



Universidade Federal do Pará

Instituto de Tecnologia

Programa de Pós-graduação em Engenharia Química

**O modelo de condução de calor hiperbólico aplicado a Espectroscopia
de Lente Térmica**

Igor José do Carmo Coimbra

Belém, Abril de 2015

Universidade Federal do Pará
Programa de Pós-graduação em Engenharia Química

**O modelo de condução de calor hiperbólico aplicado a Espectroscopia
de Lente Térmica**

Igor José do Carmo Coimbra

Dissertação apresentada ao
Programa de Pós-graduação em
Engenharia Química, do Instituto de
Tecnologia da Universidade Federal
do Pará, como parte dos requisitos
para a obtenção do título de mestre
em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Emanuel Negrão Macedo – UFPA

Belém – PA
2015

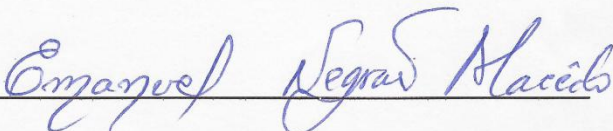
Igor José do Carmo Coimbra

**O modelo de condução de calor hiperbólico aplicado a Espectroscopia
de Lente Térmica**

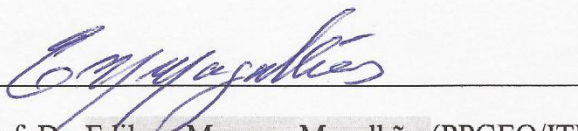
Dissertação apresentada à Coordenação
do Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química (PPGEQ) da
Universidade Federal do Pará (UFPA)
como parte dos requisitos para obtenção
do Título de mestre em Engenharia
Química.

DATA DA AVALIAÇÃO: 10/04/2015

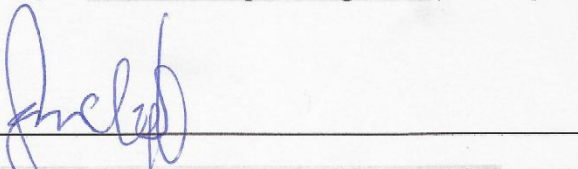
CONCEITO: Exc.



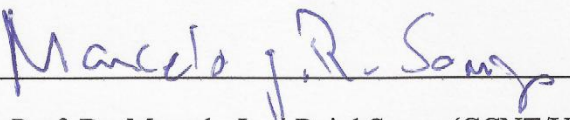
Orientador: Prof. Dr. Emanuel Negrão Macêdo (PPGEQ/ITEC/UFPA)



Membro: Prof. Dr. Edilson Marques Magalhães (PPGEQ/ITEC/UFPA)



Membro: Prof. Dr. Sanclayton Geraldo Carneiro Moreira (PPGF/ICEN/UFPA)



Membro: Prof. Dr. Marcelo José Raiol Souza (CCNT/UEPA)

**Belém - PA
2015**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

Coimbra, Igor José do Carmo, 1987-

O modelo de condução de calor hiperbólico aplicado a espectroscopia de lente térmica / Igor José do Carmo
Coimbra. - 2015.

Orientador: Emanuel Negrao Macedo.
Dissertação (Mestrado) - Universidade
Federal do Pará, Instituto de Tecnologia,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química,
Belém, 2015.

1. Calor- condução. 2. Difusividade térmica.
3. Transformadas integrais. I. Título.

CDD 22. ed. 536.2

*À Filomena Coimbra e
Raimunda Telma Coimbra,
sem essas mulheres nada seria
possível em minha vida.*

Agradecimentos

Primeiramente a Deus pelo dom da vida e por tanto ter me abençoado durante esta minha jornada.

Às duas pessoas que sempre me deram força, torceram e estiveram ao meu lado nessa árdua caminhada, minha avó Filomena Coimbra e minha mãe Raimunda Telma Coimbra.

À todos da minha família que torceram por mim, como meu irmão Rodrigo Coimbra, meu primo Jamil e a todos os meus primos, seja em Belém, ou na minha terra querida, Carapajó. Aos meus tios e tias que sempre me apoiaram e me aconselharam a seguir o melhor caminho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Emanuel Negrão, pela oportunidade de fazer parte deste trabalho inovador, pela amizade, infinita paciência e conselhos dados neste período de curso de mestrado. Ao Prof. Dr. João Nazareno pela amizade e aprendizado a mim repassados.

Aos amigos de sala: Hélder Miyagawa, Fábio Pontes, Elenilson Cabral e Luana Grangeiro, por todo apoio me fornecido, seja por uma boa conversa ou pela troca de conhecimento. Ao meu primo Péricles Pontes pelas sempre interessantes e descontraídas conversas, na maioria das vezes regadas a uma boa cerveja. Aos amigos feitos na entrada do curso Jefferson Dias, Rafael Botelho, Wanessa Almeida, Mauro Oliveira e Elizeu Melo. Ao Alex Costa, uma amizade que carrego desde a época de cursinho. Ao prof. Dr. Rubens Silva, meu orientador em minha graduação.

Às estas pessoas que algumas eu conheço desde a infância, outras recentemente conhecidas, mas que já tem um espaço especial em minha vida Relrison, Rodrigo e Romulo Moraes, Helton e Hilton (irmão) Pinto, ao meu compadre Agilson Ramos, Tayane Cid (sempre disposta a conversar e me descontraír em momentos tensos), Álvaro Coelho e a todos os meus amigos do curso de Física. À Daniela Monteiro, pelo apoio neste período recente.

Enfim, a todos que forneceram ajuda nestes anos de mestrado, meus sinceros agradecimentos!

À Capes pelo suporte e apoio financeiro.

Índice

Lista de figuras	<i>i</i>
Lista de tabelas	<i>iii</i>
Nomenclaturas	<i>iv</i>
Resumo	<i>vi</i>
Abstract	<i>vii</i>

Sumário

1	Introdução	1
	1.1 Objetivos	2
	1.2 Estrutura do Trabalho	2
2	Revisão da Literatura	3
	2.1 Lente Térmica.	3
	2.2 O Modelo Hiperbólico de Condução de Calor.	4
	2.3 O Método das Linhas	8
	2.4 A Técnica da Transformada Integral Generalizada	9
3	Aplicação do Modelo Hiperbólico na técnica de Lente Térmica	11
	3.1 A Técnica da Lente Térmica.	11
	3.1.1 O Laser na Lente Térmica.	11
	3.1.2 Procedimentos teórico para cálculo da intensidade do feixe.	13
	3.2 Soluções via Método das Linhas.	18
	3.3 Solução através da GITT.	20
4	O Cálculo da Intensidade	25
	4.1 Variações do índice de refração e da diferença de fase.	25
	4.2 Cálculo da Intensidade.	26
	4.3 Curvas características de Lente Térmica.	29
5	Resultados	31
	5.1 Resultados para o campo de temperatura.	31
	5.1.1 Resultados obtidos pelo Método das Linhas.	31
	5.1.2 Verificação da convergência em função do número de intervalos na malha.	31
	a) Convergência para o perfil de temperatura.	31

b) Convergência para o sinal de Lente Térmica Normalizado.	33
5.1.3 Resultados obtidos pela Técnica da Transformada Integral Generalizada.	34
a) Convergência para o perfil de temperatura.	34
b) Convergência para o sinal de Lente Térmica Normalizado.	36
5.2 Resultados a partir de dados da Literatura.	36
5.2.1 Resultados para o Vidro Calcogeneto.	37
5.2.2 Resultados para o Policarbonato.	40
5.3 Relação do Modelo Teórico com dados experimentais.	44
5.3.1 Relação para o Vidro Calcogeneto.	44
5.3.2 Relação para o Policarbonato.	45
5.4 Resultados a partir de dados do laboratório do PPGF/UFPa	45
	46
6 Conclusão	49
7 Referências	51
Apêndice	55

Lista de figuras

Figura 3.1	Características de um feixe gaussiano.	1
Figura 3.2	Características de diferentes tipos de lasers.	8
Figura 3.3	Representação lateral mostrando a propagação de um feixe laser.	9
Figura 4.1a	Influência da variação do índice de refração (a) $dn/dT > 0$	9
Figura 4.1b	Influência da variação do índice de refração (b) $dn/dT < 0$	25
Figura 4.2	Representação de um feixe laser para uma lente convergente ou divergente.	30
Figura 5.1	Convergência para o sinal de LT para diferentes intervalos na malha.	28
Figura 5.2	Gráfico de convergência do sinal de LT por GITT.	31
Figura 5.3a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 10^{-5} .	33
Figura 5.3b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-5} .	33
Figura 5.4a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 10^{-2} .	33
Figura 5.4b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-2} .	33
Figura 5.5a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 1.	33
Figura 5.5b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 1.	33
Figura 5.6a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 2.	34
Figura 5.6b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 2.	34
Figura 5.7a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 3	34
Figura 5.7b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 3	34
Figura 5.8a	Caso Vidro Calcogeneto: (a) Perfil de temperatura para todos os tempos de relaxação.	34
Figura 5.8b	Caso Vidro Calcogeneto: (b) Sinal de LT para todos os tempos de relaxação.	34
Figura 5.9a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 10^{-5} .	36
Figura 5.9b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-5} .	36

Figura 5.10a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 10^{-2} .	36
Figura 5.10b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-2} .	36
Figura 5.11a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 1.	36
Figura 5.11b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 1.	36
Figura 5.12a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 2.	37
Figura 5.12b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 2.	37
Figura 5.13a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura. Tempo de relaxação = 3.	37
Figura 5.13b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 3.	37
Figura 5.14a	Caso Policarbonato: (a) Perfil de temperatura para todos os tempos de relaxação.	37
Figura 5.14b	Caso Policarbonato: (b) Sinal de LT para todos os tempos de relaxação.	37
Figura 5.15	Relação do modelo teórico com os pontos experimentais do trabalho de Sandro Lima	39
Figura 5.16	Relação do modelo teórico com os pontos experimentais do trabalho de Jurandir Rohling	40
Figura 5.17	Ajuste teórico com dados experimentais para uma amostra de PVA com betacaroteno.	47

Lista de tabelas

Tabela 5.1	Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi=0,1$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.	27
Tabela 5.2	Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi=0,5$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.	27
Tabela 5.3	Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi=0,9$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.	27
Tabela 5.4	Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,1$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.	29
Tabela 5.5	Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,5$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos	30
Tabela 5.6	Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,9$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.	30
Tabela 5.7	Parâmetros retirados do trabalho de Sandro Lima e usados nesta dissertação.	32
Tabela 5.8	Parâmetros retirados do trabalho de Jurandir Rohling e usados nesta dissertação.	35
Tabela 5.9	Parâmetros geométricos para a configuração do modelo de Lente Térmica de feixe único.	47

Nomenclaturas

A	Coeficiente de absorção
c	Calor específico
D	Difusividade térmica
g	O quadrado da razão entre coordenada radial e cintura do feixe de excitação
J_n	Função de Bessel de ordem n
K	Condutividade Térmica
L	Espessura da amostra
m	O quadrado da razão entre as cinturas dos feixes na amostra
n	Índice de refração
P	Potência do laser (de excitação ou de prova)
q	Fluxo de calor
Q	Termo fonte de calor
r	Coordenada radial
t	Tempo
T	Temperatura
U_p	Campo Elétrico
V	Razão entre a distância das cinturas mínimas dos feixes e o parâmetro confocal.
z	Plano do detector

Letras Gregas

η	Coordenada espacial adimensional
θ	Temperatura adimensional
λ	Comprimento de onda
μ	Autovalores
ξ	Coordenada espacial adimensional em um intervalo finito
ρ	Densidade
τ	Tempo adimensional
τ_r	Tempo de relaxação
$\tilde{\tau}$	Tempo de relaxação adimensional
Φ	Diferença de fase
ψ	Autofunções
ω	Termo que representa a cintura de um laser

Lista de abreviaturas

DF	Diferenças Finitas
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
GITT	Generalized Integral Transform Technique – Técnica da Transformada Integral Generalizada
LT	Lente Térmica
MOL	Method Of Lines – Método das Linhas
TEM	Laser no Modo Eletromagnético Transversal

RESUMO

A técnica da Espectroscopia de Lente Térmica tem, na maioria das vezes, seu perfil de temperatura descrito pela Lei de Fourier da condução de calor, a partir deste perfil, o sinal da Lente Térmica representado pela intensidade de um feixe laser que cruzou uma amostra é calculado. Neste trabalho se conseguiu representar com sucesso esta distribuição de temperatura pelo Modelo Hiperbólico de condução de calor, também conhecido como Lei de Fourier Modificada, tal modelo propõe a inserção de um tempo de relaxação para que os efeitos térmicos sejam sentidos por uma determinada amostra, sendo que este tempo depende do meio onde ocorre o fenômeno, este modelo é ideal para fenômenos que ocorrem em intervalos de tempo de excitação da ordem de milissegundos, como é o caso da Lente Térmica. Com a aplicação deste modelo hiperbólico, a equação diferencial que descreve o problema não possui solução analítica, com isso, foram usadas duas técnicas para sua solução. O Método das Linhas (método puramente numérico) e a Técnica da Transformada Integral Generalizada (método analítico-numérico). Estas duas técnicas tiveram excelentes taxas de convergência em suas soluções, com isso, foram coletados da literatura os parâmetros necessários para que este novo modelo pudesse ser testado para representar tais dados experimentais, foi observada uma excelente concordância da nova proposta de solução com os dados experimentais foi excelente, também mostrando a importância do tempo de relaxação no sinal de Lente Térmica, proporcionando assim uma nova perspectiva para futuros trabalhos para esta técnica espectroscópica.

Palavras-chave: Lente Térmica, Condução de Calor Hiperbólica, Método das Linhas, Técnica da Transformada Integral Generalizada, Tempo de relaxação.

ABSTRACT

The technique of Thermal Lens Spectroscopy has, in most cases, its temperature profile described by Fourier's Law of heat conduction. From this profile, the thermal lens signal represented by the intensity of a laser beam which crossed a sample is calculated. In this work, has successfully represent this distribution of temperature by hyperbolic heat conduction model of, also known as Non-Fourier heat conduction, such a model proposes the inclusion of a relaxation time for thermal effects are felt by a given sample, and this time depends on the environment where this phenomenon occurs, this model is ideal for phenomena occurring at short time intervals, such as the thermal lens, where the time intervals are of the order of milliseconds. With the application of hyperbolic model, the differential equation that describes the problem has no analytical solution, therefore, we used two techniques for their solution. The Method of Lines (purely numerical method) and the and the Generalized Integral Transform Technique (Analytical-numerical method). Both techniques have excellent rates of convergence in their solutions, therefore, was collected from the literature the parameters necessary for to enable this new model could be tested to represent such experimental data, was observed an excellent agreement of the new proposed solution with the experimental data was excellent, also showing the importance of relaxation time in the Thermal Lens signal, thus providing a new perspective for future work in this spectroscopic technique.

Keywords: Thermal Lens, Hyperbolic Heat Conduction, Method of Lines, Generalized Integral Transform Technique, Relaxation Time.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O conhecimento dos fenômenos foto térmicos que temos hoje em dia, em grande parte provém do século XIX, contudo, os avanços em espectroscopia só conseguiram alavancar na década de 60 do século passado, graças ao desenvolvimento do laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) que veio como um meio a confirmar teorias e alavancar desenvolvimento tecnológico nas mais diversas áreas de conhecimento, tais como: Física, Química, Biologia, Medicina, entre outras. A espectroscopia fototérmica é parte de um grupo de métodos de alta sensibilidade para medir características térmicas e absorção óptica de uma amostra. O processo baseia-se na mudança de estado térmico, provocando mudanças em suas propriedades termodinâmicas relacionadas a temperatura (Pedreira, 2005).

Neste ramo, a espectroscopia de Lente Térmica, é uma técnica de alta sensibilidade para caracterização dos parâmetros que dependem da temperatura, tais como, difusividade térmica (α), condutividade térmica (k), coeficiente de absorção (A), a variação do índice de refração (dn/dT), entre outras. A técnica é observada, quando se incide um feixe laser, de preferência de perfil gaussiano, não necessariamente deste perfil, em uma amostra transparente ou semitransparente, este laser provoca um aumento de temperatura que pode convergir ou divergir o feixe laser, de acordo com a variação do índice de refração. Como esse efeito depende da variação de temperatura da amostra, ficou conhecido como Lente Térmica.

Algumas das características que variam com a temperatura citadas acima, podem ser caracterizadas por outros métodos espectroscópicos. Contudo, estes métodos não são satisfatórios para materiais com coeficientes de absorção muito baixos. Neste ramo de estudos espectroscópicos, a Lente Térmica mostra ser mais eficiente. Nesta técnica, a etapa mais importante é descrever o perfil de temperatura induzido pelo aquecimento da amostra, que opera em uma potência da ordem de miliwatts ou watts, contudo, existem trabalhos que a técnica é usada até com lasers operando em megawatts. Desde a

descoberta desta técnica, este processo é descrito pelo modelo parabólico de condução de calor, representado pela Lei de Fourier, porém, a escala de tempo que os experimentos de Lente Térmica ocorrem é da ordem de milissegundos. Nesta escala, acreditamos que o modelo que melhor representa o perfil de temperatura na amostra, é o modelo de condução de calor hiperbólico. Pois nesta escala temporal podem levar a uma velocidade finita de propagação das ondas de calor.

1.1 Objetivos

Diante deste contexto, propomos o modelo hiperbólico de condução de calor para a espectroscopia de Lente Térmica, com isso esperamos uma sensibilidade ainda maior na determinação de parâmetros termodinâmicos (condutividade e difusividade térmica, por exemplo) ligados a temperatura. Este modelo é indicado para tempos curtos, pois em contrapartida à Lei de Fourier, não considera uma velocidade infinita na propagação das ondas de calor na amostra, temos assim, o objetivo geral deste trabalho. Como objetivos específicos, teremos as propostas para solução para esta nova metodologia, estas soluções serão representadas pelo Método das Linhas e a técnica da Transformada Integral Generalizada.

1.2 Estrutura do Trabalho

Após a revisão da literatura no Capítulo 2 deste trabalho, mostramos como é resolvida para o modelo hiperbólico (ou modelo de Não-Fourier) a distribuição de temperatura via método das linhas, apresentando uma solução puramente numérica. Em seguida temos outra solução via Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT), esta técnica apresenta um método híbrido, tanto analítico, como numérico, visto a dificuldade de soluções puramente analíticas pelo modelo de Não-Fourier.

Obtidos os modelos matemáticos no Capítulo 3, o Capítulo 4 apresentará todos os passos para o cálculo da intensidade do laser que chega ao detector, em seguida, nos Capítulos 5 e 6, teremos os resultados e a conclusão, respectivamente. O principal objetivo do trabalho é mostrar uma abordagem alternativa como formulação teórica para o sinal de Lente térmica, bem como a representação de seu perfil de temperatura.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Lente Térmica

Em 1965, J.P. Gordon, R.S. Moore, J.R. Whinnery, e os brasileiros Rogério César de Cerqueira Leite e Sérgio Pereira da Silva Porto, obtiveram os primeiros sinais dos experimentos de Lente Térmica (LT) ao introduzirem corante na cavidade de um laser de HeNe (Hélio-Neônio). Fato que foi observado acidentalmente, pois o experimento era voltado pra espectroscopia Raman , que é um efeito não linear na divergência do feixe. O efeito manifestava-se como um transiente da intensidade do laser e após um tempo, da ordem de segundos, o diâmetro de feixe era maior. Eles associaram este efeito a uma lente e a partir deste momento, o fenômeno observado ficou conhecido como efeito de "Lente Térmica". O efeito de LT ocorre em função da absorção de energia luminosa ao se incidir um feixe laser na amostra, contudo, outras propriedades do material que dependem da temperatura também mudam. O aumento da temperatura causa uma distorção no feixe ao passar pela amostra, e este por sua vez passa a carregar informação sobre as propriedades termo-ópticas da amostra, tal como o coeficiente térmico do índice de refração. J.P. Gordon chegou a uma fórmula para a distância focal da LT dentro da cavidade do laser.

Grabiner e colaboradores (1972), utilizaram uma configuração de Lente Térmica (LT) com dois feixes, um dos feixes era usado para excitar a amostra e o outro para observar a formação da LT (laser de prova), com esse modelo conseguiram observar a taxa de relaxação vibracional de gases como o cloreto de metila e o fluoreto de metila, mas esse modelo ainda mantinha a amostra dentro da cavidade do laser.

Hu e Winnery (1973), construíram um modelo teórico de lente térmica parabólico para amostras posicionadas fora da cavidade do laser, desenvolvendo também um método de detecção do efeito de LT fora da cavidade, foi nesse momento que houve a percepção de que a técnica de LT é de alta sensibilidade. Nesse experimento eles usaram feixe único, no caso um laser de modo transversal eletromagnético-00 (TEM_{00}).

Entretanto, mesmo definindo um modelo matemático para a determinação da intensidade do feixe de radiação (modelo parabólico), esse modelo também ainda não levava em conta as possíveis aberrações, comumente vistas em experimentos de LT.

Sheldon, Knight e Thorne (1982), propuseram a técnica do modo casado, que consistem em usar dois feixes de laser de modo colinear, um para excitar a amostra (chamado de feixe de excitação) e o outro para monitorar a formação da LT (chamado de feixe de prova ou de monitoramento), os feixes eram posicionados de modo a terem o mesmo diâmetro no centro da amostra, daí o nome modo casado. Eles tiveram cautela em observar os resultados obtidos anteriormente por Hu e Whinnery, e a partir de estudos mais detalhados, desenvolveram um modelo teórico para este modo.

Shen, Lowe e Snook (1992), criaram a teoria aberrante. Este modelo trata a propagação do feixe de laser através da teoria de difração de Fresnel-Kirchoff. O efeito da LT formada no meio é considerado como uma aberração quando está incluída na forma de uma pequena perturbação na propagação do feixe, especificamente uma alteração na fase do sinal. O modelo aberrante de LT prevê precisamente a variação do efeito em função do tempo de medida e da posição relativa, entre o foco do feixe de laser e a posição da amostra. Neste modelo, amplamente usado atualmente, não há a necessidade dos feixes de excitação e monitoramento terem o mesmo diâmetro na amostra, sendo assim, conhecido como modo descasado.

Marcano et al. (2006), em um trabalho experimental aprimoraram a técnica de LT, propondo uma configuração diferente para os feixes duplos luminosos, criando o modo otimizado para o sistema de LT, na qual o feixe de excitação manteria a forma proposta anteriormente e o feixe de monitoramento seria colimado, ou seja, teria propagação paralela, envolvendo o feixe de excitação. Desta forma, o sistema teria uma configuração, para a qual o sinal de LT, independe de alguns parâmetros do feixe de prova. No entanto, esse modelo apresentava um tempo de formação da lente térmica elevado

2.2 O Modelo Hiperbólico de Condução de Calor

Os primeiros trabalhos a apresentar a Lei de Fourier Modificada, foram os trabalhos de Cattaneo (1948-1958), propondo teoricamente uma maneira de corrigir as

limitações que contém na Lei de Fourier. A equação de difusão tem a propriedade de que um pulso de calor aplicado à superfície de um corpo é imediatamente sentido em todas as partes do corpo, não importando a distância. Assim diz-se que a velocidade de propagação é infinita. Usando argumentos da teoria cinética dos gases, *Cattaneo* derivou a equação do fluxo de calor para a forma:

$$q + \tau_r \frac{\partial q}{\partial t} = -K \nabla T \quad (2.1)$$

Onde τ_r é o tempo de relaxação. Cabe salientar aqui que em ambos os trabalhos de *Cattaneo* (1948), as modificações da lei de *Fourier* foram obtidas teoricamente tendo sido derivadas somente para gases ideais.

Um levantamento de vários esquemas para a solução da equação de condução de calor de Fourier Modificada (hiperbólica) pode ser mostrado em três categorias principais: soluções analíticas, numéricas e híbridas (quando necessário, usam-se métodos com união de partes analíticas e numéricas). Devido à complexidade da equação de condução de calor hiperbólica, apenas alguns casos simples podem ser resolvidos analiticamente.

Alguns trabalhos que usaram métodos para solucionar analiticamente serão citados, como o de Carey et al. (1982), que usou Transformada de Laplace para um problema sem fontes de calor externa. Outros métodos para a obtenção de resultados com problemas de condução de calor hiperbólica são métodos numéricos, um dos casos é o trabalho de Ozisik (1992), usou para fontes de calor também geradas por um pulso lasers, que sabemos que o modelo de Fourier não é o adequado. Neste trabalho o problema foi modelado tanto para meios finitos quanto semi-infinitos, o resultado foi o esperado teoricamente, com o modelo hiperbólico mostrando-se precisão que o modelo parabólico, sendo que as diferenças entre eles foram menores conforme se diminuía os intervalos entre os pulsos.

Lewandowska (2005), conseguiu solução analítica, por mesmo procedimento para um meio finito aquecido simetricamente em ambos os lados, o mesmo caso já havia sido estudado por Torii e Yang (2005), que propuseram uma solução numérica que se mostrou acurada para fontes de calor periódicas, como na forma de senos, para pulsos a solução de Lewandowska mostrou melhor concordância.

Problemas de condução de calor hiperbólico podem também ser resolvidos por métodos híbridos, a fim de diminuir os erros numéricos obtidos com soluções puramente numéricas. Tzer-Ming Chen (2006), propôs um método híbrido combinado à transformada de Laplace (para um problema de condução de calor em camadas finas) com métodos numéricos para o caso. A solução apresentava oscilações na frente de onda, esse problema foi retirado com essa nova formulação, tornando os resultados satisfatórios.

Al Khairy (2008), propôs solução analítica também via transformada de Laplace, com a inversão da transformada calculada pelo programa Mathematica, com a solução obtida comparou com modelos parabólicos, foram estudadas três fontes de calor: uma fonte constante, outra instantânea e finalmente, uma exponencial. Nos três casos as soluções obtidas com a lei de Fourier modificada mostraram melhor adequação que a Lei de Fourier, principalmente quanto mais próximo se está da fonte de calor, devido a velocidade finita da frente de onda de calor.

Ching-Yu (2008), usou o método de Newton-Raphson modificado, partindo de diferenças finitas para problemas em duas dimensões, método testado em casos onde já se havia obtido anteriormente soluções analíticas, a diferenças entre os resultados previamente conhecidos foram menores que 1%, mostrando a validade do método proposto. Tianchan e Dai (2008), usando o método de diferenças finitas, também para problemas em duas dimensões, fez sua formulação para lasers aquecendo placas finas de ouro e cromo, comparou seus resultados com outros artigos que usaram o modelo parabólico, foi observada uma ligeira diferença entre eles, que segundo os autores, necessita de um estudo mais aprofundado para evidenciar as causas.

Wang e Li (2008), fizeram exemplos com resultados por métodos numéricos, mais especificamente para corpos com rachaduras, com fontes de calor sendo consideradas nas fendas e outro caso pra uma fenda isolada termicamente, esses casos foram estudados em materiais piezoelétricos. Comparando com o modelo parabólico, as diferenças e a precisão do modelo hiperbólico foram maiores conforme a fenda e o comprimento das camadas diminuem.

Naveira et al. (2008), publicaram um trabalho para um caso transitório laminar com convecção forçada sobre placas de espessura não desprezível, através de GITT

foram apresentas soluções para o problema com fonte de calor na interface líquido-sólido. O método só foi utilizado após simplificação da equação do problema, depois de gerados os sistemas das mesmas, foi usado métodos das linhas, os resultados foram satisfatórios.

Cotta et al. (2009), propuseram uma solução híbrida pela Técnica da Transformada Integral Generalizada, conhecida por GITT (Generalized Integral Transform Technique) para um modelo de condução de calor hiperbólica em uma placa finita, os resultados foram comparados para o mesmo modelo encontrados na literatura, com isso os resultados se mostraram confiáveis, tanto quando se compara com métodos numéricos, quanto à analíticos.

Chi-Chang (2009), usou métodos de elementos finitos combinados com o método dos mínimos quadrados, para construir um procedimento não-iterativo inverso da equação de calor, este foi usado para problemas com corpos de geometria irregular, os resultados foram satisfatórios, o autor só deixa uma ressalva para corpos de geometria dentada, dizendo que ao usar esse procedimento os erros são mais difíceis de serem preditos e/ou controlados.

Yilbas *et al.* (2009) também obteve resultados satisfatórios analiticamente via transformadas de Fourier e Laplace, derivando a lei de Fourier modificada da equação de transporte de Boltzmann, usou laser de pulso curto como fonte de calor.

Cotta, Quaresma, Macêdo, Fonseca e Orlande (2010), resolveram a equação de Fourier modificada para um modelo com nanofluidos via Técnica da Transformada integral Clássica (CITT), com as linhas de calor geradas por uma sonda, os resultados foram comparados com as soluções do modelo parabólico, os efeitos hiperbólicos só foram significativos para tempos muito pequenos.

Mishra e Sahar (2012), analisaram a condução de calor hiperbólica para geometria cilíndricas e esféricas, com uma aplicação do método das estruturas de Boltzmann, que mostrou concordância com a literatura, computacionalmente este método teve desempenho melhor que o método de volumes finitos encontrados em outras publicações.

2.3 O Método das Linhas

O Método das Linhas (MOL) é uma técnica numérica bem estabilizada utilizada para analisar vários fenômenos envolvidos na engenharia e áreas afins. A faixa de aplicação deste método tem aumentado drasticamente nos últimos anos. O método é baseado em Diferenças Finitas (DF) para a solução equações diferenciais parciais (EDPs) dependentes do tempo bastante consolidada e encontrada na literatura, Özisik (1993).

Na engenharia química, o método das linhas tem sido utilizado para analisar o escoamento e adsorção de gases em uma coluna de leito fixo, Ferreira *et al.* (2012). Segundo Ferreira, o MOL é um procedimento geral para a solução de equações diferenciais parciais (EDPs) dependentes do tempo. Analisar o processo de extração supercrítica com um modelo de duas fases com equilíbrio linear, Pereira *et al.* (2013), e não linear, Macêdo *et al.* (2013) e outras análises.

Este método é considerado como um método de diferença finita especial, porém mais efetivo com relação a precisão e tempo computacional do que o método de diferença finita normal. Isto envolve basicamente a discretização de uma dada equação diferencial com uma, duas ou três direções enquanto é usado a solução analítica na direção remanescente. O MOL tem seus méritos por ser ambos, método de diferença finita e método analítico, Sadiku e Obiozor (2002).

Basicamente, o método das linhas tem as seguintes propriedades que justificam o seu uso:

- a) Eficiência Computacional: o caráter semi-analítico da formulação conduz para um algoritmo simples e compacto, que produz resultados precisos e com esforços computacionais melhores do que outras técnicas.
- b) Habilidade Numérica: pela separação da discretização do espaço e do tempo, é fácil estabelecer a estabilidade e convergência para uma ampla gama de problemas.
- c) Redução do esforço da programação: por fazer uso de um estado da arte bem documentado e software de equações diferenciais ordinárias bem confiáveis, os esforços da programação podem ser substancialmente reduzidos.
- d) Redução do tempo computacional: desde que somente uma pequena quantidade de linhas discretizadas são necessárias na computação, não

existe a necessidade de resolver um grande sistema de equações, e portanto um tempo computacional reduzido.

2.4 A Técnica da Transformada Integral Generalizada

A técnica da transformada integral é um enfoque clássico bem conhecido na solução de certas classes de problemas de difusão, lineares e transformáveis (LUIKOV, 1973; ÖZISIK, 1980). Mikahailov & Özisik (1984) compilam uma série de trabalhos que utilizam as ideias da transformação integral na solução exata de problemas em difusão de calor e massa. Ao longo das últimas décadas, após o trabalho pioneiro de Özisik & Murray (1974) esta metodologia de solução foi amplamente estendida para permitir soluções analíticas aproximadas em uma vasta gama de problemas não-transformáveis, como mostrando nos trabalhos de Leite & Özisik (1980), Cotta & Özisik (1986, 1987), Cotta (1992, 1993, 1994) e Cotta & Mikhailov (1990 e 1993). Exemplos de alguns desses problemas são problemas com coeficientes variáveis, coeficientes variáveis nas condições de contorno, problemas que envolvem um problema auxiliar complicado e problemas não lineares.

Assim como o método da transformada integral clássica (também conhecida como método de expansão em autovalores) o método da transformada integral generalizada ganhou um enfoque analítico-numérico pela aplicação de uma etapa numérica após a transformação analítica do problema, oferecendo ao usuário precisão controlada, onde a diferença em relação a outros métodos numéricos está na garantia da convergência das soluções para ordens crescentes de truncamento nas séries, e um desempenho computacional bastante eficiente para uma grande variedade de problemas, os quais são classificados e sistematicamente apresentados com diversas aplicações (Cotta, 1993), incluindo formulação não-lineares de interesse em aplicação de transferência de calor e escoamento de fluidos.

Este método difere dos métodos numéricos até então utilizados para solução de problemas de caráter fortemente não linear e acoplados, pois não há necessidade de discretização do domínio para geração de malhas. Além disso, para melhorar a precisão do método o esforço computacional exigido é relativamente moderado em comparação com os métodos numéricos tradicionais principalmente quando se eleva a dimensão do problema a ser resolvido. Esses comportamentos são originados devido à natureza híbrida da solução, pois a etapa analítica é aplicada sobre todas menos uma variável independente e a tarefa numérica é sempre reduzida à integração de um sistema

diferencial ordinário em apenas uma coordenada. Uma característica desse método, pode ser a necessidade de aplicação de filtros, este passo é usado quando o problema original não possui condições de contorno homogêneas, basicamente, estes filtros são soluções de ordem mais baixa do mesmo problema com as mesmas condições de contorno não homogêneas, assim um novo potencial é dado diminuindo o potencial original do filtro. Como o problema original e o filtro tem as mesmas condições de contorno não homogêneas, o novo potencial apresenta condições de contorno homogêneas. Logo a técnica é aplicada no problema filtrado e a solução do problema original pode ser avaliada somando a solução do problema filtrado com o filtro (Cotta, 1997).

A aplicação da Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) pode ser resumida nos seguintes passos:

- i. Definição do problema auxiliar, com base, por exemplo, nos termos difusivos da formulação original.
- ii. Solução do problema auxiliar e obtenção das autofunções, autovalores, normas e propriedades de ortogonalidade;
- iii. Desenvolvimento do par transformada-inversa;
- iv. Transformação Integral do problema diferencial parcial em um sistema de equações algébricas ou diferenciais ordinárias acopladas ou ainda outra equação diferencial parcial;
- v. Truncamento do sistema infinito e solução numérica do sistema diferencial resultante para obtenção dos campos transformados;
- vi. Obtenção do potencial original, fazendo-se uso da fórmula de inversão.

A ideia básica na técnica é a não necessidade de encontrar-se uma transformação integral analítica. Assim, pode-se escolher um problema auxiliar (de autovalor) que seja característico do problema original ou não, desenvolver o par transformada-inversa e efetuar a transformação integral chegando-se a um sistema ordinário infinito e acoplado.

Após o truncamento em ordem suficientemente grande para a precisão requerida, automaticamente selecionada durante o próprio processo de solução, o sistema diferencial ordinário é resolvido numericamente por algoritmos bem estabelecidos, com controle automático de erro, disponíveis em bibliotecas científicas. A fórmula explícita de inversão fornece então uma representação analítica nas demais variáveis independentes eliminadas pela transformação integral.

Capítulo 3

Aplicação do Modelo Hiperbólico na técnica de Lente Térmica

3.1 A Técnica da Lente Térmica

Primeiramente, veremos alguns aspectos da importância da formulação da equação da difusão aplicada a Lente Térmica, como por exemplo, descrever os motivos do laser ser usado como fonte de calor, a formulação pela Lei de Fourier e posteriormente a formulação propriamente dita do modelo hiperbólico. Conforme dito anteriormente, a descoberta da técnica de Lente Térmica, se deu pelo advento do laser como fonte luminosa e de calor em diversas áreas.

3.1.1 O Laser na Lente Térmica

O laser é a fonte de luz usada normalmente nas experiências de espectroscopia foto térmica, pelo fato de ser uma fonte de luz coerente, de alta energia e colimada, além disso a intensidade do feixe apresenta distribuição radial. Dentre os vários tipos de lasers existentes, o perfil mais usado em técnicas foto térmicas é o que tem perfil gaussiano. Aqueles que operam no modo gaussiano fundamental (conhecido como TEM_{00} , os sub índices indicam as diferentes distribuições densidade de energia luminosa no laser) são comumente usados e têm essa preferência devido às simples operações matemáticas envolvidas, facilitando o entendimento dos experimentos foto térmicos. Os lasers são usados em LT, por apresentarem uma facilidade muito grande para ajuste e determinação de sua intensidade, sua intensidade apresenta um comportamento bem definido e pode ser conhecida *a priori*. Em seguida, mostraremos tais características dos lasers, como o perfil de densidade gaussiana da intensidade e distribuição radial de calor, na Figura 3.1, e as diferentes distribuições do feixe laser, na Figura 3.2:

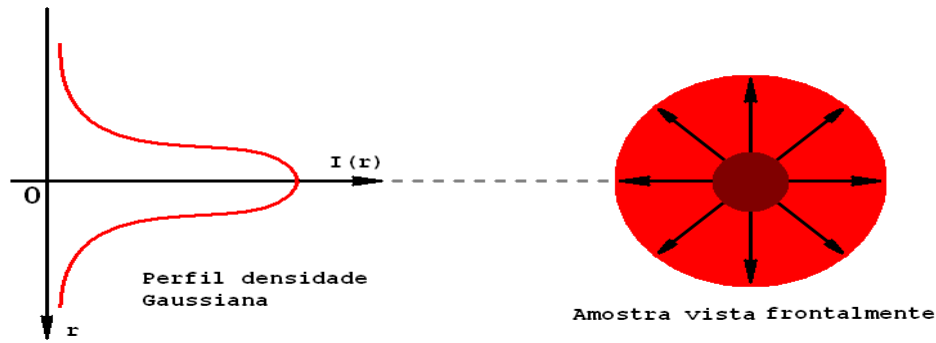


Figura 3.1: Características de um feixe gaussiano.

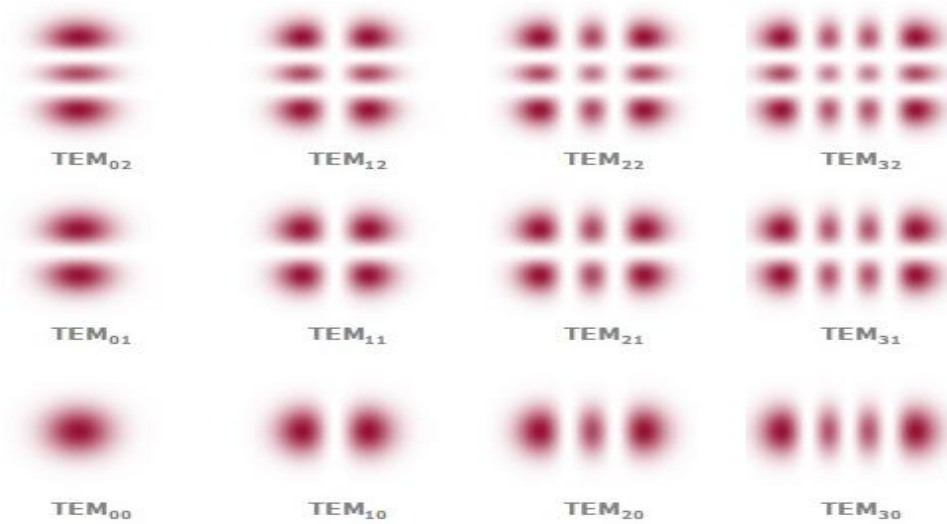


Figura 3.2: Características de diferentes tipos de lasers.

Para esses lasers, o perfil de intensidade $I(r)$ é dado em coordenadas cilíndricas como (SIGMAN, 1971):

$$I(r) = \frac{2P}{\pi\omega(z)^2} \exp\left[2\frac{r^2}{\omega(z)^2}\right] \quad (2.2)$$

Sendo P , r , z , e $\omega(z)$, respectivamente, a potência do laser (mW), a coordenada radial do laser, o eixo de propagação e o raio do feixe ao longo do eixo de propagação.

Outro ponto importante, é mostrar como se propaga um laser de perfil gaussiano, o diâmetro de um feixe laser no modo gaussiano fundamental é mostrado na figura abaixo:

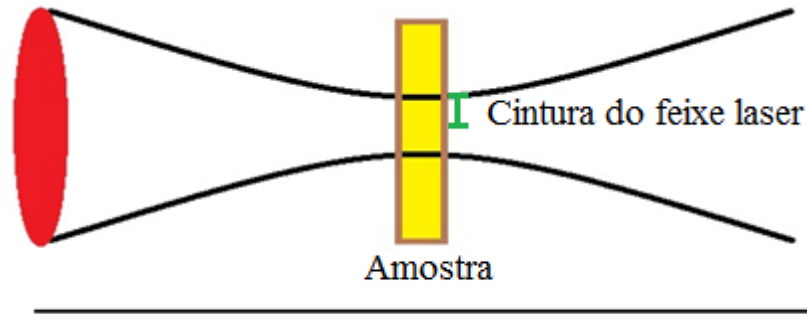


Figura 3.3: Representação lateral mostrando a propagação de um feixe laser.

Como podemos observar na Figura 3.3, o laser apresenta regiões que podem ser conhecidas e/ou determinadas facilmente antes do uso na técnica de LT, de acordo com o aspecto geométrico de medição experimental, podem ser medidas a “cintura” do feixe na amostra, sendo ela a mínima ou de determinado diâmetro de acordo com o eixo z a que se tem conhecimento ou seja melhor aplicado. Além disso, eles possuem um amplo espectro em potência que pode ser usado, tendo potências que partem de miliwatts a megawatts.

Dentre os lasers mais usados em LT, destacam-se o de Neônio e o de Argônio, sendo o primeiro citado, o mais comum usado. A escolha de um laser depende de sua potência e absorção no material a ser analisado, a fim de melhorar as medidas e principalmente não causar danos a amostra. Conhecido o laser e suas características como o termo fonte de calor na LT, podemos escrever a equação da distribuição de calor para este efeito térmico.

3.1.2 Procedimento teórico para cálculo da intensidade do feixe

Neste momento, veremos como foram feitos até hoje o desenvolvimento de alguns modelos teóricos de LT, bem como, o nosso modelo de proposta de solução para e

Espectroscopia de Lente Térmica. O que todos os modelos têm em comum até hoje, são esses três passos (Pedreira, 2005):

- a) A equação de difusão de calor deve ser resolvida para as condições de contorno particulares do sistema, para permitir conhecermos a distribuição de temperatura no interior da amostra.
- b) A distribuição de temperatura, obtida da distribuição de calor, deve ser convertida em um perfil de índice de refração (dn/dT) e que seja explicitamente dependente do tempo.
- c) A interação do feixe de prova com o perfil do índice de refração é usada para prever mudanças no perfil de intensidade do feixe de prova que emerge da amostra.

Até o presente trabalho, no primeiro passo, a formulação da equação de difusão de calor é feita pela Lei de Fourier, este modelo parabólico de condução de calor, é bem representado para casos onde a transmissão ocorre em escalas de tempo elevadas, contudo, em Lente Térmica esta escala é da ordem de milissegundos.

Com os cálculos da distribuição de calor na amostra feitos, os trabalhos anteriores divergem em relação ao terceiro passo apresentado, alguns consideram a lente como sendo perfeita, outros trabalhos limitam as configurações experimentais do feixe de prova e excitação. Neste trabalho, vamos considerar neste último passo o modelo proposto por Shen (1992), pois este modelo engloba todas as configurações possíveis, incluindo casos particulares anteriormente propostos.

Desta maneira, adotando o modelo de Shen (1992) teremos a seguinte sequência para o cálculo da intensidade do laser que chega a um detector após este feixe atravessar uma amostra:

1. Encontrar uma expressão para o aumento local da temperatura $\Delta T_{(r,t)}$:
2. Determinar dn/dT a partir de $\Delta T_{(r,t)}$, e
3. Calcular a intensidade do campo elétrico resultante no detector, utilizando a teoria de difração de Fresnel.

De acordo com a Lei de Fourier, teremos a expressão para a variação de temperatura em relação ao tempo e coordenada radial da seguinte forma (Gordon, 1965):

$$\frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial t} = \frac{k}{r} \cdot \frac{1}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial r} \right) + \frac{1}{\rho c} \frac{2AP_e}{\pi \omega_{0e}^2} \exp \left[2 \frac{r^2}{\omega_{0e}^2} \right] \quad (3.3a)$$

Que possui como condições iniciais:

$$t = 0 \Rightarrow \Delta T_{(r,t)} = 0 \quad (3.3b)$$

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial r} = 0 ; r \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta T_{(r,t)} = 0 \quad (3.3c)$$

Onde k , ρ , c , A , P_e e ω_{0e} , são respectivamente, a condutividade térmica ($\text{J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), a massa específica (g/cm^3), o calor específico ($\text{J} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$), a absorção (m^{-1}), a potência do laser de excitação (mW) e a cintura mínima do feixe de excitação (cm). Esta equação diferencial parcial, tem solução analítica e pode ser obtida por vários métodos, como por Função de Green e por transformadas de Laplace, Fourier e Hankel, por exemplo. A solução é:

$$\Delta T_{(r,t)} = \frac{2AP_e}{\rho c \pi \omega_{0e}^2} \int_0^t \exp \left(\frac{-2r^2}{1 + 2t'/t_c} \right) \frac{dt'}{1 + 2t'/t_c} \quad (3.4)$$

Sendo:

$$t_c = \frac{\omega_{0e}^2}{4D} \quad (3.5)$$

Este termo é denominado tempo característico, ele calcula o tempo de formação da lente térmica. Onde D é a difusividade térmica da amostra, que é calculada pela razão entre condutividade sobre o produto de densidade e calor específico.

Após o cálculo do perfil de temperatura, é necessário seguir os passos do modelo de Shen (1992), que serão detalhados mais adiante para o cálculo da intensidade. Com a temperatura calculada pela Lei de Fourier, a intensidade do laser tem como resultado (Shen, 1992):

$$I(t) = I_{(0)} \left\{ \left[1 - \frac{\theta}{2} t g^{-1} \left[\frac{2mV}{[(1+2m)^2 + V^2] \frac{t_c}{2t} + 1 + 2m + V^2} \right] \right]^2 + \left[\frac{\theta}{4} \ln \left[\frac{[1 + 2m/(1 + 2t/t_c)]^2 + V^2}{(1 + 2m)^2 + V^2} \right] \right]^2 \right\} \quad (3.6)$$

Os parâmetros m , V e θ estão definidos como:

$$m = \frac{\omega_{1p}^2}{\omega_{0e}^2} \quad (3.7)$$

$$V = \frac{z_1}{z_{cp}} \quad (3.8)$$

$$\theta = -\frac{AP_e L}{k\lambda_p} \cdot \frac{dn}{dT} \quad (3.9)$$

Onde ω_{1p} é a cintura mínima do laser de prova na amostra (cm), z_1 é a distância entre as cinturas mínimas dos feixes de excitação e de prova, z_{cp} é o parâmetro confocal (ou parâmetro de Rayleigh) do feixe de prova, L é a espessura da amostra e λ_p , é o comprimento de onda do laser de prova.

Entretanto, esta solução só apresenta resultado satisfatório com os dados experimentais quando o termo logaritmo é suprimido, com isso a solução toma a seguinte configuração:

$$I(t) = I_{(0)} \left\{ 1 - \frac{\theta}{2} t g^{-1} \left[\frac{2mV}{[(1+2m)^2 + V^2] \frac{t_c}{2t} + 1 + 2m + V^2} \right] \right\}^2 \quad (3.10)$$

Sabendo disso, este trabalho sugere uma mudança no primeiro passo, ao substituir a Lei de Fourier, pelo modelo Hiperbólico de condução de calor, com essa proposta, o modelo para a difusão apresenta a seguinte configuração com suas condições de contorno:

$$\tau_r \frac{\partial^2 \Delta T_{(r,t)}}{\partial t^2} + \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial t} = \frac{k}{r} \cdot \frac{1}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial r} \right) + \frac{1}{\rho c} \frac{2AP_e}{\pi \omega_{0e}^2} \exp \left[-2 \frac{r^2}{\omega_{0e}^2} \right] \quad (3.11a)$$

$$t = 0 \Rightarrow \Delta T_{(r,t)} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial \tau} = 0 \quad (3.11b)$$

$$r = 0 \Rightarrow \frac{\partial \Delta T_{(r,t)}}{\partial r} = 0 ; \quad r \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta T_{(r,t)} = 0 \quad (3.11c)$$

Onde τ_r é o tempo de relaxação, este termo é definido como $\tau_r = 1/c$, onde c é a velocidade específica de propagação das ondas de calor no meio.

Para termos uma melhor análise e evitar erros numéricos, escreveremos a Equação 3.11 em sua forma adimensionalizada:

$$\tilde{\tau} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{4\eta} \cdot \frac{1}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) + \frac{AP_e}{2K\pi T_r} \exp[-2\eta^2] \quad (3.12a)$$

$$\tau = 0 \Rightarrow \theta = 0 ; \quad \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = 0 \quad (3.12b)$$

$$\eta = 0 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = 0 ; \quad \eta \rightarrow \infty \Rightarrow \theta = 0 \quad (3.12c)$$

Nesta expressão, teremos os grupos adimensionais dados da seguinte forma:

$$\theta = \frac{\Delta T}{T_r} \quad (3.13a)$$

$$\tau = \frac{Dt}{\omega_{0e}^2} \quad (3.13b)$$

$$\eta = \frac{r}{\omega_{0e}} \quad (3.13c)$$

$$\tilde{\tau} = \frac{D\tau}{\omega_{0e}^2} \quad (3.13d)$$

Definida a equação, tentamos resolvê-la analiticamente via transformadas de Laplace, Fourier e Hankel, mas com nenhum desses métodos obtivemos solução, por isso resolveremos a mesma por dois métodos, um puramente numérico, usando o Método das Linhas (por sua confiabilidade e estabilidade), e um outro método híbrido, usando a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT).

3.2 Soluções via Método das Linhas

Usaremos primeiramente o Método das Linhas, para resolução da equação em sua forma adimensionalizada. Este é um método numérico muito usado para resolver equações diferenciais parciais (EDPs). O método, de maneira geral, consiste em discretizar todas as variáveis de uma EDP, exceto uma delas, em geral a variável temporal é mantida contínua, obtendo assim, um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs).

No caso que será resolvido neste trabalho, serão procedidos os seguintes passos:

- a) Discretização da variável espacial.
- b) Transformação da EDP para obtenção do sistema de EDOs.
- c) Solução do sistema de equações através de um algoritmo computacional.

Entretanto, antes da discretização da variável espacial faremos a seguinte mudança de variável em (3.12), de modo que o novo domínio seja limitado ($0 < \xi < 1$), esta mudança de variável facilita a escrita de um algoritmo computacional para a solução do sistema de equação que o método fornecerá:

$$\xi = 1 - \frac{1}{\eta + 1} \Rightarrow \eta = \frac{1}{1 - \xi} - 1 \Rightarrow \eta = \frac{\xi}{1 - \xi} \quad (3.14)$$

E o termo espacial da equação de distribuição de temperatura se torna:

$$\frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) = \frac{(1 - \xi)}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\xi}{(1 - \xi)} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial \eta} \right] \cdot \frac{\partial \xi}{\partial \eta} \quad (3.15)$$

Com isso, teremos após manipulações algébricas:

$$\frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) = (1 - \xi)^3 \left\{ \frac{(1 - 2\xi)}{\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + (1 - \xi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \right\} \quad (3.16)$$

Substituindo a Equação 3.16 na Equação 3.12, a equação da distribuição de temperatura com a mudança de variável e com a mudança nas condições de contorno fica da forma:

$$\tilde{\tau} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{(1 - \xi)^3}{4} \left\{ \frac{(1 - 2\xi)}{\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + (1 - \xi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \right\} + Q(\xi) \quad (3.17a)$$

$$\tau = 0 \Rightarrow \theta = 0 ; \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = 0 \quad (3.17b)$$

$$\xi = 0 \Rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0 ; \xi = 1 \Rightarrow \theta = 0 \quad (3.17c)$$

O termo fonte de calor, também sofre mudança, com isso:

$$Q(\xi) = C_1 \cdot \exp \left[-2 \frac{\xi^2}{(1-\xi)^2} \right] \quad (3.18)$$

Discretizando a variável espacial (Figura 3.4), usando diferenças finitas centrais, teremos:

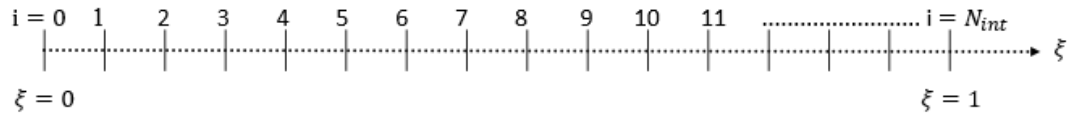


Figura 3.4: Representação da malha do problema.

$$\delta = \frac{(1-2\xi)}{\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + (1-\xi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \quad (3.19)$$

$$\delta_i = \frac{(1-2\xi_i)}{\xi} \cdot \frac{(\theta_{i+1} - \theta_{i-1}))}{2\Delta\xi} + (1-\xi_i) \frac{(\theta_{i+1} - 2\theta_i + \theta_{i-1}))}{\Delta\xi^2} \quad (3.20)$$

$$i = 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right)_{\xi=0} = 0 \Rightarrow \theta_0 = \frac{(4\theta_1 - \theta_2)}{3} \quad (3.21)$$

$$i = N_{int} \Rightarrow \theta_{N_{int}} = 0 \quad (3.22)$$

Transformando a EDP num sistema de EDOS:

$$\tilde{\tau} \frac{d^2 \theta_i}{d\tau^2} + \frac{d\theta_i}{d\tau} = \frac{(1-\xi_i)^3}{4} \cdot \delta_i + Q_i \quad (3.23a)$$

$$\tau = 0 \Rightarrow \theta_i = 0 ; \frac{d\theta_i}{d\tau} = 0 \quad (3.23b)$$

Analogamente teremos para o termo fonte:

$$Q_i = C_1 \cdot \exp \left[-2 \frac{\xi_i^2}{(1-\xi_i)^2} \right] \quad (3.24)$$

Este sistema de equações de 2ª ordem no tempo deve ser reescrito de forma que se transforme num sistema de equações diferenciais de 1ª ordem, e este sistema será resolvido pela rotina IVPAG (esta rotina é usada com frequência em engenharia, apresentado confiabilidade em seu uso, a descrição das rotinas usadas neste trabalho estão no Apêndice) da biblioteca IMSL em um código computacional escrito em linguagem Fortran, e esta rotina somente resolve sistemas de equações diferenciais desta ordem, dessa maneira usaremos as mudanças de variáveis:

$$Y_i = \theta_i \quad (3.25a)$$

$$Y_{i+N} = \frac{d\theta_i}{d\tau} \quad (3.25b)$$

$$\frac{dY_{i+N}}{d\tau} = \frac{d^2\theta_i}{d\tau^2} \quad (3.25c)$$

Deste modo, temos o sistema (3.23a-b) reescrito pelas Equações 3.26:

$$\frac{dY_i}{d\tau} = Y_{i+N} \quad (3.26a)$$

$$\tilde{\tau} \frac{dY_{i+N}}{d\tau} + Y_{i+N} = \frac{(1-\xi)^3}{4} \cdot \delta_i + Q_i \quad (3.26b)$$

$$\tau = 0 \Rightarrow Y_i = 0 \quad ; \quad Y_{i+N} = 0 \quad (3.26c)$$

3.3 Solução através da GITT

O problema da distribuição de temperatura para a Lente Térmica, será resolvido neste subitem por GITT com a mesma mudança de variável do Método das Linhas. Este método tem uma forma híbrida, com equações resolvidas analiticamente e numericamente, os passos para a obtenção da solução são os seguintes:

Primeiramente, escolhemos o problema auxiliar de autovalor apropriado para a equação em que se aplica o método, de forma que leve o máximo de informação possível do fenômeno estudado, neste caso foi escolhido o seguinte problema com suas condições de contorno:

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d\psi_{l(\xi)}}{d\xi} \right) + \mu_l^2 \xi \psi_{l(\xi)} = 0 \quad (3.27a)$$

$$\xi = 0 \Rightarrow \psi'_l = 0 \quad (3.27b)$$

$$\xi = 1 \quad \Rightarrow \quad \psi_l = 0 \quad (3.27c)$$

Com isso chegamos a seguinte solução do problema auxiliar:

$$\psi_{l(\xi)} = J_0(\mu_l \xi) \quad (3.28)$$

$$\tilde{\psi}_l = \frac{\psi_l}{\sqrt{N_l}} \quad (3.29)$$

Onde $\tilde{\psi}_l$ representa as autofunções normalizadas, e μ_l representa os autovalores. Para estes cálculos é usada a rotina ZREAL da biblioteca IMSL. Com a integral de normalização com as condições de ortogonalidade, dadas por:

$$N_l = \int_0^1 \xi \psi_l \psi_m d\xi = \begin{cases} 0, & l \neq m \\ N_l, & l = m \end{cases} \quad (3.30)$$

$$N_l = \frac{1}{2} J_1^2(\mu_l) \quad (3.31)$$

Que nos permite definir o seguinte par Transformada-Inversa, pois esta solução é o núcleo de transformação, desta maneira:

$$\bar{\theta}_{l(\tau)} = \int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \theta d\xi \quad \textit{transformada}, \quad (3.32)$$

$$\theta_{(\xi,\tau)} = \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\psi}_{m(\xi)} \bar{\theta}_{m(\tau)} \quad \textit{inversa}, \quad (3.33)$$

Com o par *transformada-inversa* definidos, o passo seguinte é utilizar o operador transformada na Equação de transferência de calor, com isso:

$$\xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \left\{ \tilde{\tau} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{(1-\xi)^3}{4} \left\{ \frac{(1-2\xi)}{\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + (1-\xi) \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} \right\} + Q_{(\xi)} \right\} d\xi \quad (3.34)$$

Para o primeiro termo da Equação 3.34, teremos:

$$\tilde{\tau} \int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \tau^2} d\xi = \tilde{\tau} \frac{d^2 \bar{\theta}_l}{d\tau^2} \quad (3.35)$$

Consequentemente para o segundo termo da Equação 3.34:

$$\int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} d\xi = \frac{d \bar{\theta}_l}{d\tau} \quad (3.36)$$

Para o terceiro termo da Equação 3.34:

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{(1-\xi)^3 (1-2\xi)}{4\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} d\xi &= \frac{1}{4} \int_0^1 \tilde{\psi}_{l(\xi)} (1-\xi)^3 (1-2\xi) \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} d\xi \\
&= \frac{1}{4} \int_0^1 \tilde{\psi}_{l(\xi)} (1-\xi)^3 (1-2\xi) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\psi}_{m(\xi)} \bar{\theta}_{m(\tau)} \right] d\xi \\
&= \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\int_0^1 (1-\xi)^3 (1-2\xi) \cdot \tilde{\psi}_{l(\xi)} \tilde{\psi}'_{m(\xi)} d\xi \right) \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)}
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Para efeito de simplificação, chamamos o termo de dentro dos parênteses de:

$$A_{1lm} = \int_0^1 (1-\xi)^3 (1-2\xi) \cdot \tilde{\psi}_{l(\xi)} \tilde{\psi}'_{m(\xi)} d\xi \tag{3.38}$$

Onde esta integral será resolvida pela rotina computacional QDAG, da biblioteca IMSL. Logo:

$$\int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{(1-\xi)^3 (1-2\xi)}{4\xi} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \xi} d\xi = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} A_{1lm} \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)} \tag{3.39}$$

Para o quarto termo da Equação 3.34, vamos ter:

$$\begin{aligned}
&\int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{(1-\xi)^4}{4} \cdot \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} d\xi \\
&= \frac{1}{4} \int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} (1-\xi)^4 \cdot \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{\psi}_{m(\xi)} \bar{\theta}_{m(\tau)} \right] d\xi \\
&= \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\int_0^1 \xi (1-\xi)^4 \tilde{\psi}_{l(\xi)} \tilde{\psi}''_{m(\xi)} d\xi \right) \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)}
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Simplificando o termo entre parênteses da Equação 3.40, teremos:

$$A_{2lm} = \int_0^1 \xi (1-\xi)^4 \tilde{\psi}_{l(\xi)} \tilde{\psi}''_{m(\xi)} d\xi \tag{3.41}$$

Com isso:

$$\int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \frac{(1-\xi)^4}{4} \cdot \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} d\xi = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} A_{2lm} \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)} \quad (3.42)$$

Para o quinto termo da Equação 3.34, relativo a fonte de calor, teremos:

$$\bar{Q}_l = \int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} Q_{(\xi)} d\xi = C_1 \int_0^1 \xi \tilde{\psi}_{l(\xi)} \exp \left[-2 \frac{\xi^2}{(1-\xi)^2} \right] d\xi \quad (3.43)$$

Após explicitarmos os termos com o operador transformada, temos o seguinte sistemas de equações diferenciais ordinárias:

$$\tilde{\tau} \frac{d^2 \bar{\theta}_l}{d\tau^2} + \frac{d\bar{\theta}_l}{d\tau} = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} (A_{1lm} + A_{2lm}) \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)} + \bar{Q}_l \quad (3.4a)$$

$$\tau = 0 \Rightarrow \bar{\theta}_l = \frac{d\bar{\theta}_l}{d\xi} = 0 \quad (3.4b)$$

Fazendo a soma $A_{1lm} + A_{2lm}$, teremos:

$$A_{12lm} = \int_0^1 (1-\xi)^3 \tilde{\psi}_{l(\xi)} \cdot \left[(1-2\xi) \tilde{\psi}'_{l(\xi)} + (1-\xi) \tilde{\psi}''_{m(\xi)} \right] d\xi \quad (3.45)$$

Calculando as derivadas das autofunções, teremos:

$$\psi_{l(\xi)} = J_0(\mu_l \xi) \quad (3.46a)$$

$$\tilde{\psi}'_{l(\xi)} = -\mu_l J_1(\mu_l \xi) \quad (3.46b)$$

$$\tilde{\psi}''_{l(\xi)} = \frac{\mu_l}{\xi} [J_1(\mu_l \xi) - \mu_l \xi J_0(\mu_l \xi)] \quad (3.46c)$$

Pelos mesmos motivos usados no Método das Linhas, temos que reescrever este sistema de equações fazendo as mudanças de variável:

$$Y_l = \theta_l \quad (3.47a)$$

$$Y_{l+N} = \frac{d\theta_l}{d\tau} \quad (3.47b)$$

Substituindo (3.47a) e (3.47b) em (3.44a) e em (3.44b), teremos o sistema resultante que nos fornecerá a solução do problema difusivo através da Técnica da Transformada Integral Generalizada:

$$\frac{dY_l}{d\tau} = Y_{l+N} \quad (3.48a)$$

$$\tilde{\tau} \frac{dY_{l+N}}{d\tau} + Y_{l+N} = \frac{1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} (A_{1lm} + A_{2lm}) \cdot \bar{\theta}_{m(\tau)} + \bar{Q}_l \quad (3.48b)$$

$$\tau = 0 \quad \Rightarrow \quad Y_l = 0 \quad ; \quad Y_{l+N} = 0 \quad (3.48c)$$

Capítulo 4

O cálculo da Intensidade

4.1 Variação do índice de refração e da diferença de fase

Após a variação de temperatura na amostra causada pelo feixe laser, ocorrem várias mudanças em propriedades que dependem da temperatura, propriedades estas que interferem na intensidade que chega ao detector, a primeira mudança é a variação no índice de refração, esta mudança é calculada da seguinte forma (Sheldon, 1982):

$$n_{(r,t)} = n_o + \frac{dn}{dT} \Delta T_{(r,t)} \quad (4.1)$$

Onde n_o é o índice de refração inicial e dn/dT é a variação do índice de refração com a temperatura. Colocando em sua forma adimensional com a mudança de variável para ξ , teremos:

$$n_{(\xi,t)} - n_o = A. \theta_{(\xi,\tau)} \quad (4.2)$$

Teremos com isso a constante:

$$A = \frac{1}{T_R} \frac{\partial n}{\partial \theta} \quad (4.3)$$

Com o cálculo da variação do índice de refração, ainda não é possível calcular a intensidade do laser que chega a detector, pois como a amostra se comporta como uma lente, é necessário calcular a diferença de fase induzida no feixe de prova, este termo pode ser calculado de acordo com o procedimento a seguir (Sheldon, 1982):

$$\Phi_{(r,z,t)} = \frac{2\pi}{\lambda_p} \int_0^L [n_{(r,z,t)} - n_{(0,z,t)}] dz \quad (4.4)$$

Resolvendo a integral, teremos:

$$\Phi_{(r,t)} = \frac{2\pi}{\lambda_p} L [n_{(r,t)} - n_0] \quad (4.5)$$

Onde L é a espessura da amostra e λ_p é o comprimento de onda do laser de prova. Como já calculamos anteriormente a variação do índice de refração, basta substituí-lo na equação anterior para termos a diferença de fase, que em sua forma adimensional se torna:

$$\Phi_{(\xi,t)} = \frac{2\pi LA}{\lambda_p} \theta_{(\xi,\tau)} \quad (4.6)$$

Neste momento definimos:

$$q_0 = \frac{2\pi LA}{\lambda_p} \quad (4.7)$$

Com estes cálculos feitos, podemos proceder com o cálculo da intensidade.

4.2 Cálculo da Intensidade

O feixe do laser de prova sai da amostra se propagando ao detector e pode ser tratado como um fenômeno de difração, que será representado pela Teoria de Difração de Fresnel. Segundo Antony Siegman (1971); a amplitude complexa do feixe de prova no centro do detector é a superposição das amplitudes complexas que emanam de todos os pontos do plano de saída da luz na amostra. A intensidade do laser que chega no detector, é definida como sendo o módulo da amplitude do Campo elétrico que chega no detector ao quadrado. Como mostrado abaixo:

$$I_{(\tau)} = |U_p(z_1 + z_2, \tau)|^2 \quad (4.8)$$

O Campo Elétrico é calculado por:

$$U_p(z_1 + z_2, \tau) = C_2 \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} e^{-i\phi} e^{-(1+iV)g} dg \quad (4.9)$$

Onde C_2 é definido por: $C_2 = i \sqrt{\frac{2P_p}{\pi}} \cdot \omega_{1p} \cdot \exp\left(-i \frac{2\pi}{\lambda_p} z_1\right) \cdot \frac{2\pi}{\lambda_p z_2} \cdot \exp\left(-i \frac{2\pi}{\lambda_p} z_2\right)$

A soma $z_1 + z_2$ é a distância entre a fonte laser e o detector, z_1 é a distância da fonte laser até a amostra, z_2 é a distância da amostra ao plano do detector e P_p é a potência do laser de prova.

Neste momento serão definidos dois novos termos g e m , que serão dados por:

$$g = \frac{\eta^2}{m} \quad (4.10a)$$

$$m = \left(\frac{\omega_{1p}}{\omega_{0e}}\right)^2 \quad (4.10b)$$

Para poder prosseguir com o cálculo, temos que substituir a variável η pela variável ξ como visto anteriormente no cálculo de θ , agora presentes em g :

$$g(\xi) = \frac{\xi^2}{m(1-\xi)^2} \quad (4.11a)$$

$$dg = \frac{2}{m} \left(1 + \frac{\xi}{1-\xi}\right) \frac{\xi}{(1-\xi)^2} d\xi \quad (4.11b)$$

Considerando que a variação de fase muito menor que 1, podemos escrever a seguinte aproximação em (4.9):

$$e^{-i\phi} \approx 1 - i\phi \quad (4.12)$$

Com isso, a definição de Campo Elétrico será dada por:

$$U_p(z_1 + z_2, t) = C_2 \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} (1 - i\phi) e^{-(1+iV)g} dg \quad (4.13)$$

Fazendo o produto e substituindo (4.6) em (4.13), notamos que:

$$U_p(z_1 + z_2, t) = C_2 \left\{ \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} e^{-(1+iV)g} dg - iq_0 \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} \theta_{(\xi, \tau)} e^{-(1+iV)g} dg \right\} \quad (4.14)$$

Os dois termos que representam integrais complexas, serão chamados de acordo com a ordem que aparecem na equação acima de:

$$Z_{A1} = \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} e^{-(1+iV)g} dg \quad (4.15a)$$

$$Z_{A2} = \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} \theta_{(\xi, \tau)} e^{-(1+iV)g} dg \quad (4.15b)$$

Com isso teremos de maneira simplificada:

$$U_p(z_1 + z_2, t) = C_2 \{Z_{A1} - iq_0 Z_{A2}\} \quad (4.16)$$

Onde:

$$Z_{A1} = \frac{1}{(1 + iV)} \quad (4.17a)$$

$$Z_{A2} = \sum_l^{\infty} \left(\int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} \psi_{l(\xi)} e^{-(1+iV)g} dg \right) \tilde{\theta}_l \quad (4.17b)$$

A integral de (4.17b) a fim de simplificação chamaremos de:

$$ZB_l = \int_{g=0}^{g \rightarrow \infty} \psi_{l(\xi)} e^{-(1+iV)g} dg \quad (4.18)$$

Com isso:

$$U_p(z_1 + z_2, \tau) = C_2 [Z_{A1} - iq_0 Z_{A2}] \quad (4.19)$$

Ao substituir (4.19) na definição da fórmula do Campo Elétrico (4.8), teremos a definição da intensidade inicial dada por:

$$I_0 = \left| \frac{C_2}{1 + iV} \right|^2 \quad (4.20)$$

Com essa definição, obtemos a metodologia teórica para o cálculo do sinal de lente térmica normalizado dado por $I_{(\tau)}/I_0$.

4.3 Curvas características de Lente Térmica

A forma da curva característica da Lente Térmica é definida pelo sinal da variação do índice de refração (dn/dT), se o sinal for positivo a amostra se comportará semelhante a uma lente convergente, com isso a intensidade será maior que a intensidade inicial, fazendo a curva ter concavidade negativa, como mostra a figura 4.1a. No entanto, quando o sinal de dn/dT for negativo, o comportamento da amostra será semelhante a uma lente divergente, fazendo a intensidade que chega no detector ser menor que a inicial, com isso, a concavidade da curva característica ser positiva, como mostra a figura 4.1b. As condições que definem a variação do índice de refração em cada amostra são: o meio onde se encontra, o comprimento de onda do laser de prova e a temperatura. Estes comportamentos semelhantes a lentes convergentes e divergentes, podem ser observados tanto em materiais sólidos, quanto em líquidos e gasosos, mesmo que extremamente transparentes, os gráficos destes tipos de lente são mostrados nas figuras 4.1, uma forma de representar o laser de prova depois se propagando ao atravessar a amostra de acordo com a lente é exibido na figura 4.2:

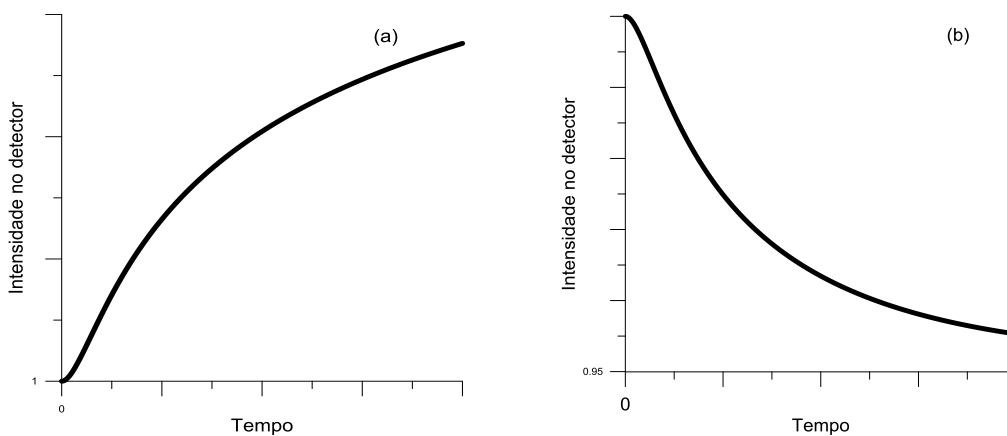


Figura 4.1: (a) $dn/dT > 0$ (b) $dn/dT < 0$.

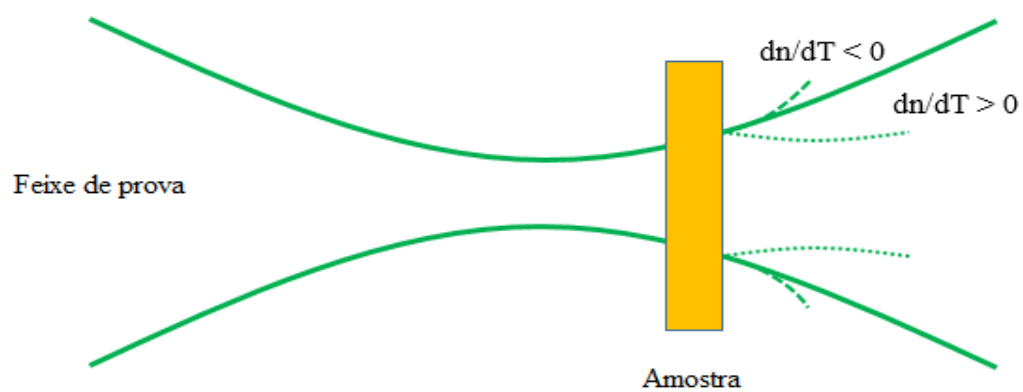


Figura 4.2: Representação de um feixe laser para uma lente convergente ou divergente.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo de apresentação de resultados desta dissertação, primeiramente mostraremos a solução dos métodos usados para o problema proposto, em seguida discutiremos e faremos análises das distribuições de temperatura e intensidade, conseqüentemente mostrando sua validação com dados conhecidos na literatura e com dados fornecidos pelo laboratório de Física do PPGF da UFPa.

5.1 Resultados para o campo de temperatura

5.1.1 Resultados obtidos pelo Método das Linhas

O Sistema para solução das equações diferenciais ordinárias para o Método das Linhas, dadas por (3.48) foi resolvido pela rotina DIVPAG da biblioteca IMSL em um código escrito em linguagem FORTRAN. Quando este método é usado, se faz necessária uma análise do número de intervalos na malha do problema para a convergência dos resultados que o método fornecerá. Neste caso, a convergência foi testada inicialmente no cálculo do perfil de temperatura, analisando o número de intervalos na malha do problema, em seguida, veremos como este número altera o cálculo da intensidade do feixe laser na amostra.

5.1.2 Verificação da convergência em função do número de intervalos na malha.

a) Convergência para o perfil de temperatura

Para análise da convergência, usaremos determinadas posições adimensionais ξ , para os valores calculados do perfil de temperatura adimensional θ , estes valores de temperatura são calculados para diferentes intervalos de tempo, com isso poderemos observar com quantos intervalos na malha a solução apresenta convergência. Os resultados obtidos são mostrados nas tabelas 5.1 a 5.3:

Tabela 5.1: Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi=0,1$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Malha (Intervalos)	θ em $\xi = 0.1$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
50	0.18941E-01	0.21724E-01	0.23347E-01
100	0.18935E-01	0.21723E-01	0.23346E-01
200	0.18938E-01	0.21723E-01	0.23346E-01
400	0.18937E-01	0.21723E-01	0.23346E-01
600	0.18937E-01	0.21723E-01	0.23346E-01
800	0.18937E-01	0.21723E-01	0.23346E-01
1000	0.18937E-01	0.21723E-01	0.23346E-01

Tabela 5.2: Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi=0,5$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Malha (Intervalos)	θ em $\xi = 0.5$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
50	0.13862E-01	0.16613E-01	0.18224E-01
100	0.13854E-01	0.16609E-01	0.18221E-01
200	0.13856E-01	0.16609E-01	0.18221E-01
400	0.13856E-01	0.16609E-01	0.18221E-01
600	0.13855E-01	0.16608E-01	0.18220E-01
800	0.13855E-01	0.16608E-01	0.18220E-01
1000	0.13855E-01	0.16608E-01	0.18220E-01

Tabela 5.3: Convergência do perfil de temperatura pelo método das linhas, para $\xi = 0,9$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Malha (Intervalos)	θ em $\xi = 0.9$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
50	0.50341E-03	0.15786E-02	0.25199E-02
100	0.50854E-03	0.15800E-02	0.25174E-02
200	0.50896E-03	0.15803E-02	0.25168E-02
400	0.50926E-03	0.15805E-02	0.25166E-02
600	0.50933E-03	0.15804E-02	0.25165E-02
800	0.50935E-03	0.15804E-02	0.25165E-02
1000	0.50935E-03	0.15804E-02	0.25165E-02

Podemos observar nas tabelas de convergência que, de um modo geral, quanto menor for o tempo, mais rápida é a convergência, o mesmo acontecendo com a variável espacial, sendo que a convergência em todas as análises para o perfil de temperatura, seja para o tempo ou para a variável espacial é alcançada com um número de 600 intervalos na malha.

b) Convergência para o sinal de Lente Térmica Normalizado

Diferente do que usamos para o perfil de temperatura, usaremos um gráfico para a análise da convergência no cálculo da intensidade do feixe laser, para este cálculo também foi usado o software desenvolvido neste trabalho, para isto utilizamos os resultados do perfil de temperatura, faremos a mesma análise para o número de intervalos observando sua influência no perfil de intensidade do feixe, com isso, a Figura 5.1, nos fornece como resultado:

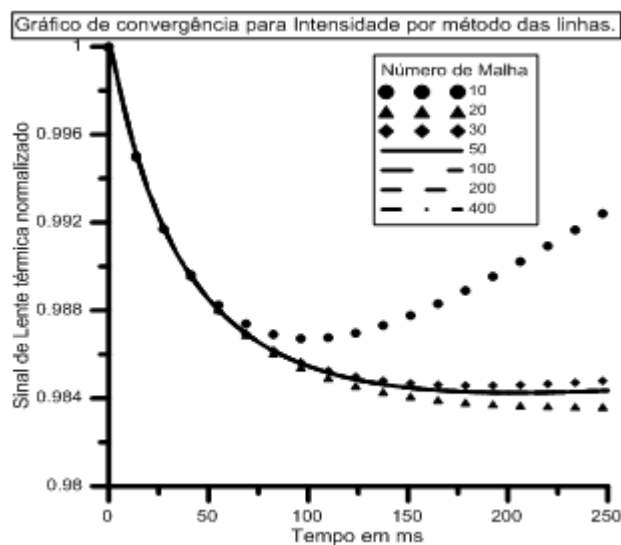


Figura 5.1: Convergência para o sinal de LT para diferentes intervalos na malha.

Podemos observar pelo gráfico que para intervalos de tempo pequenos, no caso até 50 ms, os resultados de todas as malhas convergem para um mesmo valor, contudo, quando o número de intervalos é igual a 10, o perfil de intensidade começa a aumentar. Podemos concluir que a convergência para o sinal de Lente Térmica é obtido quando o número intervalos é superior a 50. Com estes dados, para validação dos resultados e

análise posterior, foi fornecido para gerar resultados o número de intervalos de 600, para maior segurança e confiabilidade dos resultados.

5.1.3 Resultados obtidos pela Técnica da Transformada Integral Generalizada

Para os cálculos dos resultados obtidos por GITT, também foi desenvolvido um código em linguagem Fortran, neste caso, foram usadas várias rotinas computacionais da Biblioteca IMSL. A rotina QDAG foi usada para os cálculos dos coeficientes integrais (\bar{Q}_l, A_{2lm}). Por outro lado, foi usada novamente a rotina IVPAG para solução do sistema de equações diferenciais ordinárias dadas por (3.48a-3.48b).

Como a resolução de equações através da GITT envolve expansões em série, faz-se necessário, uma análise aprofundada de quantos termos esta série deve conter para atender com a precisão adequada os resultados obtidos. Isto é necessário, pois diferente do método das linhas, a GITT apresenta um trabalho computacional árduo em relação ao tempo de processamento, quanto maior o número de termos da expansão, maior será sua precisão, mas o benefício de se encontrar uma convergência com um número de termos relativamente baixo é essencial, com isso, a análise de convergência mostrada a seguir será em relação ao número de termos na série de recuperação do potencial que nos fornece o perfil de temperatura.

a) Convergência para o perfil de temperatura

As tabelas de convergência mostrarão o valor calculado através da GITT do perfil de temperatura adimensional, para valores específicos da variável espacial ξ em diferentes intervalos de tempo, estes valores são obtidos de acordo com determinados números de termos na série.

A Tabela 5.4 e a Tabela 5.5, mostram uma convergência para uma série com 50 termos para os valores das coordenadas espaciais, sendo que em 20 ms com apenas 25 termos a convergência já é obtida, entretanto, a figura 5.6 mostra nesta coordenada que para todos os intervalos de tempo, a convergência é alcançada com uma série de 75 termos. Com isso teremos:

Tabela 5.4: Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,1$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Número de termos na série	ΔT em $\xi = 0.1$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
25	0.18406E-01	0.21084E-01	0.22659E-01
50	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01
75	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01
100	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01
150	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01
200	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01
250	0.18406E-01	0.21086E-01	0.22658E-01

Tabela 5.5: Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,5$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Número de termos na série	ΔT em $\xi = 0.5$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
25	0.13434E-01	0.16079E-01	0.17643E-01
50	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01
75	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01
100	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01
150	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01
200	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01
250	0.13434E-01	0.16081E-01	0.17642E-01

Tabela 5.6: Convergência do perfil de temperatura por GITT, para $\xi = 0,9$ variando o número de intervalos na malha em diferentes tempos.

Número de termos na série	ΔT em $\xi = 0.9$		
	Tempos		
	20 ms	40 ms	60 ms
25	0.45331E-03	0.14464E-02	0.23544E-02
50	0.45542E-03	0.14531E-02	0.23381E-02
75	0.45553E-03	0.14527E-02	0.23381E-02
100	0.45553E-03	0.14527E-02	0.23381E-02
150	0.45553E-03	0.14527E-02	0.23381E-02
200	0.45553E-03	0.14527E-02	0.23381E-02
250	0.45553E-03	0.14527E-02	0.23381E-02

b) Convergência para o sinal de Lente Térmica

Analogamente ao que foi feito para a convergência pelo Método das Linhas, será mostrado neste item um gráfico de convergência para o sinal de LT normalizado obtido pela GITT, para verificarmos com quantos termos na série o potencial é recuperado, como mostra a Figura 5.7:

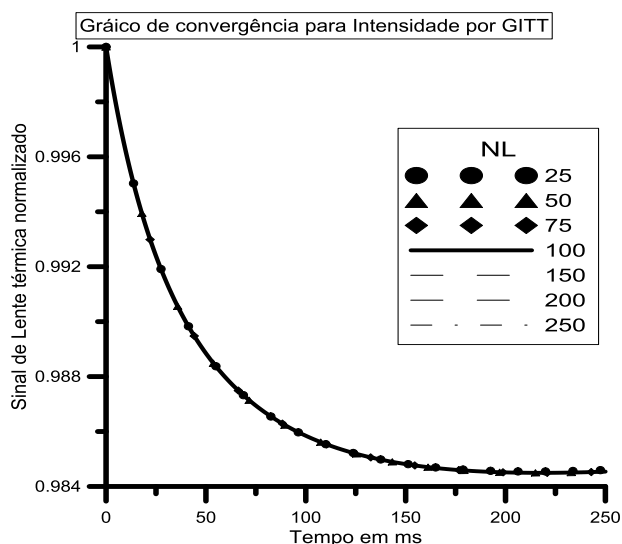


Figura 5.2: Gráfico de convergência do sinal de LT por GITT.

Podemos observar na Figura 5.2 uma pequena instabilidade nas séries para pequenas ordens de truncamento (25 e 50 termos), de modo que, a partir de 75 termos é observado que a convergência é alcançada para todos os valores de tempo. Para gerar resultados para validação da proposta deste trabalho, foram gerados resultados com séries de 150 termos para maior confiança e segurança nos resultados.

5.2 Resultados a partir de dados da Literatura

Com a proposta deste trabalho de inserir na técnica da Lente Térmica o modelo hiperbólico de condução de calor para descrever o perfil de temperatura, faz-se necessário verificar a teoria comparando com resultados experimentais encontrados na literatura sobre o assunto, neste item faremos isso, comparamos com dois trabalhos, cada um deles tem sinais diferentes de LT, um apresenta uma lente divergente e o outro

uma lente convergente, estes trabalhos são os de Sandro Lima (1999), que usou como amostra um vidro de calcogeneto (70%GaS₃;30%LaS₃) e o trabalho de Jurandir Rohling (2001), que usou como amostra um policarbonato aquecido a 128,5°C, para se testar esta nova metodologia e comparar com a literatura foi encontrado dificuldades para se obter os dados de entrada, pois são poucos trabalhos que indicam todas as configurações experimentais usadas.

5.2.1 Resultados para o Vidro Calcogeneto

Os dados retirados do trabalho de Sandro Lima (1999), apresentados na Tabela 5.7 e os dados do trabalho de Jurandir Rohling (2001), serão os dados de entrada necessários para as análises propostas neste trabalho, com eles podemos verificar se tem validade a sugestão de representar pelo modelo hiperbólico de condução de calor, o perfil de temperatura e sua conseguinte influência no sinal da Lente Térmica, representado pela intensidade no detector. Portanto, os parâmetros inseridos na rotina computacional para gerar os resultados para este caso, são:

Tabela 5.7: Parâmetros retirados do trabalho de Sandro Lima e usados nesta dissertação.

Parâmetros	Dados de Sandro Lima
$dS/dT(1/K)$	3.8×10^{-6}
$P_e(mW)$	3,5
$\lambda_e (nm)$	514.5
$\lambda_p (nm)$	632.8
$z_1 (cm)$	3.87
$z_2 (cm)$	200
$\omega_e (x10^{-3}cm)$	2.3
$\omega_{0p} (x10^{-3}cm)$	9.3
$\omega_{1p} (x10^{-3}cm)$	12.4
Tempo (ms)	60
$A (cm^{-1})$	7,2
$K (W/m^{\circ}K)$	0.62
Espessura (L) (cm)	0.087
$D (m^2/s)$	2.6×10^{-7}

Em seu trabalho, Sandro Lima (1999) utilizou a técnica da Lente Térmica para determinar a difusividade térmica, a condutividade térmica e a variação do índice de refração em diversos materiais. Para algumas de suas amostras foram feitas medidas em temperatura ambiente e para outras a temperatura era elevada com o intuito de analisar o

comportamento da difusividade térmica nestas situações. Para estes casos, a difusividade térmica apresentou um decréscimo para temperaturas elevadas.

Com estes dados, primeiramente veremos o perfil de temperatura e o sinal de LT, calculados pelo Método das Linhas e pela GITT, a análise feita neste momento é sobre a comparação entre os métodos, além de analisar o perfil de temperatura para diferentes tempos de relaxação, para efeito de simplificação, nas figuras as legendas que se referem ao Método das Linhas será escrita da forma MOL (Method of Lines). Estes gráficos são expostos da Figura 5.3 à Figura 5.9:

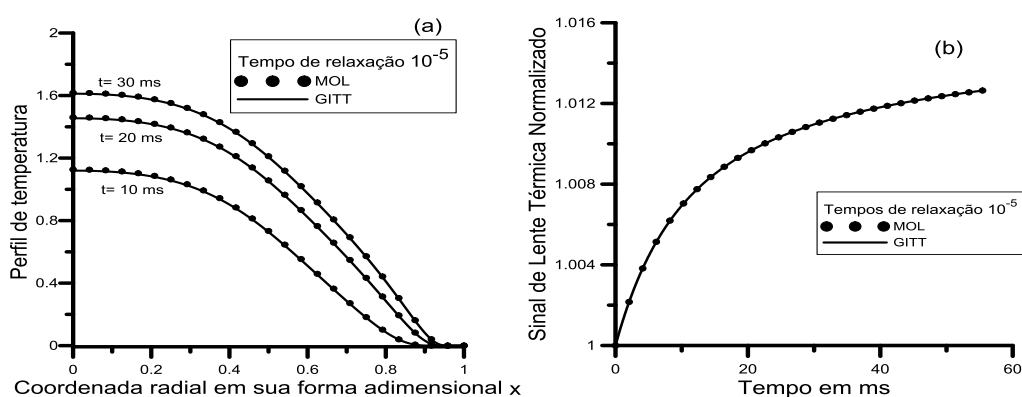


Figura 5.3: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-5} .

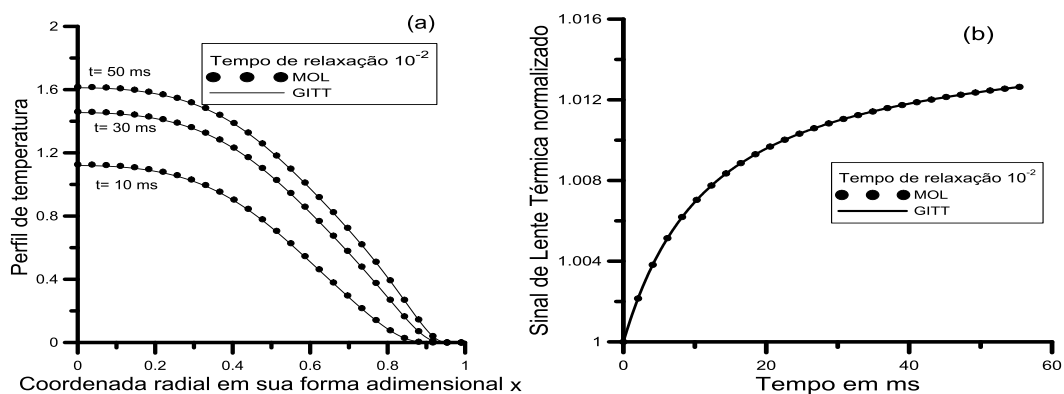


Figura 5.4: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-2} .

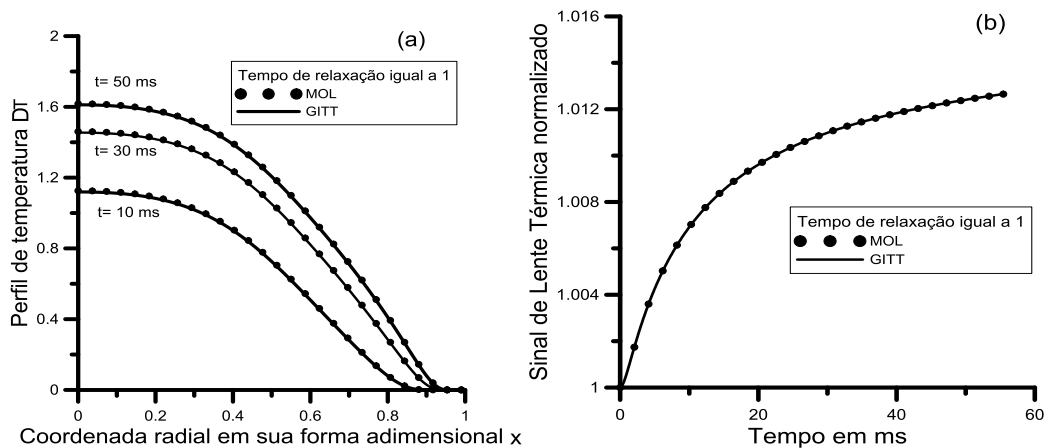


Figura 5.5: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 1.

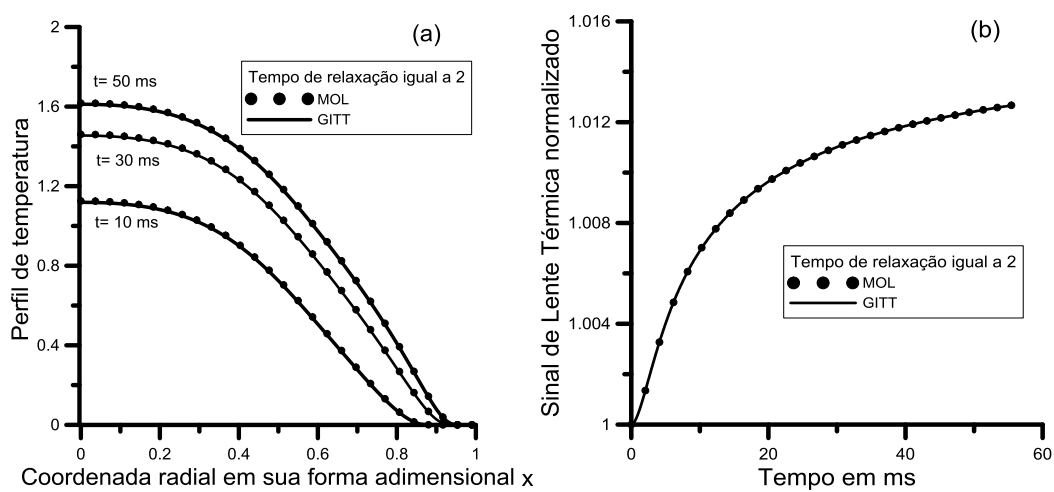


Figura 5.6: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 2.

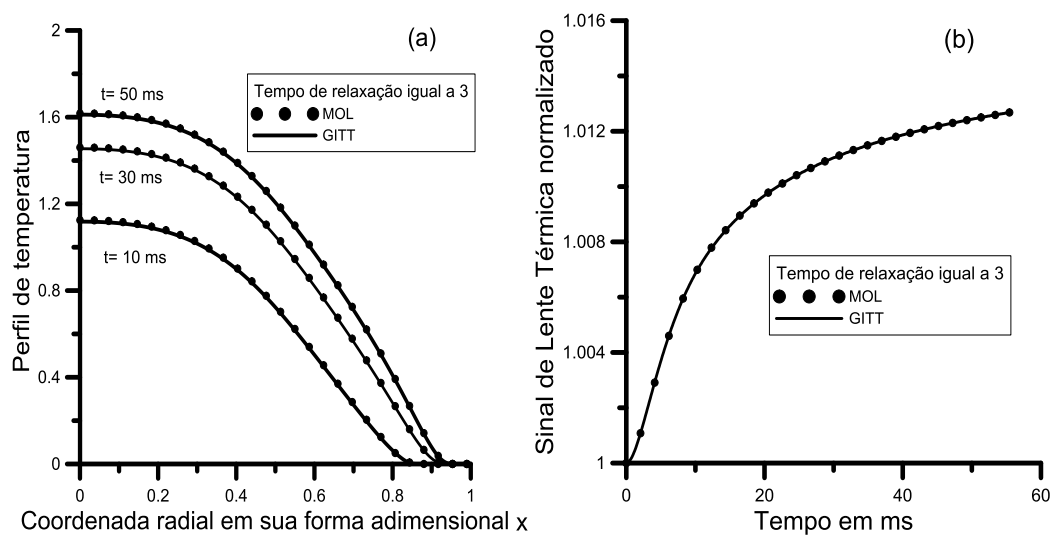


Figura 5.7: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 3.

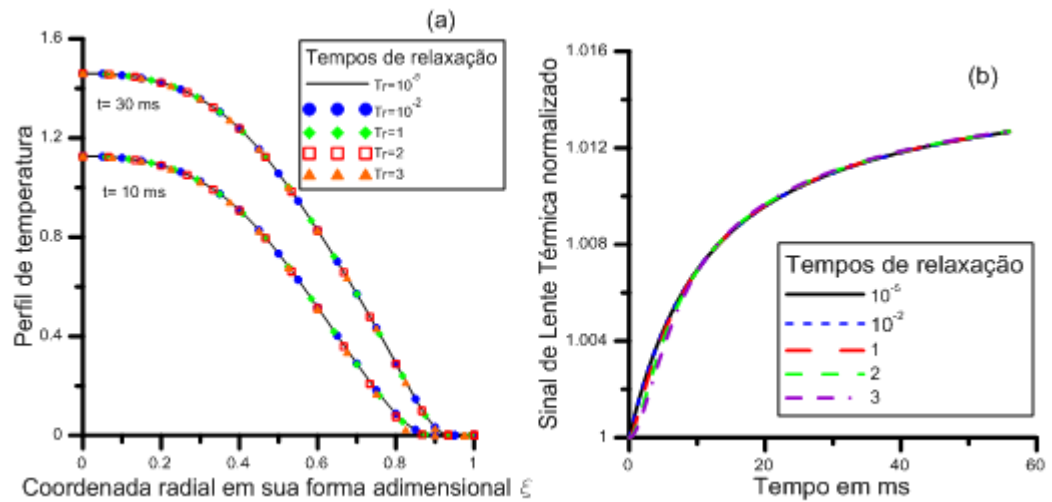


Figura 5.8: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Para todos os tempos de relaxação.

O primeiro ponto a ser observado pelos gráficos é a concordância perfeita entre os métodos, o Método das Linhas e a GITT convergem para os mesmos valores tanto quando se trata do perfil de temperatura, quanto para o sinal de Lente Térmica. Esta concordância pode ser vista dos gráficos que vão da Figura 5.3 à Figura 5.7, com a concordância ideal obtida entre os métodos, os gráficos da Figura 5.8 foram traçados para analisar a influência do tempo de relaxação no campo de temperatura e no sinal da LT.

Os gráficos da Figura 5.8 mostram a influência do tempo de relaxação no perfil de temperatura, na Figura 5.8a, e no Sinal de LT, na Figura 5.8b. Podemos observar que a influência no perfil de temperatura para este caso é quase imperceptível. No perfil da intensidade, a percepção da influência do tempo de relaxação é vista com mais clareza, há um atraso na resposta do sinal de LT, este atraso pode ser visto a partir de tempos de relaxação igual a 1, este atraso aparece até aproximadamente o tempo de 10 ms, tal fenômeno observado reforça a perspectiva do Modelo Hiperbólico de Condução de Calor de que os efeitos térmicos não são sentidos imediatamente em todas as partes de um determinado corpo.

5.2.2 Resultados para o Policarbonato

Em seu trabalho, Jurandir Rohling (2001), usou pela primeira vez a Espectroscopia de Lente Térmica para determinar a difusividade térmica e a amplitude

do sinal de Lente Térmica em função da temperatura para o Policarbonato, comparado com outras técnicas, a LT mostrou melhores resultados. Os dados usados por Rohling (2001), são mostrados na Tabela 5.8:

Tabela 5.8: Parâmetros retirados do trabalho de Jurandir Rohling e usados nesta dissertação.

Parâmetros	Dados de Jurandir Rohling
$dS/dT(1/K)$	-0.4816×10^{-4}
$P_e(mW)$	36
λ_e (nm)	514.5
λ_p (nm)	632.8
z_1 (cm)	4.94
z_2 (cm)	150
ω_e ($\times 10^{-3}$ cm)	5.35
ω_{0p} ($\times 10^{-3}$ cm)	10.3
ω_{1p} ($\times 10^{-3}$ cm)	15.29
Tempo (ms)	80
A (cm^{-1})	0,293
K (W/m $^{\circ}$ K)	0.187
Espessura (L) (mm)	2.72
D (cm^2/s)	1.2×10^{-3}

Com os dados da Tabela 5.8, serão feitos os mesmos procedimentos relativos aos resultados para o Vidro Calcogeneto, mostrados da Figura 5.9 à Figura 5.15:

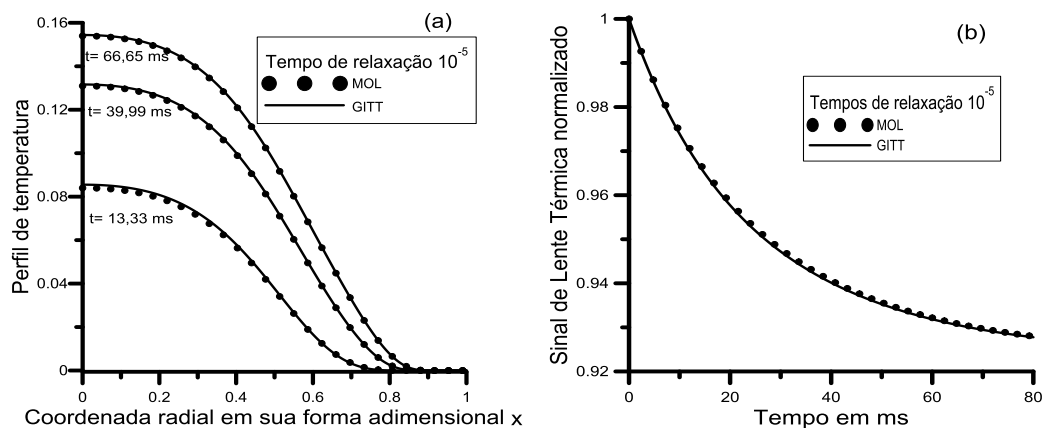


Figura 5.9: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-5} .

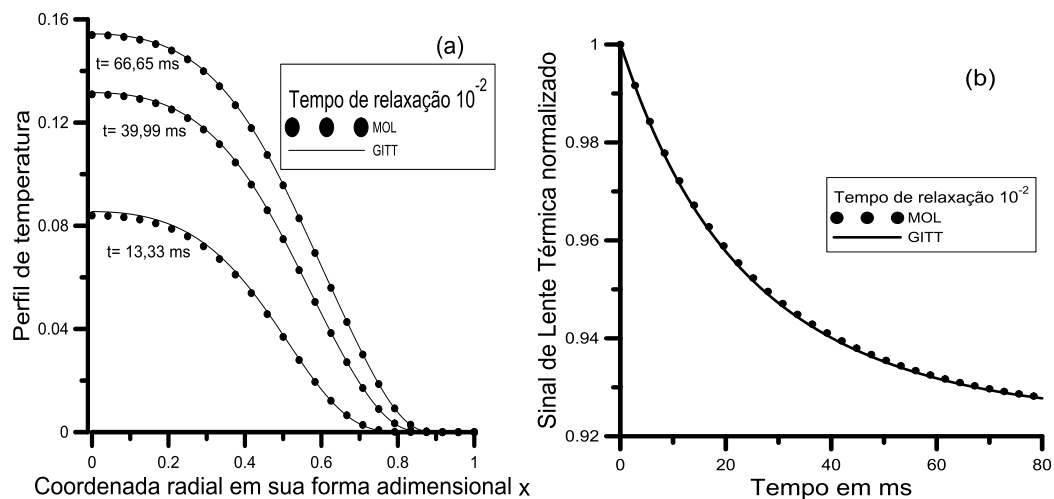


Figura 5.10: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 10^{-2} .

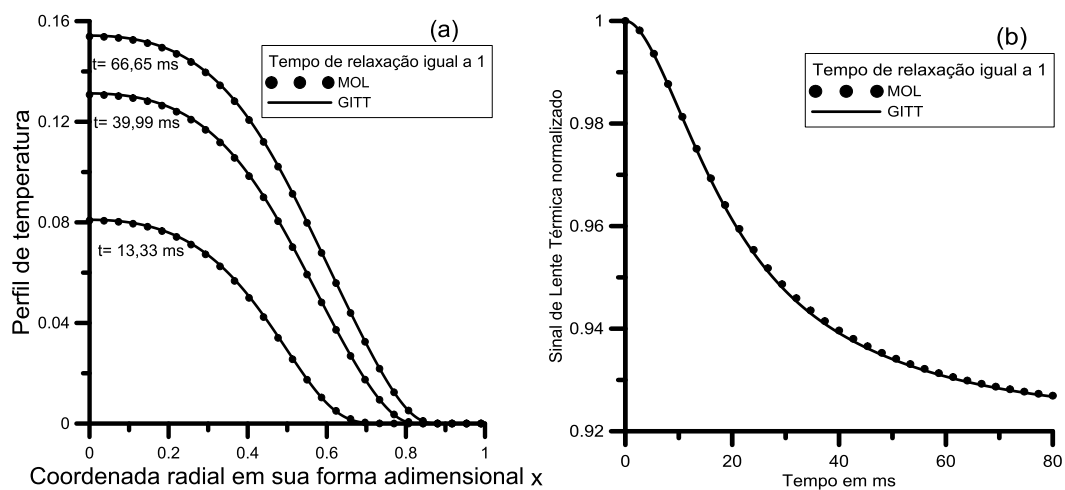


Figura 5.11: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 1.

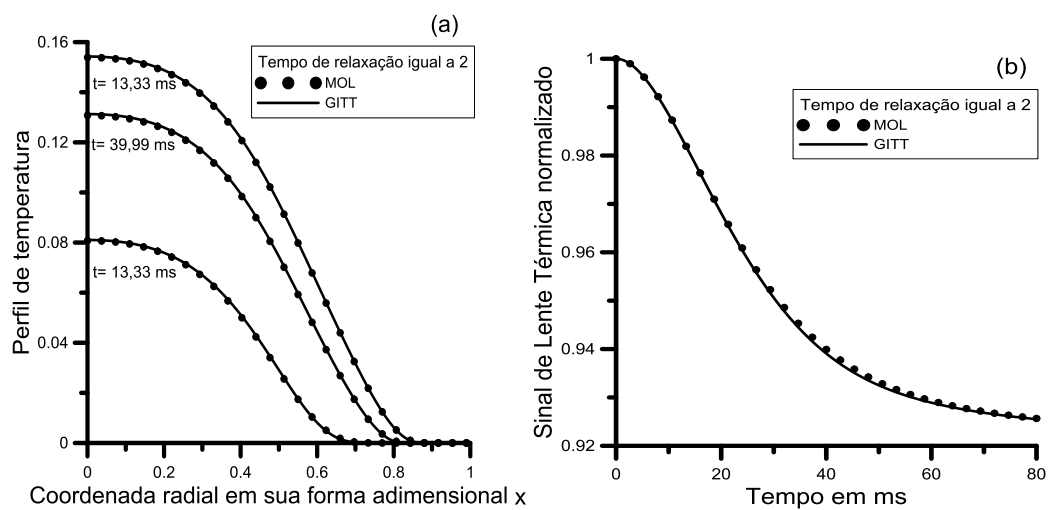


Figura 5.12: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 2.

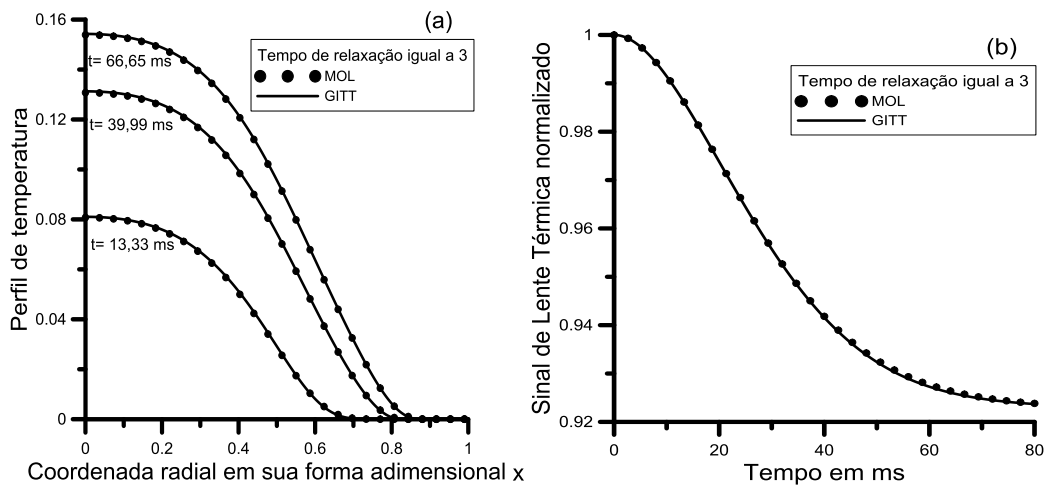


Figura 5.13: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Tempo de relaxação = 3.

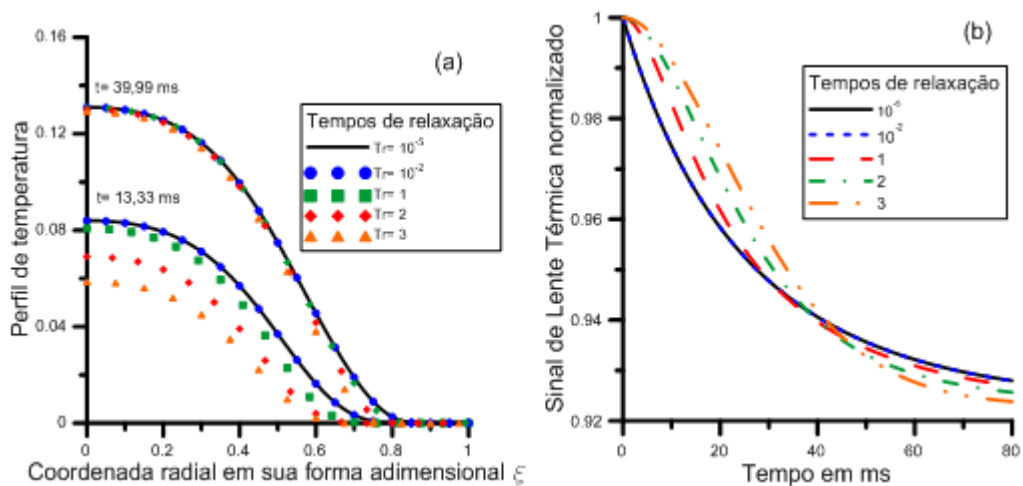


Figura 5.14: (a) Perfil de temperatura (b) Sinal de LT. Para todos os tempos de relaxação.

Neste caso, também podemos observar a concordância total entre os dois métodos de solução usados neste trabalho, vistos da Figura 5.9 à Figura 5.13. Na Figura 5.14a podemos ver de maneira acentuada como a variação no perfil de temperatura decresce com o aumento do tempo de relaxação, em especial para o instante em que o tempo equivale a 13.33 ms, quando o tempo de relaxação é igual a 1, se torna evidente a queda na variação de temperatura, sendo esta ainda menor quando o tempo de relaxação é maior, para os tempos de relaxação entre 10^{-5} e 10^{-2} , veremos que o cálculo do perfil de temperatura se sobrepõe.

Em relação a Figura 5.14b, é visto que para os tempos de relaxação 10^{-5} e 10^{-2} , bem como ocorreu para o perfil de temperatura, estes sinais se igualam para estes valores. Em contrapartida, para o tempo de relaxação igual 1, podemos observar um aumento significativo no sinal de LT, este atraso é visto desde a contagem inicial de tempo até aproximadamente a escala de 30ms, onde o cálculo cruza as curvas dos tempos de relaxação 10^{-5} e 10^{-2} , a partir de 30ms o sinal se torna menor em relação aos referidos tempos de relaxação. O mesmo comportamento ocorre para os tempos de relaxação 2 e 3, sendo que estes cruzam as curvas de 10^{-5} e 10^{-2} , em 40ms e 45ms, respectivamente.

5.3 Relação do Modelo Teórico com dados experimentais

Neste item, destacaremos os resultados obtidos com a nova metodologia proposta neste trabalho, com resultados experimentais obtidos dos trabalhos citados anteriormente de Sandro Lima (1999) e Jurandir Rohling (2001). Para retirada destes dados experimentais, foi usado o programa GET DATA. Feito isto, podemos plotar os pontos experimentais e cruzar informações com os resultados deste trabalho para o sinal da LT.

5.3.1 Relação para o Vidro Calcogeneto

Com a obtenção dos pontos experimentais provenientes dos trabalhos de referência, veremos como o modelo hiperbólico de condução de calor descreve o fenômeno de Lente Térmica através da relação direta de seus resultados através da Figura 5.15 para o Vidro Calcogeneto:

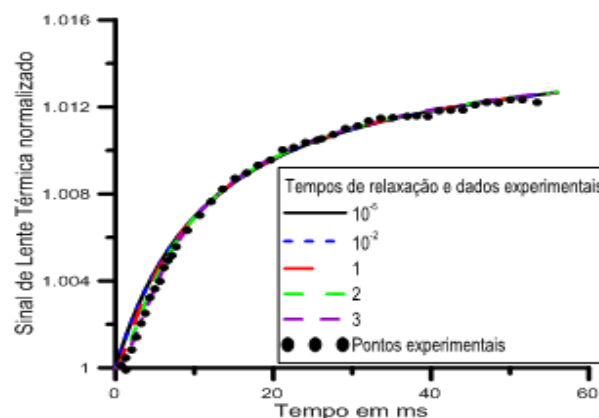


Figura 5.15: Relação do modelo teórico com os pontos experimentais do trabalho de Sandro Lima.

Através da Figura 5.15, observamos que as curvas características de LT coincidem todas elas para os pontos experimentais a partir de um valor na escala temporal de aproximadamente 10ms, contudo, podemos perceber que para tempos menores que este, o tempo de relaxação maior se faz necessário para aproximação dos pontos experimentais com as curvas características, em destaque para o tempo de relaxação igual a 3 onde a coincidência é melhor vista, sendo a curva característica para este tempo de relaxação sobrepondo os pontos experimentais.

5.3.2 Relação para o Policarbonato

Um procedimento idêntico ao feito para o Vidro Calcogeneto será apresentado para o Policarbonato, como mostra a Figura 5.16:

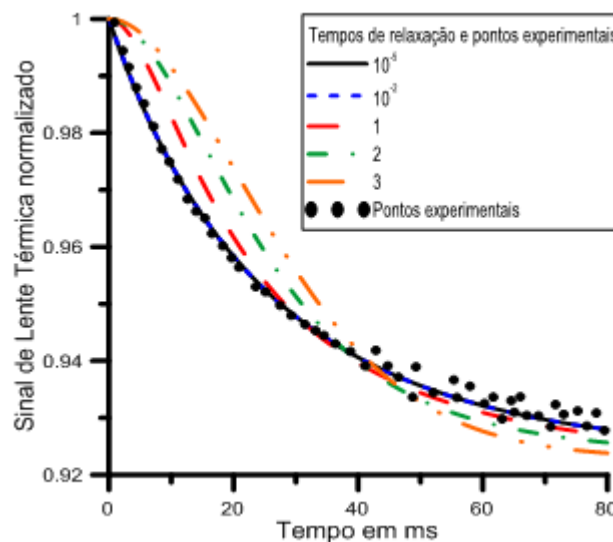


Figura 5.16: Relação do modelo teórico com os pontos experimentais do trabalho de Jurandir Rohling.

Com base na Figura 5.16, notamos que diferentemente do que foi visto para o Vidro Calcogeneto, os pontos experimentais com os modelos teóricos são coincidentes para tempos de relação menores, neste caso, os valores destes tempos estão entre 10^{-5} e 10^{-2} . Para tempos de relaxação maiores que estes citados anteriormente, começamos a observar no tempo de relaxação igual a 1, uma grande diferença em relação aos dados experimentais do começo da escala temporal até um tempo aproximado de 30ms, depois deste valor há concordância com os pontos, ainda que a curva relativa ao tempo de relaxação igual a 1 se afaste suavemente de 10^{-5} e 10^{-2} .

Entretanto, para os tempos de relaxação iguais a 2 e 3, as curvas características dos fenômenos de LT se distanciam consideravelmente em relação aos pontos experimentais, apresentando nestas curvas valores superiores para estes pontos até o tempo aproximado de 40ms na escala de tempo, e valores menores a partir deste valor.

Analisados os aspectos para os dois casos, é interessante fazermos uma análise geral para o tempo de relaxação, podemos ver nos dois casos a influência do mesmo no perfil de temperatura e por consequência, nos gráficos de intensidade. Explorando este termo, lembramos que como definido no Capítulo 2, o tempo de relaxação é dado por $\tau = 1/c$, nota-se que quando seu valor é elevado, a velocidade específica de propagação de calor no meio terá valor menor, este fato resulta numa menor variação de temperatura, podendo ser melhor evidenciado para o Policarbonato.

5.4 Resultados para o Polivinil Álcool (PVA)

Neste item veremos o método sendo usado diretamente para o ajuste do sinal de Lente Térmica, obtidos experimentalmente no Laboratório de Física do Programa de pós graduação em Física da Universidade Federal do Pará, dados estes fornecidos pela equipe do programa através do Professor Sanclayton Moreira e do doutorando Luis Fernando Lobato, com o valor destes dados experimentais, foi feito ajuste para a difusividade térmica e a variação do índice de refração.

Para os experimentos, foram usadas amostras de Polivinil Álcool (PVA) com micropartículas de betacaroteno. Foi usada a configuração de feixe único para estes experimentos, como é citado anteriormente, o modelo proposto por Shen (1992) trata esta configuração como sendo um caso particular, sendo assim, basta assumir que os feixes de prova e excitação possuem as mesmas potências e cinturas. Com isso, temos os parâmetros geométricos dados por:

Tabela 5.9: Parâmetros geométricos para a configuração do modelo de Lente Térmica de feixe único.

Parâmetros	Valores
P_e (mW)	15
λ_e (nm)	532
z_1 (cm)	2.32
z_2 (cm)	200
ω_e ($\times 10^{-3}$ cm)	4.76
Tempo (ms)	460
A (cm^{-1})	24
K ($\text{W}/\text{cm}^\circ\text{K}$)	2×10^{-3}
Espessura (L) (mm)	0.123

Com estes dados e o modelo teórico deste trabalho aplicado a este caso, foram feitos ajustes para a concordância dos dados experimentais com o modelo para os melhores valores para a difusividade térmica e a variação do índice de refração. Como nos casos anteriores, a concordância entre as metodologias de solução já foram discutidas e analisadas anteriormente, neste caso, sem perda de informação, podemos explicitar diretamente o gráfico com o sinal normalizado de lente térmica para o melhor valor dos parâmetros estudados. Com isso teremos a relação entre os ajustes e o sinal de lente térmica dado por:

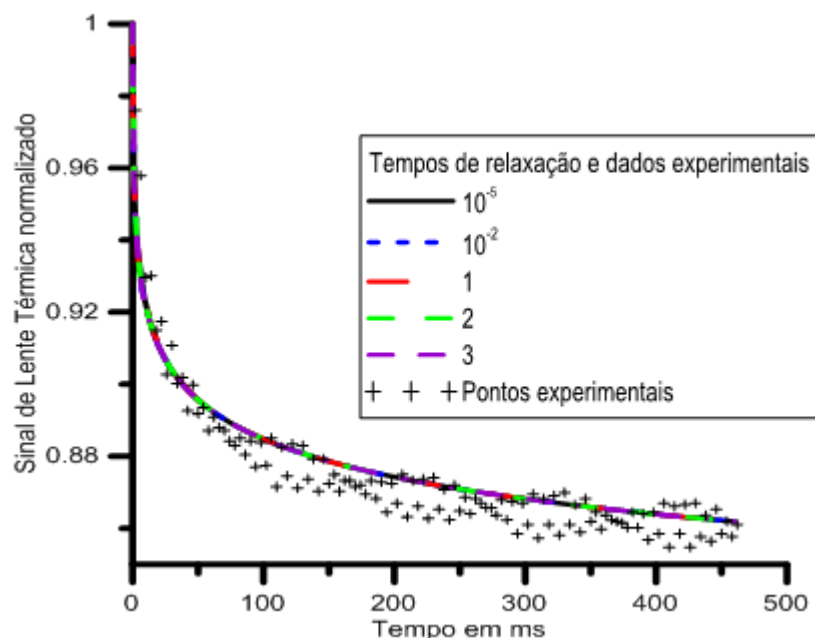


Figura 5.17: Ajuste teórico com dados experimentais para uma amostra de PVA com betacaroteno.

A figura 5.17, mostra a concordância da metodologia deste trabalho com dados experimentais, os parâmetros ajustados para este trabalho para que se obtivesse esta relação, foram os valores de 2,5 ($10^{-3}\text{cm}^{-2}/\text{s}$) e 5,8 (10^{-4}°C^{-1}), para a difusividade térmica e a variação do índice de refração com a amostra, respectivamente. Para a difusividade térmica, este valor mostrou ser maior que o apresentado no trabalho de Luiz Fernando Lobato da Silva (2013), no trabalho do mesmo, a difusividade para este mesmo material oscilou entre 0,91 e 2,26 ($10^{-3}\text{cm}^{-2}/\text{s}$) em diferentes amostras com concentrações diferentes de materiais, a faixa para se estimar o valor de dn/dT foi levada em conta a partir do trabalho de Mura (2005) que usou apenas o PVA em seu estudo de Lente térmica. Podemos também observar, que todos os tempos de relaxação convergem para um mesmo valor, não exercendo assim forte influência para o sinal desta amostra.

Com as análises feitas dos três casos observados neste trabalho, podemos agora fazer uma comparação entre os tempos de processamento dos métodos de resolução em cada caso estudado, para isso usou-se os valores mencionados como confiáveis para a obtenção de resultados, como o número de intervalos na malha (para o Método das Linhas) e o número de termos nas séries (para a GITT). Com os dados usados do trabalho de Sandro Lima (1999), o tempo de processamento de CPU para os cálculos foi de 14,2428 segundos para o método das Linhas, e de 679,2439 segundos para a GITT. Para os dados de Jurandir Rohling (2001), o tempo de processamento para os cálculos foi de 10,8732 segundos para o método das Linhas, e de 472,4490 segundos para a GITT. E o tempo de processamento usando os parâmetros do PVA com betacaroteno foi de 14,77 segundos para o Método das Linhas e de 444,7432 para a GITT. Estes tempos de processamento foram obtidos em um notebook com um processador Intel Core 2 Duo, com frequência de 2.2 GHz.

Com os tempos de processamento calculados, e como estes foram obtidos com os métodos de solução de problema concordando para um mesmo valor. Constatamos que o Método das Linhas tem um trabalho computacional menor em relação a GITT, sendo o tempo de processamento muito menor para a realização dos cálculos.

Capítulo 6

Conclusão

Nesta dissertação introduzimos o modelo hiperbólico de condução do calor aplicado a Espectroscopia de Lente Térmica. Sendo este o primeiro trabalho a usar este modelo para calcular o perfil de temperatura que sofre uma amostra ao ser submetida a esta técnica, os trabalhos de Al-Khairy (2009) e de Tao Yu-Jia (2006), usaram em trabalhos teóricos o laser como fonte de calor em modelos hiperbólicos, entretanto, isso não foi feito na técnica de Lente Térmica. Primeiramente foi feita a formulação matemática da nova metodologia, para sua resolução foi usado um método puramente numérico, o Método das Linhas, e um método híbrido, a Técnica da Transformada Integral Generalizada.

Podemos constatar que as propostas de solução para o cálculo do perfil de temperatura e para o sinal de Lente Térmica apresentaram resultados que concordam para um mesmo valor, fornecendo uma boa margem de confiança aos resultados. Em relação a convergência, o método das linhas mostrou concordar para mesmos valores com intervalos relativamente pequenos na malha, o tempo de processamento foi bem menos em relação a GITT, que também obteve convergência com 75 termos na série, contudo, o tempo computacional foi alto.

Notamos a contribuição que o tempo de relaxação fornece a esta técnica, para o caso do Vidro Calcogeneto, o aumento do valor do tempo de relaxação contribuiu para o ajuste com os pontos experimentais. Para o caso do Policarbonato, o tempo de relaxação menor, mostrou ser mais adequado para os ajustes teóricos com os dados experimentais. Para a amostra de PVA com betacaroteno o tempo de relaxação não mostrou exercer influência significativa, ou perceptível.

Com os trabalhos de Sandro Lima e Jurandir Rohling, bem como os dados fornecidos pelo laboratório de Física do PPGF/UFPa, vimos que a Lei de Fourier

modificada apresentou coincidir dados experimentais para os mesmos valores dos parâmetros difusividade térmica (D), condutividade térmica (K) e variação do índice de refração (dn/dT) já conhecidos na literatura. Esperamos com isso, um passo inicial para este modelo com alternativa de descrição para outros casos.

Esta nova fundamentação teórica pode ser usada de forma a estimar valores das propriedades térmicas de matérias, como também para estabelecer tempos de relaxação para matérias onde essas propriedades já encontram valores estabelecidos.

Como sugestão para futuros trabalhos, o problema inverso pode ser resolvido para estimar os valores da condutividade térmica e do tempo de relaxação para o modelo hiperbólico. Sendo a formulação do modelo hiperbólico usada neste trabalho a mais aceita e usual na literatura, o que também pode ser feito, é usar outra formulação constitutiva, pois podemos observar que no caso do policarbonato, o tempo de relaxação mais elevado distancia da curva de dados experimentais o sinal da Lente Térmica, outra fórmula constitutiva, pode resolver este entrave. Uma destas fórmulas mostradas por Quaresma (2011) é a seguinte:

$$q + \tau_0 \frac{\partial q}{\partial t} = -K\nabla T + \tau_1 \frac{\partial(-K\nabla T)}{\partial \tau} \quad (6.1)$$

Neste caso, τ_0 e τ_1 , são respectivamente, o atraso no estabelecimento do fluxo de calor e o atraso entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura.

7. Referências Bibliográficas

1. Al-Khairy, R. T; AL-Ofey, Z. M., “Analytical Solution of the Hyperbolic Heat Conduction Equation for Moving Semi-Infinite Medium under the Effect of Time-Dependent Laser Heat Source,” *Journal of Applied Mathematics*, vol. 2009, Article ID 604695, 18 pages, 2009. doi:10.1155/2009/604695.
2. Baesso, M. L., Shen, J., Snook, R. D., Mode-mismatched thermal lens determination of temperature-coefficient of optical-path length in soda lime glass at different wavelengths. *Journal of Applied Physics*, 75 (8) 3732-3737, 1994.
3. Carey, G. F. ; Tsai, M. Hyperbolic Heat transfer with reflection. *Numerical Heat transfer*, 1982, vol. 5, pp. 309-327.
4. Cattaneo, C., “Sulla Conduzione del Calore,” *Atti del Seminario Matematico e Fisico dell’Universita di Modena*, Vol. 3, 1948, pp. 83–101.
5. Chen, Tzer-Ming. Numerical solution of hyperbolic heat conduction in thin surface layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2007, Vol.50(21), pp.4424-4429.
6. Cotta, R. M.; Mikhailov, M. D. *Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. Willey, England, 1997.
7. Cotta, R., Quaresma, J., Macêdo, E.. “An Analysis of Heat Conduction Models for Nanofluids”, *Heat Transfer Engineering*, **31 (14)** (2010), 1125 – 1136.
8. Dai, Weizhong and Niu, Tianchan. *A hyperbolic two-step model based finite difference scheme for studying thermal deformation in a double-layered thin film exposed to ultrashort pulsed lasers*. *International Journal of Thermal Sciences* 48 (2008) 34–49.
9. Falcão, E. A *et al.* A utilização da técnica de lente térmica para a análise das propriedades térmicas de materiais transparentes *Cerâmica* 55 (2009) 337-340.
10. Glass, D. E., Ozisik, M.N., D.S. McRae, B. Vick, On the numerical solution of hyperbolic heat conduction, *Numer. Heat Transfer* 8 (1985) 497-504.
11. Gordon, J. P. et al. Long-transient effects in lasers with inserted liquid sample. *Journal of Applied Physics*. V. 36, n.1, p.3-8, 1965.
12. Grabiner, F.R. ,Sibertd.R. and G. W. Flinn, *Chem. Phys. Lett.* 17, 189 (1972).

13. Hu, C., Whinnery, J. R. New thermo optical measurement method and a comparison with other methods. *Applied Optics*, v. 12, n. 1, p. 72- 79, 1973.
14. Kar, A.; Chan, C.L. and Mazumder, J. Comparative studies on nonlinear hyperbolic and parabolic heat conduction for various boundary conditions: analytic and numerical solutions, *J. Heat Transfer* 114 (1992) 14-20.
15. Lam, Tung T. ; Fong, Ed. Application of solution structure theorem to non-Fourier heat conduction problems: Analytical approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2011, Vol.54(23), pp.4796-4806.
16. Lewandowska, M.; Malinowski, L. An analytical solution of the hyperbolic heat conduction equation for the case of a finite medium symmetrically heated on both sides. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2006, Vol.33(1), pp.61-69.
17. Lima, Jurandir. *Aplicação da Técnica da Lente Térmica em materiais ópticos*. 1999. 98p. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade de São Carlos, São Carlos. 1999.
18. Marcano, A., et al. Optimizing and calibrating a mode-mismatched thermal lens experiment for low absorption measurement . *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics*, v. 23, n. 7, p. 1408-1413, 2006.
19. Moosaie, Amin ; Atefi, Gholamali ; Fardad, Abas. Two-dimensional non-Fourier heat conduction with arbitrary initial and periodic boundary conditions. *Forschung im Ingenieurwesen*, 2008, Vol.72(2), pp.67-76.
20. Moosaie, Amin. Non-Fourier heat conduction in a finite medium with arbitrary source term and initial conditions. *Forschung im Ingenieurwesen*, 2007, Vol.71(3) PP.163 -169.
21. Mura, João. *Espectroscopia de Lente Térmica e técnicas convencionais aplicadas no estudo de biopolímeros e do PVA em função da temperatura*. 206p. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá. 2005.
22. Naveira, C. P. M. Lachi, R. M. Cotta, e J. Padet. Hybrid formulation and solution for transient conjugated conduction-external convection. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(1-2):112–123, 2009.
23. Ozisik, M. N.. *Heat Conduction*, Wiley, New York, NY, USA, 2nd edition, 1993.
24. ÖZISIK, M. N.; *Finite Difference Methods in Heat Transfer*. CRC, 1994.

25. Pedreira, P. R. B. *et al*. Real-time quantitative investigation of photochemical reaction using thermal lens measurements: Theory and experiment. *Journal of Applied Physics*, v. 100, p. 04490, 2006.
26. Pelegri, Marcelo. *Aplicação da Técnica da Transformada Integral para Solução de Problemas Difusivos Transientes com Propriedades Termofísicas Variáveis*. 2005. 128p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, 2005.
27. Pereira, T. J. G.; Machado, L. F. G., Ferreira, J. L.; Macêdo, E. N. Mathematical Modeling of Supercritical Extraction: Model of Two Phases with Linear Equilibrium. In: XXXIV IBERO-LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING, 2013, Pirenópolis. Anais. Pirenópolis: UFG, 2013. p. 1-15.
28. Rohling, Jurandir. *Lente térmica diferencial: um novo método para a análise da transição vítrea de polímeros*. 2001. 99p. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá. 2001.
29. SADIKU, M. N. O.; OBIOZOR, C. N. A. *Simple introduction to the method of lines*. *International journal of electrical engineering education*, v.37, p.282-296. 2002.
30. Sheldon, S. J., Knight, L. V. and Thorne, J. M., Laser-induced thermal lens effect – a new theoretical-model. *Applied Optics*, v.21, n. 9, p 1663-1669, 1982.
31. Shen, J., Lowe, R. D., Snook, R. D., A model of CW laser-induced mode-mismatched Dual-Beam Thermal Lens spectrometry. *Chemical Physics*, v. 165, n.2/3, p. 385-396, 1992.
32. Siegman A. E. *An Introduction to Lasers and Masers*. (McGraw-Hill, 1971).
33. Silva, Luiz F. *Espectroscopias de Lente Térmica e Espelho Térmico aplicadas na determinação de propriedades termo-ópticas do Polivinil Álcool (PVA) com Nanopartículas de Beta-Caroteno e Nanotubos de Carbono*. 2013. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade Federal do Pará, Belém. 2001.
34. Tao Yu-Jia *et al*. Numerical Simulation of the Non-Fourier Heat Conduction in a Solid-State Laser Medium *Chinese Phys. Lett.* **23** 2487. 2006.

35. Wang, Chi-Chang. Direct and inverse solutions with non-Fourier effect on the irregular shape. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2010, Vol.53(13), pp.2685-2693.
36. Yang, Ching-yu. Direct and inverse solutions of the two-dimensional hyperbolic heat conduction problems. *Applied Mathematical Modelling*, 2009, Vol.33(6), pp.2907-2918.
37. Yilbas. B. S.; Al-Dweik. A. Y.; Bin Mansour. S., Analytical solution of hyperbolic heat conduction equation in relation to laser short-pulse heating. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 2011, Vol.406(8), pp.1550-1555.

Apêndice

Como complemento deste trabalho, é mostrada a descrição de cada rotina usada nos algoritmos computacionais feitos para este trabalho:

Rotinas

QDAG

A rotina QDAG é um integrador de uso geral que utiliza um esquema adaptativo global, a fim de reduzir o erro absoluto. Subdivide o intervalo $[A, B]$ e usa a regra de Gauss-Kronrod para estimar a integral sobre cada subintervalo. O erro para cada subintervalo é estimado por comparação com a regra de quadratura de Gauss. O subintervalo com o maior erro estimado é então bipartido e o mesmo procedimento é aplicado a ambas as metades. A processo de bissecção é continuado até que o critério de erro seja satisfeito, um erro de arredondamento é detectado, os subintervalos tornam-se pequenos, ou o número máximo permitido de subintervalos é atingido.

IVPAG

Resolve um problema de valor inicial para equações diferenciais ordinárias usando tanto o método Adams-Moulton ou o método de Gear. A rotina IVPAG resolve um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem da forma $y' = f(t, y)$ ou $Ay' = f(t, y)$, com as condições iniciais, onde A é uma matriz quadrada não singular de ordem N . Duas classes de métodos de etapas lineares estão disponíveis. O primeiro é o método de Adams-Moulton (até a ordem de doze); o segundo usa a fórmula de diferenciação regressiva (até a ordem de cinco). O método de diferenciação regressiva é muitas vezes chamado de método rígido de Gear. Em ambos os casos, porque as fórmulas básicas estão implícitas, um sistema de equações não lineares deve ser resolvido em cada passo. A matriz derivada neste sistema tem a forma $L = A + \eta J$ onde η é um pequeno número calculado pela rotina IVPAG e J é o Jacobiano.

ZREAL

A rotina ZREAL calcula n zeros reais de uma função real f . Dada uma função f fornecida pelo usuário (x) e um vetor n de valores iniciais x_1, x_2, \dots, x_n , a rotina utiliza o método de Müller para localizar n zeros reais de f , isto é, n valores reais de x para o qual $f(x) = 0$.