

MODELAGEM FÍSICO-MATEMÁTICA DO PROCESSO DE DIFUSÃO TÉRMICA APLICADA AO MÉTODO FLASH LASER

Pablo Andrade Grossi

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

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@cdtn.br

Resumo. Neste trabalho foi desenvolvida uma modelagem físico-matemática enfocando sistemas de medição de propriedades termofísicas de materiais com aplicação ao Método Flash Laser. A modelagem se baseia na solução inversa da equação de difusão térmica, obtida a partir da aplicação de um algoritmo de otimização, baseado no método das coordenadas descendentes (Luenberger, 1984), focando minimizar a função desvio entre os resultados experimentais e a solução numérica. As variáveis de busca secundárias do modelo foram ajustadas à bancada de medição de propriedades termofísicas pelo Método Flash Laser do Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN. As vantagens deste tipo de formulação físico-matemática, proposta para o Método Flash Laser, são: determinação simultânea das propriedades termofísicas α , c_p e k ; eliminação dos métodos de correção propostos na literatura; possibilidade de aplicação da modelagem físico-matemática em outros métodos para determinação de propriedades termofísicas, considerando um menor grau de simplificação das condições iniciais e de contorno, conferindo maior adequabilidade do modelo matemático ao experimento, um maior significado físico aos resultados e consequente diminuição das incertezas.

Palavras-chave: *Modelagem Físico-Matemática, Determinação de Propriedades Termofísicas, Método Flash Laser, Método de Volumes Finitos, Solução Inversa do Problema de Difusão de Calor.*

1. INTRODUÇÃO

Os avanços atuais na área de novos materiais (metálicos, cerâmicos, compósitos, biomateriais etc.) e as suas aplicações industriais, em tecnologias de ponta e nas faixas mais extremas de temperatura, têm mostrando a importância da determinação das propriedades termofísicas destes materiais (difusividade térmica, condutividade térmica, calor específico) em função da temperatura (Feit e Shaw, 1991).

As propriedades termofísicas de materiais retratam o comportamento das interações intermoleculares da matéria em processos de transporte de energia. Assim, tais propriedades são importantes na caracterização e distinção dos diferentes tipos de materiais, visando a adequabilidade de determinados tipos em detrimento de outros.

Os vários métodos existentes para determinação de Difusividade Térmica são baseados na natureza do processo de transferência de calor em regime transitório e podem ser divididos em duas vertentes. Na primeira vertente, enfoca-se uma metodologia de análise de fluxos de calor periódicos, onde se destacam as técnicas da haste longa, da placa plana, dos sólidos semi-finitos, dos cilindros (Tye, 1969),

da onda radial convergente (Joo et al., 2000), de Ångström e suas modificações, da onda radial, da tira quente (Gustafsson, 1987) e os métodos termoelétricos. Já na segunda vertente, encontram-se as técnicas que analisam fluxos de calor em regime transitório não periódicos, onde se destacam as técnicas da tira quente (Gustafsson, 1987), da haste longa finita, da placa plana, dos sólidos semi-finitos, dos cilindros (Tye, 1969), do fluxo de calor radial (Kubičár e Boháč 1999), da alta intensidade de arco e do flash laser (Parker et al, 1961).

Alguns inconvenientes como longo tempo requerido na realização das medições, necessidade de amostras grandes do material ou ainda elevados percentuais de incertezas de medição, impõem limitações na aplicação de alguns destes métodos para determinação de propriedades termofísicas.

O Método Flash Laser, apresentado e discutido primeiramente por Parker et. al. (1961), é baseado na solução analítica da equação de difusão térmica unidimensional. O método analisa os resultados de um experimento no qual uma amostra cilíndrica, sob condições de contorno adiabáticas, é submetida a um impulso inicial de energia em uma das faces. A variação no perfil de temperatura da face oposta é medida durante o período de teste que é de aproximadamente 3 segundos. Com base na curva de temperatura, obtida experimentalmente, a Difusividade Térmica é determinada a partir da espessura da amostra e do tempo no qual a temperatura na face oposta atinge a metade da variação máxima de temperatura.

Deem e Wood (1962) utilizaram um laser a rubi no lugar do flash de xenônio e demonstraram sua adequabilidade como fonte de energia. Moser e Kruger (1965) foram os primeiros a utilizar o método flash laser para a determinação de propriedades térmicas de materiais nucleares. Eles reportaram os resultados de medições em compostos de urânio (Moser e Kruger, 1967) e em compostos de plutônio (Moser e Kruger, 1968). Murabayashi et al. (1969) e Takahashi e Murabayashi (1975), empregaram este método para medições de propriedades térmicas de inúmeros materiais e combustíveis nucleares, tais como UO_2 , U_4O_9 , ThO_2 , BeO , $(Th,1\%U)O_2$, $(Th,5\%U)O_2$, $(Th,10\%U)O_2$, $(Th,Ce)O_2$, $(U,Zr)O_2$, ThO_2-BeO , UC , UN , US , UP , $UC_{1-x}N_x$, e $UP_{1-x}S_x$.

O Método Flash Laser vem se tornando um dos mais importantes métodos para determinação de propriedades termofísicas por apresentar várias vantagens e aplicações (Grossi, 2003)

Apesar das inúmeras vantagens do método flash laser, algumas obstáculos experimentais vem sendo encontrados. A solução analítica da equação de difusão térmica, proposta por Parker et al. (1961), impõe algumas simplificações que induzem a limitações de ordem física. Os problemas são basicamente gerados pela dificuldade em fornecer as condições iniciais e de contorno exigidas pelo método. Algumas soluções corretivas são relatadas e discutidas, na literatura, com o intuito de amenizar as principais dificuldades (ASTM-E-1461-92 e Grossi, 2003)

Os modelos adicionais propostos estão voltados para a correção dos efeitos citados acima. Por se tratar de ajustes a posteriori, em sua maioria requerem tempo excessivo e difíceis formas de implementação, e desta forma, não se têm notado avanços significativos no desenvolvimento do Método Flash Laser.

No Brasil, o Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN possui uma bancada capaz de realizar testes para determinação experimental de propriedades termofísicas através do Método Flash de Laser. Grossi et al (2001) e Ferreira et al (2002) realizam uma descrição detalhada desta bancada e Grossi (2003) apresenta algumas tecnologias incorporadas e melhorias implementadas.

Os objetivos principais deste trabalho são:

- Apresentação de um modelo físico-matemático generalizado, baseado na solução numérica da equação de difusão térmica, para ser aplicado às diversas técnicas atuais de medição de propriedades termofísicas;
- Realização de simulações da difusão térmica utilizando as variáveis corretas, de acordo com as condições experimentais de cada modelo físico, direcionando tais simulações, através de algoritmos de otimização, para que converjam para a solução ótima, que retrate corretamente todo o processo de difusão térmica;

- Validação do modelo matemático através de testes experimentais utilizando a bancada do Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN.

2. MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO

A determinação das propriedades termofísicas de materiais se baseia na realização de um experimento no qual uma amostra, com uma dada geometria, é submetida a um processo de aquecimento. As distribuições de temperatura em função do tempo são medidas em pontos notáveis. A análise destes transientes térmicos, a partir da solução da Equação da Difusão Térmica, ao aplicar as condições inicial e de contorno ideais do Método Flash Laser, possibilita a determinação da difusividade térmica. Valores adicionais de calor específico e condutividade térmica são obtidos quando se conhece a magnitude do fluxo de calor envolvido.

Sendo a imposição das condições inicial e de contorno e a medição do perfil de temperatura ao longo do tempo fatores fundamentais para a investigação das propriedades termofísicas, qualquer incompatibilidade ou erro em relação a esses parâmetros pode tornar ineficaz ou incorreta a aplicação do método escolhido para determinação das propriedades do material. Por este motivo, os métodos para determinação das propriedades termofísicas são relativamente novos, pois somente com os recentes avanços no campo da modelagem matemática e de desenvolvimentos de instrumentação com boa exatidão e de pequeno tempo de resposta, foi possível resolver adequadamente a Equação da Difusão Térmica e realizar medições corretas em curtos intervalos de tempo.

Os inconvenientes experimentais encontrados nas aplicações do método Flash Laser estão associados à dificuldade em se obter as condições iniciais e de contorno utilizadas na solução analítica proposta por Parker et al. (1961). Fontes de incerteza estão relacionadas à determinação dos valores de absorvividade e emissividade da amostra e incertezas inerentes ao sistema de medição. Estes inconvenientes causam efeitos indesejáveis (efeito de tempo de pulso finito, efeito de forma de pulso, efeito de trocas térmicas e os efeitos / influências do sistema de medição de temperatura) que são retratados nos resultados experimentais, mascarando os valores finais das propriedades térmicas da amostra.

A utilização de um modelo físico-matemático que incorpora, em sua análise, todas essas fontes de erro torna possível a minimização da incerteza do resultado de medição das propriedades termofísicas. Esta modelagem consiste em duas etapas:

1. Obtenção das soluções numéricas da Equação de Difusão Térmica, através do Método dos Volumes Finitos. Simulações numéricas são realizadas para faixas de valores de variáveis do modelo que retratam condições próximas das encontradas experimentalmente. Isso diminui o grau de simplificação do modelo físico-matemático, conferindo maior significado físico aos resultados e diminuição das incertezas (Grossi et al., 2002).

2. Aplicação do algoritmo de programação não linear, baseado no método das coordenadas descendentes (Luenberger, 1984) para minimizar o desvio entre os resultados experimentais e a solução numérica. Uma solução inversa do problema é obtida para determinados parâmetros de entrada, gerando como saída principal os valores das propriedades termofísicas Difusividade Térmica (α), Capacidade Calorífica Volumétrica (pc_p) e Condutividade Térmica (k) do material analisado.

Nos itens a seguir serão apresentados os detalhamentos dessas duas etapas.

2.1. Solução Numérica da Equação de Difusão Térmica

De forma generalizada, os experimentos para medição de propriedades térmicas através de técnicas de análise do regime transiente de temperatura estão baseados na Equação que rege o fenômeno de difusão térmica:

$$\nabla k \nabla T + g'' = c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.1)$$

sendo g'' a geração ou consumo interno de energia [W/m^3].

A metodologia para determinação das propriedades termofísicas consiste em comparar e relacionar os dados experimentais obtidos em ensaios sob condições controladas, com soluções da equação de difusão térmica, admitindo algumas simplificações ou não.

A adoção de hipóteses simplificadoras permite a obtenção de uma solução simples para a equação de difusão, tornando simples e rápida a determinação da propriedade termofísica. Entretanto, o foco de análise está voltado para as situações onde não se pode admitir hipóteses simplificadoras ou então quando a adoção destas hipóteses induz a erros grosseiros. Nestes casos só é possível obter a solução da equação de difusão através de técnicas numéricas.

Dentre os métodos mais divulgados para obtenção de soluções numéricas está o método de Diferenças Finitas com formulação em Volumes de Controle (Método dos Volumes Finitos, Patankar, 1980 e Maliska, 1995). Grossi et al (2002) apresenta um detalhamento deste processo para um sistema de coordenadas axissimétricas.

Associado à programação desta discretização, o método de diferenças finitas permite a obtenção de simulações numéricas com condições iniciais e de contorno quaisquer, considerando ainda as características físicas particulares ao sistema, que podem ser definidas da maneira que se desejar em sub-rotinas específicas durante a fase de desenvolvimento do programa gerador das simulações numéricas. Refinamentos das malhas espaciais e temporais podem ser aplicados às regiões de maior interesse ou com geometrias intrincadas. Dessa forma, as condições sobre as quais são realizados os ensaios experimentais podem ser consideradas nas simulações numéricas para obtenção da solução da equação de difusão de calor (2.1).

2.2 Análise do Problema Inverso de Difusão de Calor

Problemas inversos são encontrados em vários ramos da ciência e da engenharia. Engenheiros mecânicos, aeroespaciais e químicos, matemáticos, astrofísicos, geógrafos, estatísticos e especialistas em muitas outras disciplinas são todos interessados em problemas inversos, cada um com diferentes tipos de aplicação. No campo de transferência de calor, o uso da análise inversa para estimar as condições superficiais, tais como, temperatura e fluxo de calor ou determinar as propriedades térmicas como difusividade, condutividade e calor específico de sólidos utilizando as medições de transientes de temperatura tomados em um meio, tem demonstrado inúmeras aplicações práticas.

Entretanto, dificuldades associadas com a implementação computacional de análises inversas são freqüentemente encontradas. A principal dificuldade decorre do fato de que as soluções inversas são muito sensíveis às alterações nos dados de entrada resultantes de erros de medição ou de modelagem, e consequentemente, esta solução não pode ser única. Matematicamente, os problemas inversos pertencem a uma classe de problemas chamada de problemas mal postos (“*ill-posed problems*”). Esses tipos de problema não satisfazem os requisitos gerais de *existência, singularidade e estabilidade*, quando se têm pequenas alterações nos dados de entrada. Para superar tais dificuldades, uma variedade de técnicas de análise do problema inverso de difusão de calor vem sendo propostas (Özişik, 1993).

Os problemas diretos clássicos, relacionados à difusão de calor, consistem em determinar a distribuição de temperatura no interior de um corpo quando as condições iniciais e de contorno, a taxa de geração de energia e as propriedades termofísicas do meio são especificadas. Os problemas inversos de condução de calor (IHCPs) realizam exatamente o caminho contrário, determinando as condições iniciais, de contorno, taxas de geração de energia ou propriedades termofísicas a partir de medições de históricos de temperatura em um ou mais pontos do sólido.

A aplicação da técnica de análise do problema inverso de interesse deste trabalho está focada em experimentos de determinação de propriedades temofísicas de materiais. Neste caso, a solução do problema inverso fornece valores ótimos, estimados para tais propriedades, a partir da medição ou avaliação razoável das condições iniciais e de contorno e também dos transientes de temperatura no interior do material.

A determinação da solução inversa ótima pode ser obtida através de uma série de algoritmos de programação linear e não linear, como apresentado por Luenberger (1984).

2.2.1 Técnica de Otimização Aplicada ao Método Flash Laser

A solução do problema inverso de difusão térmica, apresentado a seguir, é aplicada à medições de propriedades termofísicas pelo método flash laser. O algoritmo de otimização utilizado se baseia no método das coordenadas descendentes para minimização de uma função com várias variáveis e com restrições.

A função objetivo, que se deseja minimizar, é o desvio entre os transientes de temperatura na face oposta da amostra, obtidos a partir dos resultados experimentais e os obtidos a partir das simulações numéricas, considerando faixas de valores para as condições iniciais, de contorno e experimentais que mais se adaptem modelo físico utilizado pelo Método Flash Laser. Desta forma, a formulação do problema é concretizada da seguinte forma:

$$\text{Min } f(x) \text{ sendo } x = [k, \rho, c_p, \tau, \phi, \Psi, \Pi, \epsilon, \alpha_{abs}]^T \quad (2.2)$$

onde x é o vetor que contem as variáveis de busca do problema, ϕ é a forma do pulso laser, Ψ é o coeficiente característico de trocas térmicas, relativo à composição de h_g e do efeito de saturação do sistema de medição de, Π é o coeficiente amplitude do transiente da solução numérica, relativo à composição de P_{laser} e das perdas de amplitude introduzidas pelo sistema de medição de temperatura, ϵ é a emissividade da superfície da amostra e α_{abs} é a absorvividade da face frontal da amostra.

A função objetivo, $f(x)$, é uma função discreta no tempo, definida como:

$$f(x) = \sum_{t=0}^{t=t_\infty} [T_E(t) - T_{SN}(t)]^2 \quad (2.3)$$

onde t é que se comporta como uma variável discreta (sendo incremento temporal definido pela freqüência de amostragem do sistema de medição), T_E são os valores de temperatura experimentais na face oposta e T_{SN} são os valores de temperatura na face oposta obtidos pelas soluções numéricas.

A minimização de $f(x)$ está sujeita a restrições que são impostas para conferir uma interpretação física confiável aos resultados. Sendo assim, uma estimativa inicial da faixa mais provável para os valores das variáveis do problema possibilita uma convergência mais rápida e garante uma interpretação física para os resultados. O número de faixas e o tamanho de cada uma irá depender da quantidade de informações que se tem a respeito do material, da influência das alterações de cada variável e da velocidade que se deseja para a convergência. Dessa forma, um processo de restrição que considera os valores mais comumente encontrados ou esperados, define as faixas de variação das variáveis, aplicadas aos interesses deste trabalho. Essas faixas são apresentadas a seguir:

Condutividade térmica (k): o espectro para esta propriedade está entre 10^3 e 10^{-6} [W/(m.K)], abrangendo desde materiais altamente condutores, até os altamente isolantes.

Densidade (ρ): os valores de densidade dos materiais se encontram na faixa entre 10^4 e 10^0 [kg/m³] que é relativamente pequena, sendo que para a maioria dos casos é da ordem de 10^3 .

Calor específico (c_p): em geral assume valores da ordem de 10^3 e 10^{-1} [J/(kg.K)], representando a capacidade de retenção de energia na estrutura do material.

Estas três primeiras variáveis influenciam diretamente no valor da difusividade térmica do material, portanto merecem uma atenção especial, pois estimativas incorretas podem comprometer a interpretação física do processo de solução do problema inverso. Sendo assim, estas variáveis são consideradas variáveis de busca primárias do processo de otimização. As variáveis mostradas a seguir serão consideradas variáveis de busca secundárias ou de influência indireta. Para as demais variáveis secundárias também devem ser estabelecidas faixas de domínio para os seus valores:

Tempo de duração do pulso laser (τ): possui um valor relativamente bastante estável em torno de 0,1 s. Estima-se que sua incerteza esteja na faixa de 5%.

Forma do pulso laser (ϕ): esta variável pode representar diferentes tipos de perfis de irradiação da superfície da amostra. Os perfis mais representativos são os triangulares, os parabólicos e os trapezoidais.

Coeficiente característico de trocas térmicas (Ψ): variável que modifica o transiente de temperatura de maneira similar a trocas térmicas. É efetivamente a composição coeficiente global de transferência de calor (h_g), cujo o seu valor inicial poder ser calculado para os três modos de transferência de calor, e as alterações causadas pelo sistema de medição, como por exemplo a saturação do sensor, que podem causar na saída um efeito similar ao de perdas de calor muito elevadas. Por este tipo de efeito nos resultados ocorrer de forma isolada, ele é de fácil detecção, sendo que estimativas iniciais inexatas não comprometem a solução final do problema inverso.

Coeficiente de amplitude do transiente da solução numérica (Π): variável que afeta a magnitude do transiente de temperatura. É determinada pela composição de P_{laser} , cujo valor pode ser variado e medições instantâneas são realizadas por uma célula Peltier, e as variações de amplitude introduzidas pelos efeitos do sistema de medição de temperatura.

Emissividade e Absortividade superficial da amostra (ϵ e α_{abs}): possuem valores adimensionais que podem variar entre 0 e 1. Para faixas estreitas de variação de comprimento de onda, os valores de emissividade e absortividade podem ser considerados iguais, representando, respectivamente, a eficiência na qual a radiação infravermelha é emitida para o sensor de temperatura e a eficiência de absorção da energia emitida pelo laser. A solução numérica condensa estas duas variáveis em uma só que influencia diretamente na amplitude do transiente na face oposta.

De uma maneira generalizada, a influência do sistema de medição é minimizada ao ser incorporada pelas variáveis ϕ , Ψ e Π , que realizam um tratamento similar à aplicação de um filtro inverso no transiente de temperatura.

O método das coordenadas descendentes tem como principal objetivo encontrar um valor ótimo, para cada das variáveis de busca, que minimiza a função objetivo. A procura é realizada individualmente para cada uma das variáveis, podendo realizar a otimização de uma forma cíclica até que se atinja um valor mínimo exigido para a função objetivo.

Grossi et al. (2002) realizou um trabalho similar, entretanto mais simplificado. Utilizando como parâmetros as mesmas variáveis mostradas na Eq. (2.2), obteve, sem utilizar uma técnica de otimização, uma curva bem mais próxima da obtida experimentalmente. Realizou também uma comparação dos erros percentuais, nos pontos de amostragem, entre as curvas experimental e simulada, (de maneira similar ao que faz a função objetivo, Eq. (2.3)). Entretanto não correlacionou estes resultados com valores das propriedades térmicas do material.

A validação da técnica mostrada neste trabalho, será baseada nos dados empíricos fornecidos pela bancada de medição pelo Método Flash Laser descrita por Ferreira et al (2002).

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A solução numérica da Eq. (2.1) foi obtida através do programa Conduct (Patankar, 1980). Os resultados obtidos foram gerados a partir de simulações utilizando técnicas de discretização por diferenças centrais.

A Figura (3.1) apresenta um confronto entre as soluções analítica e numérica da Eq. (2.1) unidimensional sujeita à condição inicial de temperatura prescrita e condição de contorno adiabática. O desvio percentual máximo encontrado foi igual a 0,062%, para um conjunto de malhas espacial e temporal otimizados. Grossi et al (2002) apresenta outras técnicas para validação deste modelo.

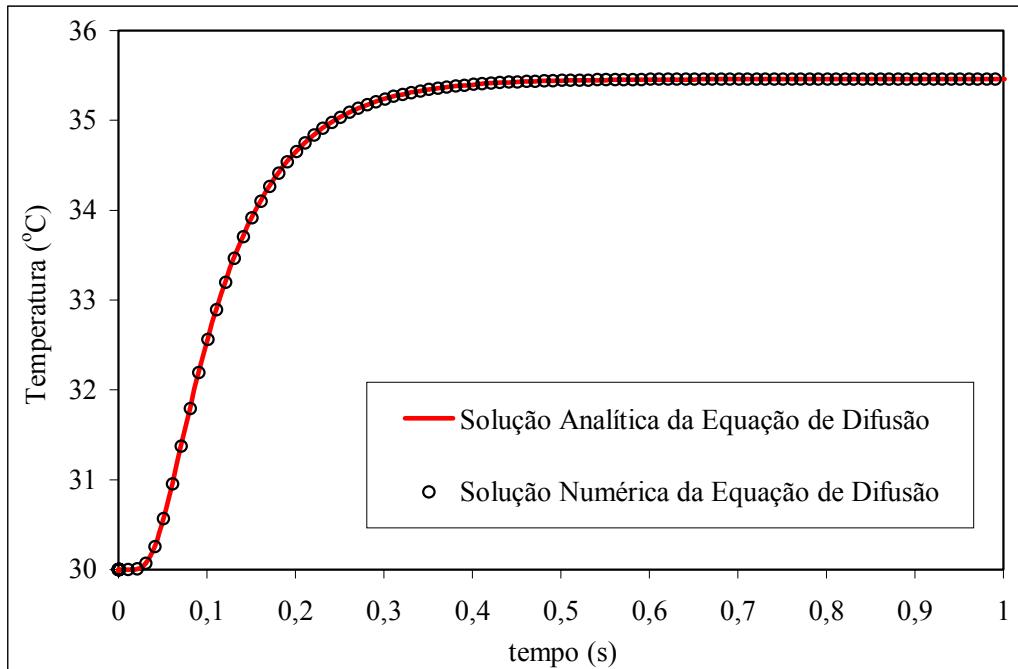


Figura 3.1 - Comparação entre as soluções analítica e numérica da Equação de Difusão Térmica considerando condição inicial de temperatura prescrita e condição de contorno adiabática.

O ajuste do modelo fisico-matemático em relação à bancada de medição foi realizado para uma amostra de Aço, cujas propriedades termofísicas são conhecidas. O valor de calor específico é estimado em 440 J/(kg K), com base na literatura. Os valores de condutividade térmica da amostra padrão foram obtidos a partir de medições realizadas no Laboratório de Propriedades Superficiais do Departamento de Física da UFMG.

Foram realizados vários conjuntos de medidas para a amostra. Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Valores das medidas de condutividade para a amostra padrão de Aço.

Amostra	Leitura Comparador ($\Delta V_c / (\Delta V_F)$)	Condutividade Térmica obtida (W/m°C)	Condutividade Térmica Média (W/m°C)
Aço (Padrão)	0,02371 (10gr)	23	
	0,02401 (10gr)	26	(28±3)
	0,02726 (50gr)	30	

Os desvios mostrados são desvios estatísticos dos valores de condutividade térmica nas várias medidas realizadas e foram usados para dar uma idéia da flutuação nos resultados quando se usa condições diferentes (cargas de 10gr e 50gr) para a realização das medições.

A densidade do material da amostra foi medida no CDTN através do Método de Penetração e Imersão em Água Deionizada. A técnica se baseia na diferença de empuxo entre o peso da amostra no ar e o seu peso na água. Os resultados de medição são mostrados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 - Valores de densidade da amostra padrão de Aço.

Peso da amostra no ar (g)	Peso em água (g)	Densidade (kg/m ³)	Densidade Média (kg/m ³)
0,7613	0,6617	7643,5743	
0,7613	0,6605	7552,5794	
0,7607	0,6595	7516,7984	
0,7610	0,6590	7460,7843	7552,7931
0,7613	0,6610	7590,2293	

Utilizando a modelagem físico-matemática adaptada / configurada para o Método Flash Laser, realizou-se o ajuste de suas varáveis de busca secundárias.

Uma comparação entre a solução numérica e a curva experimental, utilizando os valores ótimos das variáveis de busca secundárias, é mostrada na Fig. (3.4).

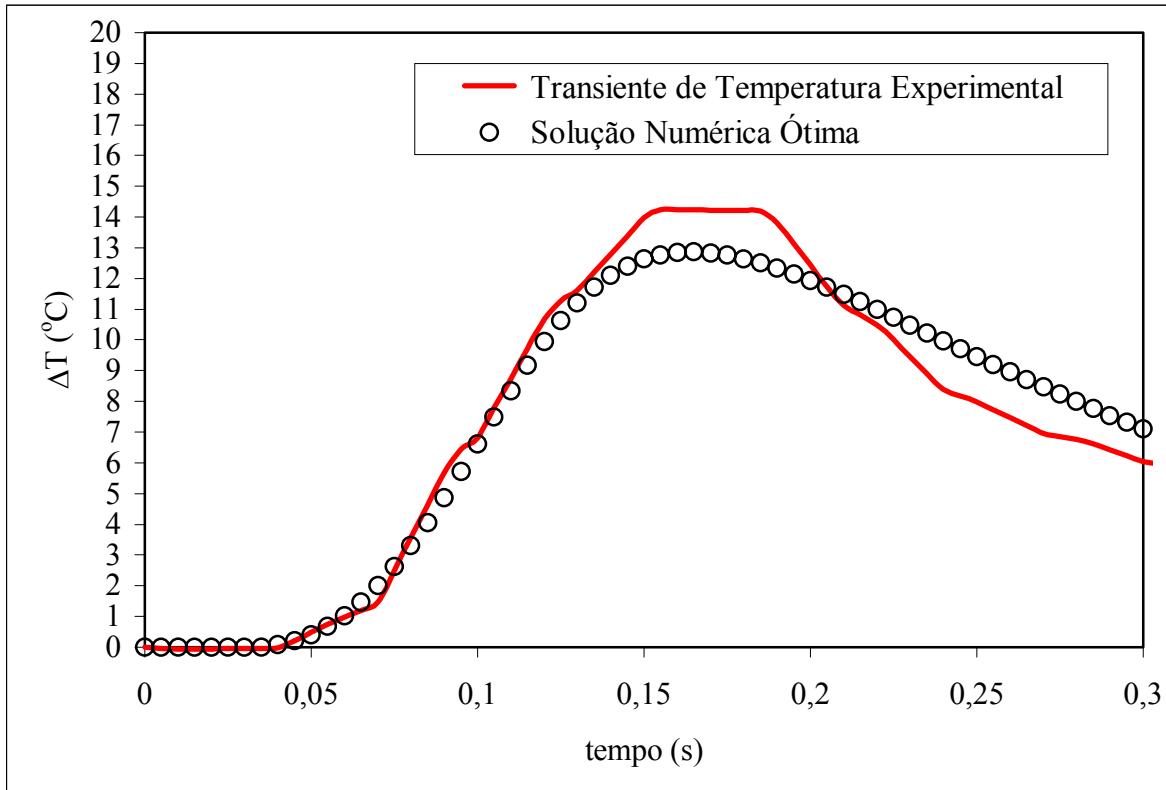


Figura 3.5 –Confronto entre a solução numérica considerando trocas térmicas e tempo de pulso finito e resultados experimentais.

A estimativa da variável τ , se baseou no valor mínimo de tempo de pulso que é bastante estável em torno de 0,1 s. A variação é estimada em 5% e se deve a inércias mecânicas do sistema de aplicação do pulso.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi desenvolvida uma modelagem físico-matemática enfocando sistemas de medição de propriedades termofísicas de materiais com aplicação ao Método Flash Laser. A modelagem se baseia na solução inversa da equação de difusão térmica, utilizando como função objetivo o desvio médio quadrático entre os transientes de temperatura experimentais e os obtidos através de simulações numéricas considerando todas as condições experimentais impostas pelo modelo físico.

A equação de difusão de calor para amostra foi resolvida pela técnica de Diferenças Finitas com formulação em Volumes de Controle desenvolvida por Patankar (1980). Foram considerados os efeitos de tempo de pulso finito, perfil de irradiação do laser, trocas térmicas com o ambiente e do sistema de medição de temperatura, reduzindo o nível de restrições com relação ao modelo proposto por Parker et al. (1961).

A validação da solução numérica consistiu em analisar o seu nível de adequação à solução analítica por Séries de Fourier. Realizaram-se testes das malhas espacial e temporal, obtendo um desvio percentual máximo inferior a 0,062% que demonstra uma boa concordância entre os resultados.

A solução inversa da modelagem físico-matemática foi obtida a partir da aplicação do algoritmo de programação não linear, baseado no método das coordenadas descendentes (Luenberger, 1984), focando minimizar a função erro entre os resultados experimentais e a solução numérica. A solução inversa ótima para o problema foi obtida para os valores ótimos das variáveis de busca secundárias, ajustados para a bancada de medição.

Desenvolveu-se um programa, em linguagem Fortran, para a implementação do modelo matemático. Este programa está sendo utilizado também para a correção dos efeitos de tempo de pulso finito, forma de pulso, trocas térmicas e influência do sistema de medição de temperatura. A saída principal deste programa são os valores das propriedades termofísicas Difusividade Térmica (α), Capacidade Calorífica Volumétrica (ρc_p) e Condutividade Térmica (k) do material analisado.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM-E-1461-92**: standard test method for thermal diffusivity of solids by the flash method. In: _____. Annual book of ASTM standards. Philadelphia: ASTM. v. 14.02, p. 750-757. 1993. CAPE, J. A.; LEHMAN, G. W., Temperature and finite pulse-time effects in the flash method for measuring thermal diffusivity. **J. Appl. Phys** v. 34, n.7, 1963.
- COWAN, R. D. Pulse method of measuring thermal diffusivity at high temperatures. **J. Appl. Phys.**, v. 34, n.4, pt.1, p. 926-927, 1963.
- DEEM, H.W.; WOOD,W.D., Flash thermal-diffusivity measurements using a laser. **Rev. Sci. Instrum.**, v.33, p.1107-1109, 1962.
- FEIT, E.; SHAW, H. Advances in thermal properties testing at oak ridge national laboratories. **Ceramic Bulletin**, v. 70, n. 1, p.125-28, 1991.
- FERREIRA, R. A. N.; MIRANDA, O.; DUTRA NETO, A.; GROSSI, P. A., MARTINS, G. A. S.; REIS, S. C.; ALENCAR, D. A.; SOARES FILHO, J. G.; LOPES, C. C.; PINHO, M. G., Implantação no CDTN de Laboratório de Medição de Propriedades Termofísicas de Combustíveis Nucleares e Materiais através do Método flash laser. In: ENFIR. ENCONTRO NACIONAL DE FÍSICA DE REATORES,13, 2002, Rio de Janeiro. **Anais...**Rio de Janeiro: ABEN, 2002.
- GROSSI, P. A. **Modelagem físico-matemática de sistemas de determinação de propriedades termofísicas com aplicação ao método flash laser**. 2003. 107 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) - Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2003.

- GROSSI, P. A., ANDRADE, R. M., FERREIRA, A. N., ZIVIANI, M. Solução da equação de difusão térmica, utilizando a técnica de volumes finitos, para otimização do método flash laser, In: CONGRESSO NACIONAL DE ENGENHARIA MECÂNICA, 2, 2002, Paraíba. **Anais...** João Pessoa, 2002.
- GROSSI, P. A., FERREIRA, A. N., ANDRADE, R. M., bancada experimental para medição de propriedades termofísicas de sólidos pela técnica flash laser. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA MECÂNICA, 16, 2001. **Anais...** Uberlândia, 2001.
- GUSTAFSSON, S. E. Transient Hot Strip techniques for measuring thermal conductivity and thermal diffusivity, **The Rigaku Journal**, V. 4, n.1 / 2, p.16-28, 1987.
- JOO, Y.; PARK, H.; CHAE, H.; LEE, J.; BAIK, Y. Measurements of thermal diffusivity for thin slabs by a converging thermal wave technique. Disponível em: <<http://www.symp14.nist.gov/PDF/THI01JOO.PDF>> Acesso em: 21 jan. 2003, In :SYMPORIUM ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES, 14, 2000, Boulder, **Proceedings...** Boulder, 2000. 19 p.
- LUENBERGER, D. G., **Linear and nonlinear programing**. 2. ed. New.York : Addison-Wesley, 1984. 491 p.
- KUBIČÁR, L.; BOHÁČ, V. **Development of Methods for Measuring Thermophysical Parameters of Materials**. Bratislava: Slovak University of Technology,1999. (SEFI WGP Seminar EAPE 99)
- MOSER, J.B.; KRUGER, O.L., Thermal conductivity and heat capacity of the monocarbide, monophosphide, and monosulfide of uranium, **J. Applied Physics**, v.38, n.8, p. 3215-3222, 1967.
- MOSER, J.B.; KRUGER, Thermal conductivity and heat capacity of the monophosphide and monosulfide of plutonium. **J. Amer. Ceram Soc.** v. 51, n. 7, p. 369-372, 1968.
- MURABAYASHI, M.; NAMBA, S.; TAKAHASHI, Y; MUKAIBO, T., Thermal conductivity of ThO₂-UO₂ system. **J. Nucl. Sci. Technol.** v. 6, n.3, p.22-25, 1969.
- Özişik, M. N. **Heat conduction**. 2. ed. Raleigh: Wiley-Interscience, p. 571-616, 1993.
- PARKER, W. J.; JENKINS, R. J.; BUTLER, C. P.; ABBOTT, G. L. flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity and thermal conductivity. **J. Appl. Phys.**, v..32, n. 9, p. 1679 - 84, 1961.
- PATANKAR, S. V., **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York : Hemisphere, 1980. p. 353.
- TAKAHASHI, Y.; MURABAYASHI, M., Measurement of thermal properties of nuclear materials by laser flash method. **Nucl. Sci. Technol.** v. 12, n. 3, 133-144, 1975.
- TYE, R. P. **Thermal conductivity**. London : Academic Press, v. 2, p.185 – 239, 1969.

PHYSIC-MATHEMATICS MODELING FOR THERMAL DIFFUSION PROCESS APPLIED TO FLASH LASER METHOD

Abstract. A physic-mathematics modeling to measurement systems of thermophysics properties was developed and was applied in the flash laser method. This Modeling is based on the inverse solution of thermal diffusion equation. This kind of physics-mathematics modeling applied to flash laser method allows simultaneous determination of thermophysics properties (α , c_p and k), elimination of the correction methods proposed in the literature and incentive the application of this kind of modeling in other methods used for determination of thermophysics properties. This modeling works with less constraints in initial and boundary conditions and leads to a better fitness between mathematical model and experimental results. As a consequence, the physical meaning of thermophysics properties is improved and the uncertainty in the results is reduced.

Keywords: *Physic-Mathematics Modeling, Thermal Properties Determination, Flash Laser Method, Finite Volume Method, Inverse Solution of Thermal Diffusion Equation.*