



**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO TÉRMICA,
UTILIZANDO A TÉCNICA DE VOLUMES FINITOS,
PARA OTIMIZAÇÃO DO MÉTODO FLASH LASER**

Pablo Andrade Grossi

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – pabloag@yahoo.com

Roberto Márcio de Andrade

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – roberto@demec.ufmg.br

Ricardo Alberto Neto Ferreira

Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN-CNEN, Cidade Universitária, Pampulha, CEP: 30.123-970 - Belo Horizonte, Minas Gerais – ranf@urano.cdtm.br

Márcio Ziviani

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – ziviani@demec.ufmg.br

Resumo: O método Flash Laser vem sendo largamente utilizado na determinação de propriedades termofísicas de materiais em função das suas inúmeras vantagens, tais como, tempo reduzido para realização do ensaio, amostra de pequena dimensão, ampla faixa de medição, possibilidade de medição simultânea da difusividade térmica, calor específico e condutividade térmica. Entretanto, o método, originalmente proposto, utiliza a solução analítica da equação unidimensional de difusão térmica em uma amostra, submetida a um impulso inicial de calor e sujeita a condições de contorno adiabáticas. As correções propostas na literatura, impostas pelas condições experimentais de tempo de pulso finito e trocas térmicas com o ambiente, partem do ajuste do resultado analítico à resposta experimental. Neste trabalho utilizou-se a técnica de volumes finitos para resolver numericamente a equação de difusão térmica bidimensional em uma amostra cilíndrica, considerando as condições iniciais e de contorno mais adequadas às condições experimentais do método Flash Laser.

Palavras chaves: método Flash de Laser, difusão térmica, volumes finitos.

1. INTRODUÇÃO

O crescente aparecimento de novos materiais (metálicos, cerâmicos, compósitos, biomateriais etc.), gerou um aumento na demanda pela determinação precisa e confiável das suas propriedades termofísicas (difusividade térmica, condutividade térmica e calor específico).

Vários métodos podem ser utilizados para a medição de propriedades termofísicas: os métodos que utilizam o fluxo de calor em regime permanente (métodos de Angstrom e suas modificações, termoeletrico e o de onda radial); e os métodos que utilizam o fluxo de calor em regime transiente

(métodos da barra, da placa semi-finita, do fluxo de calor radial, da alta intensidade de arco, da haste aquecida eletricamente e o método do Flash de Laser), (Holman 1994, Ismail 2000). Entretanto, alguns inconvenientes, como longo tempo requerido na realização das medições, necessidade de amostras grandes do material, elevado percentual de erro de medição, vem impondo limitações na aplicação da maioria destes métodos.

O método Flash Laser originalmente proposto Parker et. al. em 1961, utiliza a solução analítica da Equação de Difusão Térmica unidimensional em uma amostra em forma de pastilha, com uma das faces submetida a um impulso de energia em um tempo infinitesimal, enquanto a outra é considerada isolada.

O perfil de temperatura na face isolada é medido durante todo o período de teste e a difusividade térmica α é determinada pela expressão abaixo

$$\alpha = \frac{1,37L^2}{\pi^2 t_{1/2}}, \quad (1)$$

onde L é a espessura da amostra e $t_{1/2}$, o tempo necessário para a face isolada atingir 50% da temperatura máxima do processo.

O calor específico C_p é calculado a partir da expressão abaixo

$$C_p = \frac{Q_0}{\rho A L \Delta T_{\max}}, \quad (2)$$

onde Q_0 é a energia absorvida pela amostra, ΔT_{\max} a diferença de temperatura máxima na face isolada, A a área frontal da face, L a espessura e ρ a massa específica do material da amostra.

Finalmente, a condutividade térmica k é calculada pelo produto da difusividade térmica α , pela massa específica do material e pelo calor específico C_p . Desta forma,

$$k = \alpha \rho C_p. \quad (3)$$

As correções propostas na literatura, impostas pela condição experimental de tempo de pulso finito e trocas térmicas com o ambiente, partem do ajuste do resultado analítico à resposta experimental.

O método Flash Laser tem sido usado em materiais cujas difusividades térmicas variam de $0,1 \cdot 10^{-6}$ a $1.000 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ a temperaturas de 80 a 2.500 K, atendendo assim desde os materiais frequentemente utilizados na indústria até combustíveis nucleares, ligas diversas, cerâmicos, semicondutores, compósitos, líquidos, fibras de carbono, materiais reforçados com fibras, camadas individuais ou compósitos em camadas. Utiliza amostras pequenas de fácil preparo e os resultados são obtidos em poucos segundos.

A solução analítica da Equação de Difusão Térmica proposta por Parker (1961) apresenta limitações, devido às diversas simplificações que implicam em ajustes a posteriori requerendo, às vezes, correções de difícil implementação. Tais limitações surgem basicamente devido à dificuldade em se obter:

- o percentual de energia absorvida pela face frontal da amostra, (Takahashi, 1974; Degueldre et al, 1998; Takahashi e Murabayashi, 1975).
- a influência da forma do pulso de energia emitido pelo laser, (Parker et al, 1961).
- o efeito do tempo de pulso finito do laser, que teoricamente deve ser infinitesimal em relação ao tempo do transiente de temperatura na face oposta da amostra, (Cape e Lehman, 1963; Taylor e Cape, 1972; Heckman, 1973; Takahashi e Murabayashi, 1975).

- o aquecimento uniforme da amostra, (Takahashi e Murabayashi, 1975).
- a exata e precisa medição da variação de temperatura real na face oposta, (Taylor e Cape, 1972);
- a eliminação da troca de calor entre a amostra e o ambiente ou aplicação de métodos para correção quanto a este efeito, (Cowan, 1962; Cape e Lehman, 1963; Heckman, 1973).

Neste trabalho é apresentada uma solução numérica para a Equação de Difusão Térmica bidimensional em uma amostra cilíndrica, considerando as condições iniciais e de contorno mais adequadas às características do método de determinação de propriedades termofísicas de materiais utilizado pelo Laboratório de Medição de Propriedades Termofísicas de Materiais do Centro de Desenvolvimento de Tecnologia Nuclear (LMPT-CDTN).

São confrontados os perfis de temperatura da face oposta da amostra com o tempo, obtidos a partir da solução analítica, da solução numérica e de resultados experimentais para alumina recristalizada. São analisadas as influências do tempo de pulso finito do laser e da troca de calor entre a amostra e o ambiente, no perfil de temperatura da amostra e, conseqüentemente, nos valores das propriedades termofísicas.

2. SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO TÉRMICA

A Equação de Difusão Térmica em coordenadas axissimétricas em regime transiente é dada pela Equação 4:

$$\nabla(k\nabla(T(r, z, t))) = \rho c_p \frac{\partial T(r, z, t)}{\partial t} \quad (4)$$

onde ρ é a densidade do material, c_p é o calor específico do material e T é a sua temperatura.

Para o método Flash Laser, a condição inicial é:

$$T(r, z, 0) = T_0 \quad (5)$$

onde T_0 é a temperatura inicial da amostra.

A condição de contorno, no intervalo de tempo $0 \leq t \leq t_p$, onde t_p é o tempo de utilização do pulso na face de exposição em $x = 0$ é:

$$\begin{aligned} T(r, z, t_p) \Big|_{x=0} &= \frac{Q_0}{\rho C_p \delta} \\ T(r, z, t_p) \Big|_{x \neq 0} &= T_0 \end{aligned} \quad (6)$$

Para tempo acima de t_p , as superfícies trocam calor com o ambiente por convecção e radiação, e portanto em $x = L$ e $t > t_p$

$$-k\nabla T_s = Q_p \quad (7)$$

onde k é a condutividade térmica do material, T_s é a temperatura da superfície da amostra e Q_p é o calor dissipado para o ambiente.

A solução analítica proposta por Parker et al. (1961), apresenta as seguintes restrições: unidimensionalidade na direção axial, t_p infinitesimal quando comparado ao tempo total do ensaio e condição de contorno adiabática, ou seja, $Q_p = 0$ na equação 7. Estas hipóteses simplificadoras são as principais causadoras dos desvios nos valores finais das propriedades térmicas.

A solução numérica da Equação 4 proposta neste trabalho utiliza o método de Diferenças Finitas com formulação em Volumes de Controle - Método dos Volumes Finitos - (Maliska, 1995; Patankar, 1980). Nesta solução, consideram-se as condições iniciais e de contorno mais adequadas à realidade experimental do LMPT-CDTN quais sejam: tempo finito de pulso (t_p finito na Equação 6), e da existência de trocas térmicas entre a amostra e o ambiente ($Q_p \neq 0$ na Equação 6).

Realizando a discretização da Equação 4, tem-se:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (8)$$

onde

$$a_E = \frac{k_e \Delta r}{(\delta z)_e} \quad (9)$$

$$a_N = \frac{k_n \Delta z}{(\delta r)_n} \quad (10)$$

$$a_S = \frac{k_s \Delta z}{(\delta r)_s} \quad (11)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^0 \quad (12)$$

$$b = a_p^0 T_p^0 \quad (13)$$

$$a_p^0 = \frac{\rho c_p \Delta z \Delta r}{\Delta t} \quad (14)$$

onde k é a condutividade térmica do material, os índices E, W, N e S representam as localizações dos pontos nodais situados à esquerda, direita, acima e abaixo do ponto analisado, Δx é o tamanho do volume de controle na direção x , $\delta \theta$ é o comprimento angular do volume de controle, Δt é o incremento no tempo e d é a distancia entre os nós de volumes de controle consecutivos.

A simulação numérica permite substituir de uma só vez todas as outras técnicas utilizadas para correção dos resultados pois pode-se simular, com relativa facilidade, as condições iniciais e de contorno reais nas quais se está realizando o experimento.

3. DESCRIÇÃO DA BANCADA EXPERIMENTAL

A Figura (1) apresenta, esquematicamente, a bancada experimental do LMPT-CDTN. A bancada é composta, basicamente, por um laser de CO₂, um porta amostra posicionado no interior de um pequeno forno tubular e um sistema de medição de temperatura.

O laser de CO₂ (comprimento de onda de 10,6 μm , potência de até 25 W, emissão contínua e diâmetro do feixe de 8 mm) é responsável pela aplicação do pulso de energia na face frontal da amostra (duração mínima de 0,1 s). Para garantir um fluxo de calor unidimensional, a amostra deve possuir o mesmo diâmetro do feixe do laser (8 mm).

O forno possui capacidade de aquecimento até 1700°C, com controle realizado por um controlador PID que alimenta uma resistência de aquecimento de Platina com 30% de Ródio. Desta forma, é possível realizar a medição das propriedades térmicas de materiais em função da temperatura.

Grossi et al. (2001) apresenta maiores detalhes da bancada e do processo de medição de propriedades termofísicas utilizado pelo LMPT-CDTN.

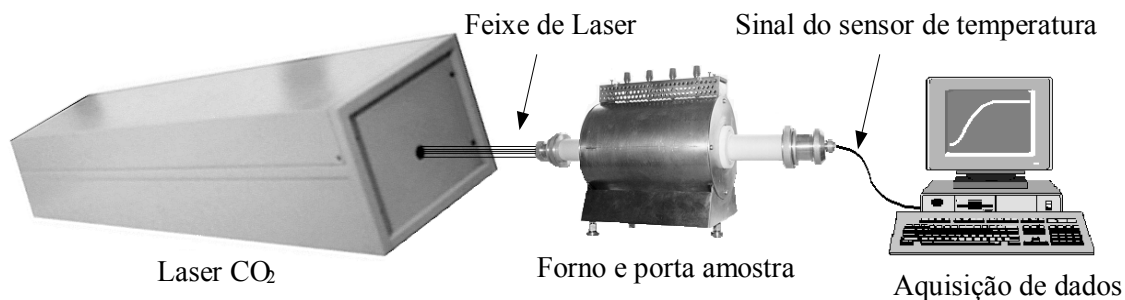


Figura 1 - Esquema do Sistema de Medição de Propriedades Termofísicas de Materiais através do Método Flash de Laser do LMPT-CDTN.

4. RESULTADOS

A solução numérica da Equação 4 foi obtida através do programa Conduct (Patankar, 1980) e o método de interpolação usado foi o de diferenças centrais.

Foi realizado o teste de malhas e concluiu-se por uma discretização com 20 malhas na direção axial e 20 malhas na direção radial. O erro cometido em função do método numérico utilizado foi determinado confrontando-se os resultados da solução analítica de Parker com os resultados numéricos obtidos utilizando as mesmas restrições impostas por Parker. O desvio percentual máximo encontrado foi de 0,06%, o desvio médio percentual foi de 0,01%, indicando uma excelente concordância.

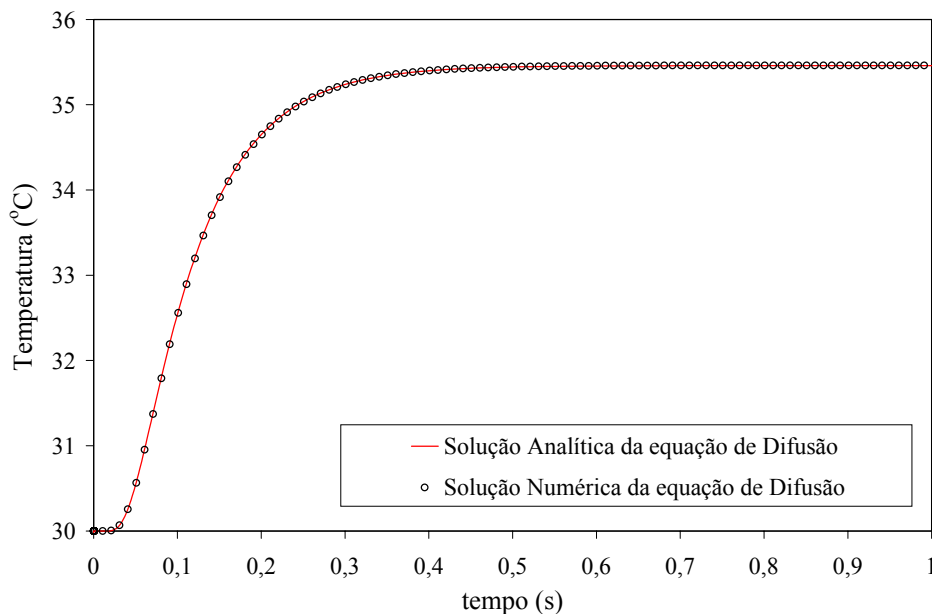


Figura 2 - Comparação entre as soluções analítica e numérica da Equação de Difusão Térmica considerando condição inicial temperatura prescrita e condição de contorno adiabática.

A Figura (3) apresenta os resultados da simulação sujeita às restrições anteriores, à exceção do tempo de pulso t_p , considerado finito. À medida que t_p aumenta, o perfil de temperatura real se afasta da curva teórica, t_p infinitesimal, subestimando o valor da difusividade térmica e, conseqüentemente, da condutividade térmica.

Na Figura (4) são comparados os resultados obtidos por Parker e a solução numérica desenvolvida com as restrições já citadas, a menos da condição de isolamento das superfícies, que neste caso foram submetidas a diversos coeficientes de dissipação. As diversas curvas estão associadas a valores crescentes do coeficiente global de troca de calor. As trocas térmicas provocam uma diminuição do valor da temperatura máxima da face oposta da amostra. Esta redução subestima o valor do calor específico e, conseqüentemente, da condutividade térmica do material.

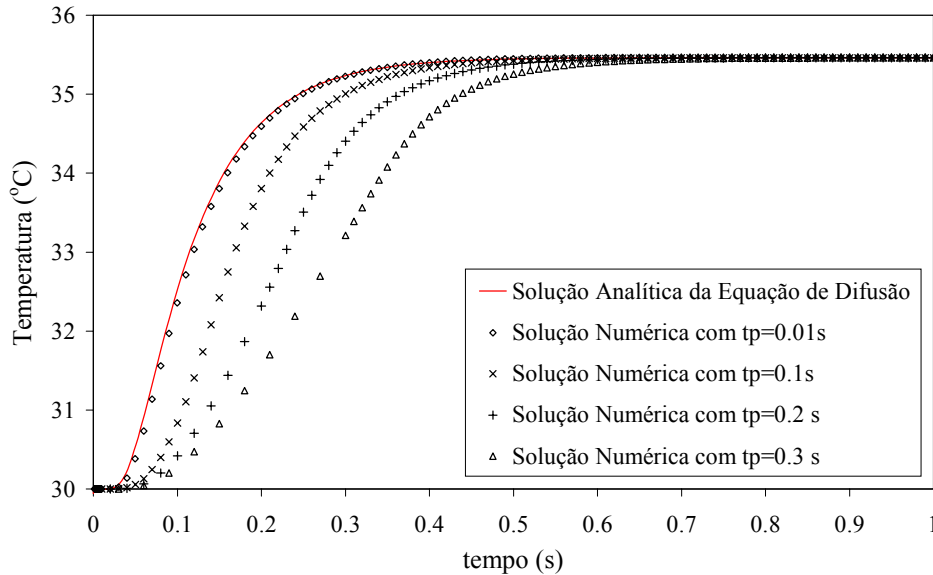


Figura 3. Solução numérica da Equação de Difusão Térmica variando o tempo de aplicação do pulso de energia na face frontal da amostra, t_p .

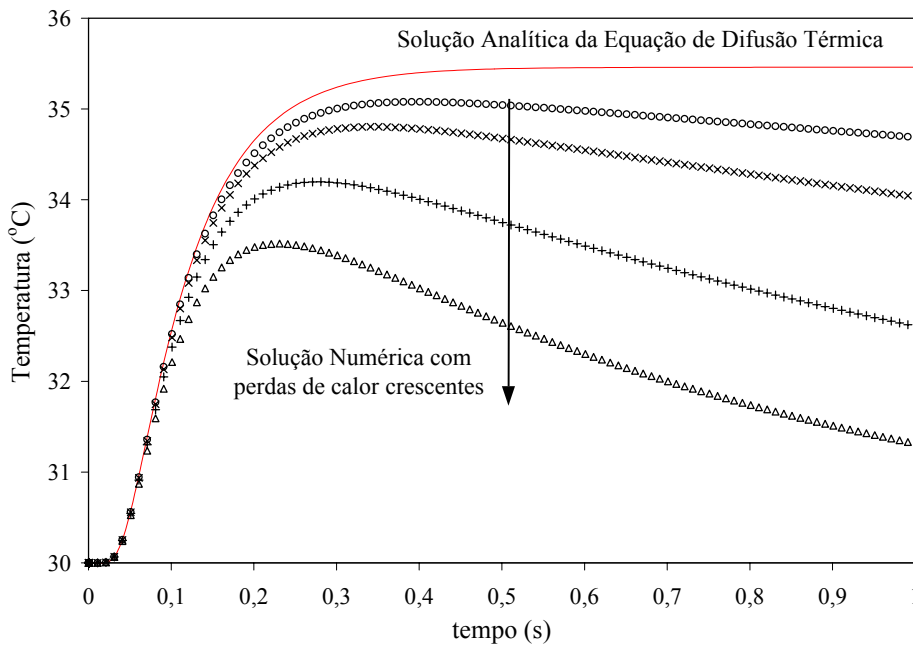


Figura 4. Solução numérica da Equação de Difusão Térmica introduzindo como condições de contorno a troca térmica entre a amostra e o ambiente do forno.

Finalmente a Figura (5) confronta os resultados experimentais para alumina recristalizada e os obtidos através da simulação numérica da Equação 4 sem as restrições anteriormente citadas e

impostas na solução de Parker. Foi mantida, para fins de referência, a solução analítica da Equação 4 apresentada na Figura 2.

As principais fontes de erro dos resultados experimentais referem-se à medição do tempo de pulso e à qualidade da medição dinâmica de temperatura, cujos valores ainda não completamente avaliados. Confrontando-se os resultados da solução analítica de Parker com os resultados experimentais, o desvio percentual máximo foi de 6,64% e médio de 4,05%. Confrontando-se os resultados da solução numérica do modelo matemático proposto, com condições iniciais e de contorno reais, com os resultados experimentais, o desvio percentual máximo foi de 5,75% e médio de 2,23%. Estes resultados indicam uma melhoria significativa com a solução proposta no presente trabalho em relação à solução de Parker.

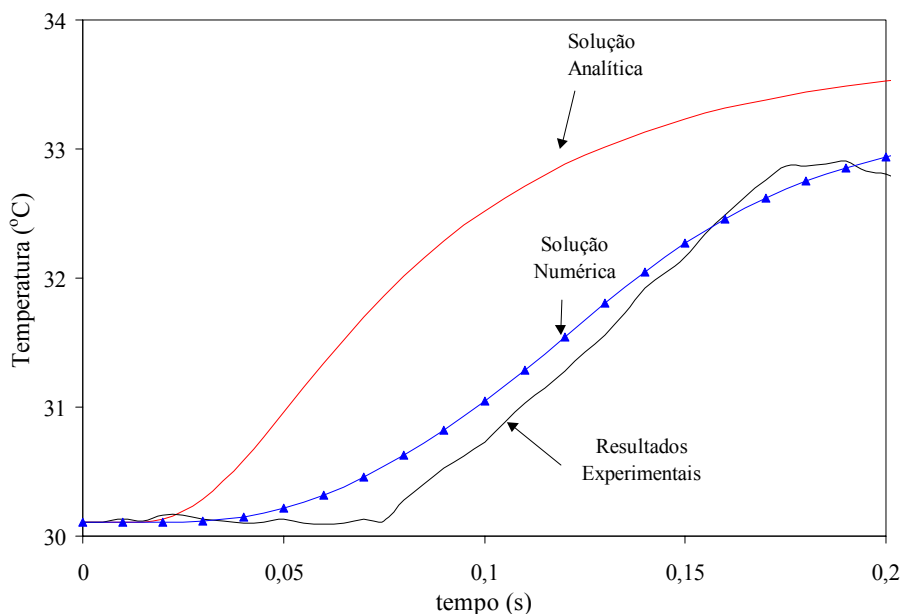


Figura 5 –Confronto entre a solução analítica da Equação de Difusão Térmica e os resultados experimentais.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho é apresentada uma solução numérica para a Equação de Difusão Térmica bidimensional em uma amostra cilíndrica, através do método de Diferenças Finitas com formulação em Volumes de Controle (Método dos Volumes Finitos), considerando as condições inicial e de contorno mais adequadas às exigidas do método Flash de Laser na determinação de propriedades termofísicas de materiais utilizado pelo LMPT-CDTN: tempo de pulso finito do laser e troca de calor entre a amostra e o ambiente.

São confrontados os perfis de temperatura da face oposta da amostra com o tempo obtidos a partir da solução analítica, da solução numérica e de resultados experimentais para alumina recristalizada.

As soluções analítica e numérica da Equação de Difusão Térmica unidimensional, para condição inicial de temperatura prescrita e condição de contorno adiabática, apresentaram um desvio percentual médio de 0,01%, demonstrando que a solução numérica obtida apresenta-se bastante satisfatória comparada à solução analítica.

A partir da solução numérica da Equação de Difusão Térmica bidimensional, foram obtidos resultados simulados do perfil de temperatura da face oposta da amostra para diversos tempos de pulso e diferentes coeficientes globais de troca de calor entre a amostra e o forno. Os valores da difusividade térmica e, conseqüentemente, da condutividade térmica são fortemente afetados pelo

tempo de pulso do laser. Os valores da capacidade térmica e, conseqüentemente, da condutividade térmica são fortemente afetados pelo coeficiente global de troca térmica entre a amostra e o ambiente.

A solução analítica de Parker, e a solução numérica da Equação de Difusão Térmica com condições iniciais e de contorno reais, apresentaram, respectivamente, desvios percentuais médios de 4,05% e 2,23%, quando comparadas aos resultados experimentais, indicando uma melhoria significativa na solução da Equação de Difusão Térmica para otimização do Método Flash Laser.

6) REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Cape, J. A. and Lehman, G. W., 1963, "Temperature and Finite Pulse-Time Effects in the Flash Method for Measuring Thermal Diffusivity", *J. Appl. Phys.*, 34, 1909.
- Cowan, R. D., 1962, "Pulse Method of Measuring Thermal Diffusivity at High Temperatures", *Appl. Phys.*, 34, 926.
- Degueldre, C., Takano, M., Ohmichi, T., Fukuda, K., Heimgartner, P. and Graber, T., 1998, "Energy Transfer and Thermal Conductivity through Inert Matrix and Nuclear Fuel Analogous Materials", *JAERI, Ibacri.*, 267(1-2), 274.
- Grossi, P. A., Ferreira, A. N. e Andrade, R. M., 2001, "Bancada Experimental para Medição de Propriedades Termofísicas de Sólidos pela Técnica Flash Laser", *Anais do 16º Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Vol. 2, Uberlândia, Brasil*, pp. 269-279.
- Holman, J.P., 1994, *Experimental Methods for Engineers*, McGraw-Hill Int. Ed, 6th ed..
- Heckman, R. C., 1973, "Finite Pulse-Time and Heat-Loss Effects in Pulse Thermal Diffusivity Measurements", *J. Appl. Phys.*, 44, 1455.
- Ismail, K.A.R., Gonçalves, M.M., Bevenuto, F.J., 1998, *Instrumentação Básica para Engenharia*.
- Maliska, C. R., 1995, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.. Rio de Janeiro.
- Parker, W. J. et al, 1961, "Flash Method of Determining Thermal Diffusivity, Heat Capacity and Thermal Conductivity", *J. Appl. Phys.*, 32, 1679.
- Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publish. Corp..New York.
- Takahashi, Y., 1974, "Heat Capacity Measurements of Nuclear Materials by Laser Flash Method", *J. Nucl. Mater.*, 51, 17.
- Takahashi, Y. and Murabayashi, M., 1975, "Measurement of Thermal Properties of Nuclear Materials by Laser Flash Method", *Nucl.Sci. Technol.*, 12[3], 133.
- Taylor, R. E. and Cape, J. A., 1964, "Finite Pulse-Time Effects in the Flash Diffusivity Technique", *Appl. Phys. Lett.*, 5, 212.

7. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído no seu trabalho

THERMAL DIFFUSION EQUATION SOLUTION, USING THE FINITE VOLUME TECHNIC, FOR OTIMIZATION OF THE FLASH LASER METHOD

Pablo Andrade Grossi

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – pabloag@yahoo.com

Roberto Márcio de Andrade

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – roberto@demec.ufmg.br

Ricardo Alberto Neto Ferreira

Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN-CNEN, Cidade Universitária, Pampulha, CEP: 30.123-970 - Belo Horizonte, Minas Gerais – ranf@urano.cdtn.br

Márcio Ziviani

Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG, Pampulha, CEP: 31.270-901 - Belo Horizonte, Minas Gerais – ziviani@demec.ufmg.br

Abstract: Flash Laser Method has been widely employed for materials thermophysical properties determination presenting several advantages like reduced time for test, small samples, large measurement range, possibility of simultaneous measurement of thermal diffusivity, heat capacity and thermal conductivity. Flash Laser Method utilizes the analytical solution for the unidirectional thermal diffusion equation in a sample submitted to an initial heat pulse and adiabatic boundary conditions. The proposed corrections in the literature due to experimental conditions of finite time pulse and heat exchanges with the environment, fit to experimental curve to analytical solution. In this work the finite volumes technique was employed to solve numerically the thermal diffusion equation for cylindrical sample assuming initial and boundary conditions more adequate to the experimental conditions for Flash Laser Method.

Key words: Flash Laser Method , thermal diffusion, finite volumes.