf = 12$ e

$$\sigma = 0.01 \theta_{\max}$$

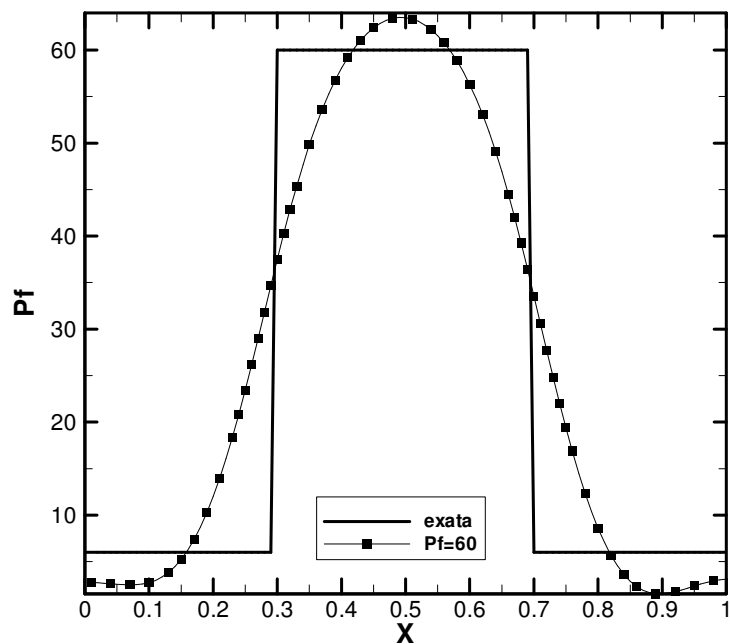


FIG. 5.70 Estimativa da perfusão de um tumor na próstata, com 100 sensores, $Pf = 60$ e $\sigma = 0.01 \theta_{\max}$

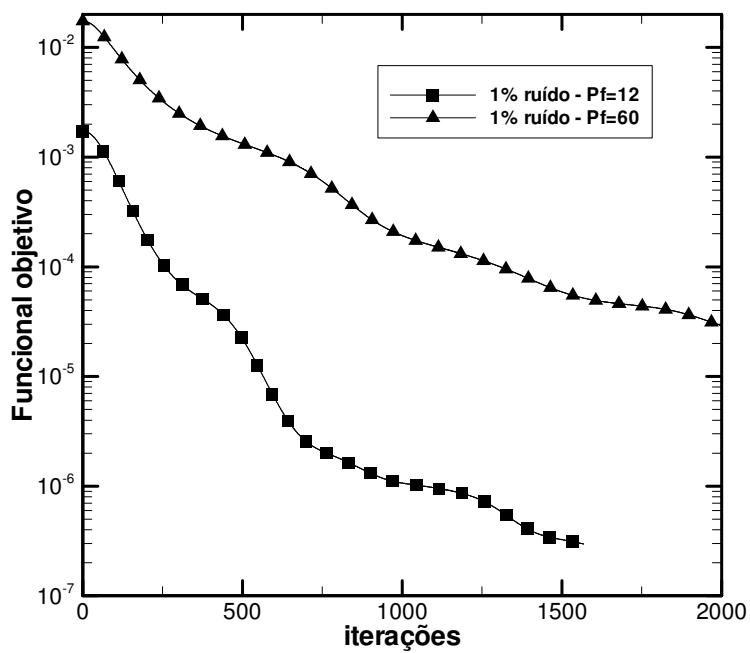


FIG. 5.71 Evolução do funcional objetivo para a estimativa do tumor na próstata

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

A pesquisa realizada neste trabalho consistiu no estudo da identificação da perfusão sanguínea em um tecido com neoplasia maligna, submetido, ou não, a um tratamento por hipertermia, objetivando a melhoria da qualidade do tratamento por hipertermia, em tumores não-operáveis, visto que, o fornecimento das variações precisas da perfusão sanguínea na zona afetada de um tecido orgânico, proporciona uma gestão mais adequada do dispositivo externo, responsável pela execução do gradiente de temperatura durante o processo. Além disso, a implementação de técnicas de problemas inversos foram requeridas neste desenvolvimento.

A metodologia empreendida baseou-se, a princípio, na validação do código computacional, referente à solução analítica do problema proposto. Anteriormente à estimativa de parâmetro, realizou-se uma análise de sensibilidade, pois esta desempenha um papel central no processo de estimativa, avaliando a influência de determinado parâmetro de interesse na solução do problema.

O Problema Inverso foi formulado como um problema de minimização. Para o referido problema optou-se pelo uso dos seguintes métodos: determinísticos (Levenberg-Marquadt Algoritmo (LM), Método do Gradiente Conjugado (CG) e Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)) e heurísticos (Evolução Diferenciada (DE) e Enxame de Partículas (PS)). A robustez dos métodos foi verificada com a inserção de erros experimentais de até 10% da temperatura local, nas medidas simuladas.

No processo de estimativa da perfusão com forma funcional constante, senoidal, quadrada e degrau foi empregado o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto. Mediante validação da solução numérica via Método de Volumes Finitos.

As etapas finais compreendem o estudo da influência do número de sensores utilizados, bem como o posicionamento dos mesmos na recuperação da perfusão com forma funcional unidimensional e bidimensional. Para tal, foram introduzidos diferentes arranjos de sensores térmicos a 3 mm abaixo superfície do tecido, monitorando medidas com desvio-padrão de 1 e 5 %. Além disso, visando a representatividade de uma situação real, foram adotadas funções cuja variação da perfusão estivesse compreendida em uma faixa, que abrange no mínimo a perfusão de um tecido sadio e no máximo a perfusão de um tecido com câncer.

De posse dos resultados para a estimativa de parâmetro, verificou-se que os métodos determinísticos e heurísticos demonstraram melhor desempenho na identificação de tumores superficiais. Por exemplo, na pele, onde os tumores possuem uma perfusão sanguínea baixa. Fato este, confirmado pela análise de sensibilidade realizada para estimativa de parâmetro, onde foi aferido que uma maior vascularização está associada ao aumento da imprecisão na estimativa.

Para as estimativas da perfusão sanguínea com variação unidimensional constatou-se claramente que determinadas características da função, tal como a suavidade ou pontos de discontinuidades, podem gerar ou não, um aumento representativo na precisão dos resultados. Além disso, o Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto apresentou um bom desempenho, visto que foi possível recuperar o comportamento das funções com sensores localizados próximos à superfície do tecido para medidas contendo erros experimentais de até 1% do valor local da temperatura.

Diante das estimativas para a perfusão sanguínea com variação bidimensional, observou-se que foi possível com a estimativa alcançada, detectar a localização do(s) tumor(es) com sensores em todos os pontos do tecido. Em contrapartida, o posicionamento de sensores próximo a superfície do tecido não foi suficiente para identificar a região do tecido cancerígeno. Dessa forma, este procedimento é adequado para identificação de tumores superficiais ou intersticiais, posicionando-se sensores em todos os pontos do tecido. Sendo assim, é possível identificar tumores associados a baixos valores de perfusão (pele) ou a altos valores de perfusão (mama, próstata, rim etc).

Para dar continuidade a esta investigação, sugere-se, entre outros, os seguintes pontos para possíveis pesquisas futuras que este trabalho motiva:

- Alteração da modelagem do problema, modificando as condições de contorno de forma a adotar sensores nos contornos.
- A implementação do Método do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto na versão Powell-Beale, com intuito de obter uma melhor minimização do funcional objetivo.
- Realizar estimativas da função com dependência temporal.
- Estender o problema estudado para o caso tri-dimensional com propriedades termofísicas variáveis.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRALE. Associação Brasileira de Linfoma e Leucemia. Disponível: <http://www.abrale.gov.br> [capturado em 26 mar. 2008]
- ANGELINE, P. Evolutionary optimization versus particle swarm optimization: philosophy and performance differences. In: THE SEVENTH ANNUAL CONFERENCE ON EVOLUTIONARY PROGRAMMING, 1998.
- AZEVEDO, M. D. B., GUEDES, R. O. e NETO, F. S. Analytical solution to the two dimensional transient bioheat equation with convective boundary conditions. In: 11° BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL SCIENCES AND ENGINEERING – ENCIT, 2006.
- BECKER, C., PAZOS, R. E. P. e CROSSETTI, G. L. Método de gradiente conjugado na otimização de problemas modelados na catalização de polímeros. In: XXXI - CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL - CNMAC, 2008.
- BRIEN, K. T., O' MEKKAoui, A. M. Numerical simulation of the thermal fields occurring in the treatment of malignant tumors by local hyperthermia. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1993. p. 247-253.
- BRIX, G., SEEBASS, M., HELLWING, G. e GRIEBEL, J. Estimation of heat transfer and temperature rise en partial-body regions during MR procedures: An analytical with respect to safety considerations. **Magnetic Resonance Imaging**, 2002. p. 65-76.
- CARDOSO, I. C. R. A. **Avaliações da radioterapia de megavoltagem, braquiterapia por implantes de sementes de Iodo-125 e/ ou associações, através de monitoração de parâmetros preditivos e de antígeno prostático específico (PSA) de pacientes portadores de câncer de próstata.** Dissertação (Mestrado em Ciências e Técnica Nucleares) - Escola de Engenharia da UFMG, Belo Horizonte, 2003.
- CARMO, E. J. S., FONSECA, C. A. e RODRIFGUEZ, A. J. L. Atualizações em câncer: tratamento. In: III Seminário de Iniciação Científica e I Jornada de Pesquisa e Pós-Graduação da UEG - Anápolis, GO, 2005.

- CHAN, C. L. Boundary element method analysis for the bioheat transfer equation. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1991. p. 358-365.
- COLAÇO, M.J., ORLANDE, H.R.B. e DULIKRAVICH, G.S. Inverse and optimization problems in heat transfer, invited lecture. In: 10th BRAZILIAN CONGRESS OF THERMAL SCIENCES AND ENGINEERING – ENCIT, Rio de Janeiro, RJ, 2004.
- COLAÇO, M. J., ORLANDE, H. R. B. DULIKRAVICH, G. S. e RODRIGUEZ, F. A. A comparison of two solution techniques for the inverse problem of simultaneously estimating the spatial variations of diffusion coefficients and source terms. In: INTERNATIONAL MECHANICAL ENGINEERING CONGRESS & EXPOSITION WASHINGTON, D.C., USA, p. 16-21, 2003.
- DENG, Z.S. e LIU, J. Analytical study on bioheat transfer problems with spatial or transient heating on skin surface or inside biological bodies. **Journal of Biomechanical Engineering**, 2002. p. 638-649.
- DISANT'AGNESE, PA. Divergent neuroendocrine differentiation in prostatic carcinoma. **Seminars in Diagn Pathol** , 2000. v.17, p. 149-161.
- GIERING, K., LAMPRECHT, I., MINET, O. e HANDKE, A. Determination of specific heat capacity of healthy and tumorous human tissue. **Thermochimica Acta**, 1995. v. 251. p. 199-205.
- IMSL Libray, 10 ed., NBC Bldg., 7500 Ballaire Blvd., Houston, Texas, 1997.
- INCA. Instituto Nacional do Câncer. Disponível: <http://www.inca.gov.br> [capturado em 26 mar. 2008]
- KLEINMAN, A. M. e ROERMER, R. B. A direct substitution, equation error technique for solving the thermographic tomography problem. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1983. p. 237-243.
- LIAUH, C. T. e ROEMER, R. B. A semilinear state and parameter estimation algorithm for inverse hyperthermia problems. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1993. p. 257-261.
- LIMA, R. C. F., LYRA, P. R. M. e GUIMARÃES, C. S. C. **Modelagem computacional da biotransferência de calor no tratamento por hipertermia em tumores de**

duodeno através do método de volumes finitos em malhas não estruturadas. Revista Brasileira de Engenharia Biomédica, v. 22, n. 2, p. 119-129, agosto 2006.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluídos computacional**, LTC- Livros Técnicos e Científicos, Editora S.A, Rio de Janeiro, RJ, 2004.

OZISIK, M. N. **Heat Conduction**, Wiley Interscience, 1980. p. 686.

OZISIK, M. N. e ORLANDE, H. R. B. **Inverse heat transfer: fundamentals and applications**. Taylor & Francis, New York, NY, 2000.

PENNES, H.H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. **Journal of Applied Physiology**, 1948. p. 93-122.

PRESS, W. H. FLANNERY, B. P., TEUKOLSKY, S. A. e VETTERLING, W. T. **Numerical recipes: The art of scientific computation**, Cambridge University Press, 1986.

RAWNSLEY, R. J., ROERMER, R. B. e DUTTON, A.W. The simulation of discrete vessel in experimental hyperthermia. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1994. p. 256-262.

REN, Z. P., LIU, J e WANG, C.C. Boundary element method (BEM) for solving normal and inverse bio-heat transfer problem of biological bodies with Complex shape. **Journal of Thermal Science**, 1995. p. 177-184.

RIVOLTA, B., INZOLI, F., MANTERO, S. e SEVERINE, S. Evaluation of temperature distribution during hyperthermic treatment in biliary tumors: a computational approach. **Journal of Biomechanical Engineering**, 1999. p. 141-147.

SANTOS, S. K. S. L., LIMA, R. C. F., CANDEIAS, A. L. B., CANUTO, G. H., e VIEIRA, J. W. Análise do campo de temperaturas em tumores de próstata submetidos a hipertermia utilizando o método dos volumes finitos e desenvolvimento de uma metodologia usando técnicas Monte Carlo a ser usada para a validação da análise numérica. In: 8º CONGRESS IBEROAMERICANO DE ENGENIERIA MECÂNICA, Peru, p. 543-552, 2007.

TRUCU, D., INGHAM, D. B. e LESNIC, D. The inverse coefficient identification problem in bio-heat-transient flow equation. In: DESIGN AND OPTIMIZATION SYMPOSIUM, Miami, Florida, U.S.A, p. 16-18, 2007.

VULPEN, M., RAAYMAKERS, B. W., LEEUW, A. A., KAMER, J. B., MOORSELAAR, R. J., HOBDELINK, M.G., BATTERMANN, J. J. e LAGENDIJK, J. J. Prostate perfusion in patients with locally advanced prostate carcinoma treated with different hyperthermia techniques. **Journal of Urology**, 2002. p.1597-1602.