EAIC
XIX Encontro Anual de Iniciação Científica

ANÁLISE UNIDIMENSIONAL DA CONDUÇÃO DE CALOR ATRAVÉS DO MÉTODO DO CAMINHO RANDÔMICO DE TEMPO CONTÍNUO

Ederson Pauletti (Iniciação Cientifica Voluntaria - UNICENTRO),
Eduardo Vicentini (Orientador - UNICENTRO), e-mail: evicentini@unicentro.br.
Pedro Pablo González-Borrero (Unicentro)

Universidade Estadual do Centro-Oeste/Departamento de Física/Guarapuava, PR.

Setor de Ciências e da Terra/ Física.

Palavras-chave: Condução de Calor, Movimento Browniano, Caminho Randômico

Resumo: (Arial 12, Negrito, alinhado à esquerda)

Neste trabalho foi analisado o processo de condução de calor em um sistema unidimensional através do método do caminho randômico de tempo continuo. Foi proposta uma função gaussiana normalizada para o comprimento de pulo e uma função com decaimento exponencial para o tempo de espera. Com este método foi possível obter relações entre as variáveis microscópicas de materiais, como o tempo livre médio e o caminho livre médio, e as constantes que caracterizam termicamente o meio, como a condutividade e difusividade térmica. Os resultados estão em conformidade com os encontrados na literatura.

Introdução

No método do caminho randômico de tempo continuo (com a sigla CTRW, do nome em inglês) é necessário definir a função densidade de probabilidade $\psi(x,t)$ para que o caminhante execute um pulo de comprimento entre x e $x+dx$, gastando um tempo entre t e $t+dt$. Outras densidades de probabilidades necessárias, definidas a partir desta, são [1]:

$$\lambda(x)=\int_0^\infty \psi(x,t)\,dt \tag{1}$$

$$\omega(t)=\int_{-\infty}^\infty \psi(x,t)\,dx \tag{2}$$

sendo que $\lambda(x)dx$ representa a probabilidade de um pulo, em qualquer tempo, de comprimento entre x e $x+dx$ e $\omega(t)$ a probabilidade de tempo de espera, para qualquer pulo, entre t e $t+dt$.

A probabilidade de chegada na posição x no tempo t, está relacionada com a probabilidade de chegada no outro sítio com posição x' no tempo t', $\eta(x',t')$ como:

$$\eta(x,t)=\delta(x)\delta(t)+\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_0^\infty \eta(x',t')w(x-x',t-t')dt' \tag{3}$$

Em que $\delta(x)\delta(t)$ representa a condição inicial.

A probabilidade do caminhante estar em uma posição x, num tempo t, denominada propagador, é expressa matematicamente como:

$$w(x,t) = \int_0^t \eta(x,t')\Phi(t-t')dt' \tag{4}$$

em que $\Phi(t)$ é a probabilidade cumulativa, ou seja, das partículas que permanecem no local onde se deseja conhecer o propagador, expressa como:

$$\Phi(t) = 1 - \int_0^t \omega(t')dt' \tag{5}$$

Aplicando as transformadas de Fourier-Laplace nas Eqs. (4) e (5), respectivamente, o propagador no espaço de Fourier-Laplace torna-se [1]:

$$W(k,u) = \frac{1-\Omega(u)}{u}\frac{1}{1-\Psi(k,u)} \tag{6}$$

sendo que as letras maiúsculas representam a transformada de Fourier-Laplace das funções equivalentes em letras minúsculas.

A difusão do caminhante randômico é dada pela relação:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 w(x,t)\,dx = 2\alpha t \tag{7}$$

sendo α o coeficiente de difusão do meio.

Para a análise da condução térmica, $w(x,t)$ deve ser relacionado com a distribuição de temperatura do material. O coeficiente de difusão passa a ser interpretado com a difusividade térmica do meio, que se relaciona com a condutividade térmica *k* como [2]:

$$k = \alpha C \tag{8}$$

sendo C a capacidade calorífica do meio.

Materiais e métodos

Considere um material de comprimento *a*, caracterizado termicamente por *k* e *C.* Duas superfícies isotérmicas planas são mantidas a temperaturas T_0 e T_a, localizadas nas posições $x = 0$ e $x = a$, respectivamente, do material.

Como existe uma diferença de temperatura entre as superfícies, então haverá um fluxo de calor entre elas. Utilizando o método das funções de Green para condições iniciais [3], a distribuição de temperatura no intervalo de 0 a a torna-se:

$$T(x,t) = T_0 - (T_0 - T_a)\int_0^{\infty} \left[w'(x-\varepsilon,t) - w'(x+\varepsilon,t) \right] d\varepsilon \tag{9}$$

sendo w' o propagador w (Eq. 4), normalizado para o intervalo (*0,a*).

Foi utilizada uma função de probabilidade de pulo desacoplada, ou seja, $w(x,t) = \lambda(x)\omega(t)$ e proposto para o comprimento de pulo e tempo de espera as seguintes funções:

$$\lambda(x) = \frac{\exp\left(-x^2\tau/2\sigma^2 t\right)}{\sqrt{2\pi}\,\sigma\, erf\left(a/\sqrt{2}\,\sigma\right)} \tag{10}$$

e

$$\omega(t) = \frac{\exp - t/\tau}{\tau} \tag{11}$$

a Eq. (10) é uma função Gaussiana normalizada no intervalo de $(-a, a)$, sendo σ o parâmetro de dispersão e a Eq. (11) é caracterizada por um decaimento exponencial, sendo τ o tempo médio. Utilizando as funções propostas nas Eqs. (10) e (11), considerando-se $a >> \sigma$ e o propagador no espaço de Fourier-Laplace torna-se:

$$W(k,u) = \frac{1}{u + k^2\sigma^2/2\tau} \tag{12}$$

e a função densidade de probabilidade torna-se:

$$w'(x,t) = \frac{\exp\left(\dfrac{-x^2\tau}{2\sigma^2 t}\right)}{\sigma\sqrt{\dfrac{\pi t}{2\tau}}\, erf\left(\dfrac{a}{\sigma}\sqrt{\dfrac{\tau}{2t}}\right)} \tag{13}$$

sendo que a Eq. (13) já está normalizada no intervalo (*0,a*).

Resultados e Discussão

Substituindo a densidade de probabilidade na Eq. (9), obtemos o seguinte resultado para a distribuição de temperatura:

$$T(x,t) = T_0 - (T_0 - T_a)\frac{erf\left(\dfrac{x}{\sigma\sqrt{2t/\tau}}\right)}{erf\left(\dfrac{a}{\sigma\sqrt{2t/\tau}}\right)}. \tag{14}$$

Para grandes intervalos de tempos as curvas perdem a característica do regime transiente de temperatura e tendem a uma função linear do tipo:

$$T(x,t) = T_1 - (T_1 - T_2)\frac{x}{a} \qquad com \frac{t}{\tau} >> \frac{a^2}{2\sigma^2} \tag{15}$$

Os parâmetros estatísticos utilizados podem ser interpretados pela física térmica. Calculando a variação do deslocamento quadrático médio dos caminhantes randômicos, para o caso em que $a \gg \sigma$, obtemos:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \int_{-a}^{a} x^2 \lambda(x)dx \approx \sigma^2 \tag{16}$$

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t\omega(t)dt = \tau \tag{17}$$

Analisando a Eq. (16) vemos que o parâmetro de dispersão σ representa o livre caminho médio percorrido pelo transportador de energia responsável pela condução térmica, que pode ser os elétrons de condução, no caso de materiais condutores, ou fônons no caso de semicondutores. Assim como, pela Eq. (17) τ é o tempo livre médio entre colisões para elétrons ou o tempo de relaxação para fônons.

Calculando o deslocamento médio quadrático do caminhante randômico, obtemos, para $a >> \sigma$ e $t >> \tau$:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_0^a x^2 w(x,t)dx = \frac{\sigma^2}{\tau} t \qquad (18)$$

Da Eq. (7) vemos que o coeficiente de difusão é $\alpha = \sigma^2 / 2\tau$ e, a fim de comparar com a Eq. (8), devemos considerar que nosso sistema unidimensional é isotrópico, onde $v^2 = 3v_x^2$ e $\gamma^2 = 3\gamma_x^2 = 3\sigma^2$, sendo v a velocidade média do transportador no meio (que para fônons é a velocidade do som) e γ o livre caminho médio característico do material. Da relação [4]:

$$k = \frac{v\gamma C}{3} \qquad (19)$$

obtemos:

$$k = v_x \sigma C \qquad (20)$$

e da Eq. (8), concluímos que $v_x = \sigma / 2\tau$.

Conclusões

Foi desenvolvida a análise da condução do calor em um sistema unidimensional através do método do caminho randômico de tempo contínuo. Os resultados são os mesmos encontrados na literatura para sistemas em que as suas dimensões são muito maiores que a trajetória livre média. Nós esperamos com nosso método sermos capazes de investigar problemas de condução de calor em sistemas com pequenos comprimentos, como por exemplo, filmes finos e nanofluidos.

Agradecimentos

Agradecemos ao MEC- Ministério da Educação, por parte do financiamento deste trabalho por meio do Programa de Educação Tutorial (PET).

Referências

1. Metzler, R; Klafter, J. The random wak’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Rep*. 2000, 339, 77.
2. Marín, E. The role of thermal properties in periodical time varying phenomena. *Eur. J. Phys*. 2007, 28, 429.
3. Butkov, E. *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Guanabara, 1988. Kitel, C. *Introdução à física do estado sólido.* Rio de Janeiro: LTC, 2006.
4. Kitel, C. *Introdução à física do estado sólido.* Rio de Janeiro: LTC, 2006.