



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA

CIRO CAMPOS CHAVES

MODELAGEM COMPUTACIONAL DE TOCHAS DE PLASMA
PPGMC – UESC

ILHÉUS-BA
2017

CIRO CAMPOS CHAVES

MODELAGEM COMPUTACIONAL DE TOCHAS DE PLASMA
PPGMC – UESC

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Gesil Sampaio Amarante Segundo

ILHÉUS-BA
2017

C512 Chaves, Ciro Campos.
Modelagem computacional de tochas de plasma PPGMC-UESC / Ciro Campos Chaves. – Ilhéus : UESC, 2017.
87f. : il.
Orientador : Gesil Sampaio Amarante Segundo.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Santa Cruz. Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional e, Ciência e Tecnologia.
Inclui referências.

1. Plasma (gases ionizados) – Modelagem por computador.
2. Simulação (computador). I. Amarante Segundo, Gesil Sampaio. II. Título.

CDD – 530.44

CIRO CAMPOS CHAVES

MODELAGEM COMPUTACIONAL DE TOCHAS DE PLASMA
PPGMC – UESC

Ilhéus-BA, 31/08/2017

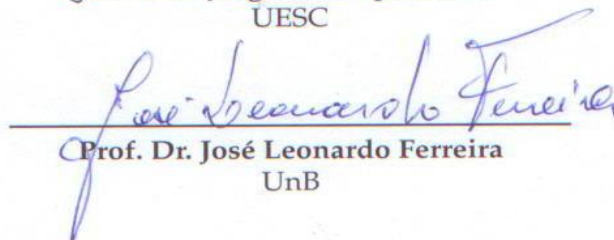
Comissão Examinadora



Prof. Dr. Gesil Sampaio Amarante
Segundo
UESC
(Orientador)



Prof. Dr. Jorge Henrique Sales
UESC



Prof. Dr. José Leonardo Ferreira
UnB

Dedico: Aos meus pais Ivone e Mário, ao meu filho Airon Gabriel e ao grande amor da minha vida, Nany.

Agradecimentos

- Agradecimento especial ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional - PPGMC, por fornecer todo suporte e toda infra estrutura necessária para a realização deste trabalho.
- À FAPESB, pelo apoio financeiro.
- Aos professores do programa, pela importantíssima contribuição na construção de conhecimento, em especial ao meu orientador Gesil Sampaio Amarante Segundo, por toda a paciência e dedicação.
- A meus familiares e pessoas mais íntimas, por estarem ao meu lado e fazerem parte da minha vida, contribuindo para meu bem estar e tornando possível o desenvolvimento deste trabalho.

*“É obrigação de todo homem devolver ao mundo
pelo menos o equivalente do que ele retirou.”*
- ALBERT EINSTEIN

Resumo

As tochas de plasma de acoplamento indutivo excitadas por fonte RF são amplamente utilizadas em diversas aplicações industriais e laboratoriais. A sua popularidade dar-se-à mediante o fato de que a interação do gerador com o plasma é fruto da interação de correntes de deslocamento, e não correntes verdadeiras, como é o caso de reatores DC, por exemplo. Tal fato é desejável em inúmeras aplicações, pois a presença de eletrodos portadores de altas correntes em contato direto com o plasma pode contaminá-lo com impurezas. Além disso, a própria vida útil e confiabilidade da tocha é maior nesse caso. Tais fatos justificam o interesse nesses modelos de tocha cada vez mais difundidos e estudados. Partindo do paradigma da engenharia moderna, entre a fase de desenvolvimento de uma nova tecnologia e a fase de implementação da mesma, antes mesmo de conceber um protótipo, a utilização de modelos computacionais é muito importante, já que custos de projeto podem ser reduzidos quando podemos testar computacionalmente alguma solução tecnológica. Partindo destas premissas foi desenvolvido este trabalho, que têm como objetivo geral escolher um modelo de tocha de plasma acoplada indutivamente, utilizando a sua geometria como base para o desenvolvimento de um modelo que, submetido à certas condições e simplificações, será resolvido utilizando uma aproximação pelas equações MHD para estimar os campos de velocidade e temperatura no interior da tocha. Serão testados alguns gases de trabalhos diferentes e propostas algumas modificações na geometria da tocha, onde os resultados serão comparados entre si, a fim de investigar a influência destes parâmetros nos resultados das simulações.

Palavras-chave: Tocha de plasma. Plasma térmico. Modelagem computacional de tochas de plasma.

Abstract

Inductive coupling plasma torches excited by RF source are widely used in many industrial and laboratory applications. Its popularity will be due to the fact that the interaction of the generator with the plasma is the result of the interaction of displacement currents, not true currents, as is the case of DC reactors, for example. This fact is desirable in many applications, since the presence of electrodes carrying high currents in direct contact with the plasma can contaminate it with impurities. In addition, the very life and reliability of the torch is greater in this case. Such facts justify the interest in these models of torch increasingly diffused and studied. Starting from the paradigm of modern engineering, between the development phase of a new technology and the implementation phase of it, even before designing a prototype, the use of computational models is very important, since design costs can be reduced when we can Computationally test some technological solution. Based on these premises, this work was developed, whose general objective is to choose an inductively coupled plasma torch model, using its geometry as the basis for the development of a model that, subject to certain conditions and simplifications, will be solved using an approximation by MHD equations to estimate the velocity and temperature fields within the torch. Some different work gases will be tested and some modifications will be proposed in the torch geometry, where the results will be compared to each other, in order to investigate the influence of these parameters on the results of the simulations.

Keywords: Plasma torch. Thermal plasma. Plasma torch computational modelling.

Lista de figuras

Figura 1 – A função $\alpha(T)$ que representa o percentual de ionização, em função da temperatura	9
Figura 2 – Temperatura do Plasma em função da pressão	10
Figura 3 – Condutividade Térmica do Plasma	12
Figura 4 – Condutividade Elétrica do Plasma	13
Figura 5 – Viscosidade Elétrica do Plasma	13
Figura 6 – Densidade demassa do Plasma	14
Figura 7 – Plasmas de Micro-Ondas	16
Figura 8 – Plasmas de Micro-Ondas	16
Figura 9 – Esquemático de uma Tocha de Plasma de Acoplamento Indutivo . .	18
Figura 10 – Situação descrita para a dedução da equação 2.	20
Figura 11 – Frequência da onda eletromagnética em função da densidade de elétrons	21
Figura 12 – Plasma cilíndrico com condutividade elétrica σ , raio a , e <i>skin depth</i> δ , gerado através de um acoplamento indutivo	21
Figura 13 – Pequeno volume de fluido	25
Figura 14 – Fluxo de massa que entra e sai do elemento	26
Figura 15 – Forças viscosas agindo em um elemento de fluido	27
Figura 16 – Forças de superfície na direção x agindo no elemento de fluido . . .	28
Figura 17 – Componentes do vetor de fluxo de calor $\mathbf{q}$ agindo no elemento de fluido.	29
Figura 18 – Demonstração do fluxo que sai de uma superfície fechada, para campos elétricos, à esquerda, e campos magnéticos, á direita.	33
Figura 19 – Caso em que a espira se movimenta em um campo magnético estático. Neste caso, dizemos que a área está variando. Isso equivale a dizer que a área da espira que é enlaçado pelo campo magnético irá variar.	37
Figura 20 – Malha de elementos finitos para uma região com geometria 2D. . . .	42
Figura 21 – Exemplo de malha 1D.	43
Figura 22 – Representação dos graus de liberdade para um ponto e um pequeno volume, em uma geometria 3D.	44
Figura 23 – Domínio 2D do exemplo aplicativo de condução de calor.	45
Figura 24 – Domínio 2D do exemplo aplicativo de condução de calor.	45
Figura 25 – Elemento arbitrário e e as coordenadas dos nós.	48
Figura 26 – Modelos de tocha desenvolvidos pela Tekna Plasma Systems Inc. . .	56
Figura 27 – Esquemático da Tekna PL 35	56
Figura 28 – Geometria da tocha desenhada no COMSOL	57

Figura 29 – A tocha representada como um modelo de transformador virtual . . .	64
Figura 30 – Modelo transformador da tocha	64
Figura 31 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy <i>et al</i> (1994) e pelo COMSOL para o gás Argônio	66
Figura 32 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy <i>et al</i> (1994) e pelo COMSOL para o gás Oxigênio	67
Figura 33 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy <i>et al</i> (1994) e pelo COMSOL para o gás Nitrogênio	67
Figura 34 – Geração da malha computacional	69
Figura 35 – Distribuição de temperaturas para o gás Argônio	72
Figura 36 – Distribuição de temperaturas para o gás Oxigênio	73
Figura 37 – Distribuição de temperaturas para o gás Nitrogênio	74
Figura 38 – Temperatura nas paredes do tubo externo da tocha	75
Figura 39 – Temperatura no centro da tocha	76
Figura 40 – Distribuição radial de temperatura na altura da terceira espira	77
Figura 41 – Velocidade do gás no centro da tocha	78
Figura 42 – Temperatura nas paredes do tubo externo da tocha para as geometrias propostas	79
Figura 43 – Temperatura central na tocha para as geometrias propostas	80
Figura 44 – Distribuição radial de temperatura na altura da terceira espira de cada geometria	81

Lista de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros do plasma em relação a seu equilíbrio	11
Tabela 2 – Medidas em destaque da tocha de plasma modelada	58
Tabela 3 – Parâmetros fixos	65
Tabela 4 – Modificações no gás de trabalho	65
Tabela 5 – Modificações na geometria da bobina	65
Tabela 6 – Temperatura máxima alcançada	71

Lista de abreviaturas e siglas

AC	<i>Alternating Current</i> ou Corrente Alternada
DC	<i>Direct Current</i> ou Corrente Contínua
EDP	Equações Diferenciais Parciais
FEM	Força Eletro Motriz
lpm	Litro por minuto
LTE	<i>Local Thermodynamic Equilibrium</i> ou Equilíbrio Termodinâmico Local
MEF	Método dos Elementos Finitos
MHD	MagnetoHidroDinâmica
RF	Rádio Frequência

Lista de símbolos

A	Vetor potencial magnético
B	Fluxo magnético
c_p	Capacidade térmica de um gás
D	Campo elétrico
F	Força de Lorentz
H	Campo magnético
I	Matriz Identidade
J	Densidade superficial de corrente elétrica
m	Massa
p	Pressão
q	Fluxo de calor
T	Temperatura
u	Campo de velocidades
Ψ	Fluxo elétrico
n_e	Número de densidade do elétron
ϵ_0	Constante de permissividade elétrica
μ_0	Constante de permeabilidade magnética
δ	<i>Skin Depth</i> ou profundidade de atenuação
σ	Densidade superficial de carga
ρ	Densidade
τ	Tensor de stress
ω	Frequência angular
ω_p	Frequência do elétron de plasma em <i>rad/s</i>
ν_p	Frequência do elétron de plasma em <i>Hertz</i>

Sumário

1 – Introdução	1
1.1 Apresentação	1
1.2 Problema de pesquisa	3
1.3 Questões de pesquisa	4
1.3.1 Questão central	4
1.3.2 Questões secundárias	4
1.4 Hipóteses	4
1.5 Objetivo geral	5
1.6 Objetivos específicos	5
1.7 Justificativa	5
2 – Fundamentos de Física de Plasmas	7
2.1 Definição das propriedades gerais do plasma	7
2.2 Caracterização dos métodos para geração de Plasmas	14
2.2.1 Plasmas de Micro-Ondas	15
2.2.2 Reator de Plasma RF de Acoplamento Capacitivo	16
2.2.3 Reator de Plasma RF de Acoplamento Indutivo	17
3 – Formulação matemática	23
3.1 Dinâmica dos fluidos	23
3.2 Eletromagnetismo	31
3.3 MagnetoHidroDinâmica	37
3.4 Métodos Numéricos: Método dos Elementos Finitos	41
3.4.1 Formulação Forte de um problema	44
3.4.2 Formulação Fraca de um problema	46
4 – Ferramenta Computacional: COMSOL Multiphysics®	50
5 – Procedimentos Metodológicos	53
5.1 Introdução	53
5.2 O modelo da tocha	55
5.3 Configuração das físicas envolvidas: Condições Iniciais e condições de Contorno	59
5.3.1 Equações dominantes	59
5.3.2 Condições Iniciais e Condições de Contorno	60
5.3.3 Simplificações e outros parâmetros	61

5.4	O estudo comparativo: Modificações no gás de trabalho e na geometria da tocha	62
5.5	Validação do modelo	65
5.6	Geração da malha computacional	68
6	– Resultados e discussões	70
6.1	Modificações no gás de trabalho	70
6.2	Modificações na geometria da tocha	78
7	– Conclusão e trabalhos futuros	82
	Referências	85

1 Introdução

1.1 Apresentação

O termo plasma foi introduzido por Irvin Langmuir, em 1928, para designar o estado da matéria em uma coluna positiva de um tubo de descarga. A forma de apresentação da matéria é comumente associado aos seus estados físicos, que são os estados sólidos, líquido, gasoso. Podemos citar a água como um exemplo clássico, em suas apresentações na forma líquida, na forma de vapor e na forma de gelo. Ocorre que, falando em uma escala mais macroscópica, ou seja, em todo o universo, são pouquíssimas as substâncias que se apresentam nestes estados físicos. Excluindo-se a pequena quantidade de substância do universo que apresenta-se nestes três estados clássicos, todo o restante encontra-se num estado denominado *plasma*.

O plasma, também conhecido como o quarto estado da matéria, é o estado mais encontrado no universo bariônico¹. Em todo o cosmos é possível verificar a existência de plasma. Sabe-se da literatura que, o que distingue, por exemplo, o sólido, líquido e gasoso é a diferença na força de ligação que mantém as partículas da matéria. É intuitivo pensar que essa força é mais intensa nos sólidos e fraca ou inexistente nos gases, e é exatamente o que ocorre na prática. Em relação ao plasma e a sua forma de obtenção, imaginemos o aquecimento da matéria. Ao aquecer, os átomos irão adquirir mais energia térmica, e quando essa energia é maior que a energia de ligação, ocorre o que chamamos de mudança de fase, por exemplo uma água aquecida que vira vapor. Este processo de aquecimento pode continuar, e conforme há o aumento de temperatura no gás, o movimento dos átomos torna-se cada vez mais enérgico, aumentando cada vez mais o número e a frequência de colisões entre os átomos deste gás. Daí, o gás, que inicialmente era eletricamente neutro, passa a estar parcialmente ionizado. Até um certo grau de ionização, determinado pela equação de Saha, mostrada à seguir, teremos a formação do plasma.

Apesar de ser encontrado vastamente no cosmos, o plasma também pode ser produzido em laboratório ou na indústria, para uma variedade de aplicações laboratoriais e industriais. Podemos citar vários exemplos, de processos mais simples até processos mais complexos. A lâmpada fluorescente, que normalmente todas as pessoas têm em suas casas, é um exemplo de aplicação tecnológica do plasma. Chips de silício também podem ter o plasma empregados em sua fabricação. Dentre outras aplicações, podemos citar:

¹Apenas 4% do universo é constituído da matéria como a conhecemos, formada por átomos. O restante, 96% do universo, constitui matéria escura e energia escura.

- Fabricação de semicondutores
- Sintetização de materiais
- Soldagem
- Corte térmico
- Polimerização
- Revestimentos anti-corrosivos por aspersão térmica
- Endurecimento superficial
- Produção de aço e ligas especiais
- Secadores industriais
- Destruição de resíduos sólidos urbanos
- Destruição de resíduos tóxicos, hospitalares
- etc.

Dentre as metodologias de geração de plasmas, ou seja, quanto ao tipo de reator utilizado, o tipo escolhido para ser modelado computacionalmente neste trabalho foi a tocha de plasma de acoplamento indutivo. Em se tratando da mesma, existem aplicações na metalurgia, com corte e soldagem de materiais, no desenvolvimento de técnicas para purificação do silício, na destruição de resíduos sólidos urbanos e hospitalares, dentre outros. Um ponto que chama bastante atenção é a aplicação na gestão de resíduos sólidos urbanos e hospitalares. Com o aumento na preocupação das questões ambientais e a política não muito bem definida para gestão dos resíduos urbanos, por exemplo, por parte das prefeituras - falando num contexto de Brasil, o uso da tecnologia de plasma é muito atrativa, pois sabe-se que a tecnologia via plasma reduz em mais de 99,9% o volume dos resíduos, não sendo oriundo de incineração da matéria, mas sim de sua desassociação química, sendo, portanto, a melhor tecnologia existente na atualidade para tal finalidade. Sua importância se dá também pelo fato de o processo de tratamento de resíduos sólidos poder ser usado como forma de co-geração de energia, já que a energia dissipada no processo de tratamento via plasma pode ser reaproveitada, como em uma pequena usina de co-geração de energia ([TECNOLOGIA... , 2011](#)). Da literatura, sabe-se também que não existe tecnologia que possa competir com a tecnologia de plasma para a gestão de resíduos sólidos, hospitalares ou lixo eletrônico. Tendo em vista a importância da problemática ambiental, que está em alta na pauta da comunidade científica. Discutir e estudar metodologias eficientes para a gestão dos

resíduos é importante, bem como estudar o desenvolvimento de ferramentas em potencial para tal. Inclusive, o prosseguimento do desenvolvimento deste trabalho, que seria, de fato, um modelamento ainda mais realista e, posteriormente, a construção de um protótipo, pode ser aplicado na própria região em que o mesmo fora desenvolvido para uma aplicação em gestão de resíduos sólidos e hospitalares, tendo em vista que não existem boas políticas definidas para o tratamento destes tipos de resíduos na região.

Os plasmas de aplicações tecnológicas são os mais interessantes de serem estudados, do ponto de vista de engenharia. Os plasmas para estes tipos de aplicações são denominados plasmas térmicos ou plasmas de baixa pressão em equilíbrio termodinâmico. Para todas as aplicações citadas acima, é necessária a utilização de um *reator a plasma*. Um reator a plasma é composto de vários componentes, a depender do tipo e do modo de geração de plasmas, que serão discutidos no capítulo posterior. Em linhas gerais, a parte ativa do reator é denominado *tocha de plasma*. Existem diversos tipos de tocha de plasma, como as tochas DC, AC, RF de acoplamento indutivo, capacitivo ou de Micro-ondas, etc. A escolha de um ou outro tipo de tocha de plasma irá depender do tipo de finalidade de sua geração, ou seja, de qual aplicação tecnológica irá se destinar a utilização do plasma gerado. No geral, a tocha de plasma irá utilizar uma metodologia para geração do plasma, fornecendo energia para um gás que será confinado no interior da tocha. Este gás, ao ter energia transferida para si, irá se aquecer e formar o jato de plasma do interior para fora da tocha.

Dentre os modos de geração de plasma existentes na literatura, que serão revisados no próximo capítulo deste trabalho, o modelo que será escolhido para ser modelado computacionalmente neste contexto é um modelo de tocha de plasma de acoplamento indutivo excitado por uma fonte de tensão RF. Serão apresentados, nos capítulos posteriores, a revisão acerca dos conceitos fundamentais para o entendimento deste trabalho, bem como os procedimentos metodológicos deste estudo e os resultados alcançados.

1.2 Problema de pesquisa

Tendo em vista as diversas aplicações tecnológicas para quais são destinados os reatores a plasma, surge um interesse nestes dispositivos. A evolução tecnológica, que compreende o avanço científico, por parte dos cientistas, e transformação deste conhecimento em algo palpável, por parte dos engenheiros, dar-se-à seguindo o paradigma da pesquisa e desenvolvimento. Ou seja, cientistas descobrem novas tecnologias e engenheiros buscam unificar o conhecimento científico e teórico e prática, transformando-os em algo palpável.

Entre o processo de pesquisa e desenvolvimento de um produto final, há uma fase muito importante que compreende o processo intermediário. Inicialmente, o desen-

volvimento de protótipos precedia o produto final. Ocorre que, sendo protótipos o teste de um novo produto ou nova tecnologia, o desenvolvimento de novos protótipos para pequenas alterações, por exemplo, acaba por tornar estes processos custosos. O novo paradigma da engenharia moderna inclui o uso de *modelos computacionais*. Seguindo este novo paradigma, antes do desenvolvimento de protótipos, convém aos engenheiros simular computacionalmente os modelos, utilizando softwares que contenham bibliotecas que resolvam equações modelo do problema e que contenham propriedades de materiais, dentre outros parâmetros. Portanto, do ponto de vista deste trabalho, a principal motivação em interesse no desenvolvimento deste trabalho se dá devido ao grande número de aplicações tecnológicas a que se destinam as tochas de plasma.

1.3 Questões de pesquisa

1.3.1 Questão central

- A alteração de parâmetros, como o gás de trabalho ou a geometria da bobina de cobre que envolve o tubo externo, irá alterar características do plasma, como por exemplo os campos de velocidade e de temperatura?

1.3.2 Questões secundárias

- O quão serão afetados os campos de velocidade e temperatura no interior da tocha, mediante a alteração do gás de trabalho na tocha, mantendo-se fixos outros parâmetros, como a potência da fonte RF, a sua frequência, a vazão do gás na entrada e as outras condições iniciais e de contorno?
- Mantendo-se todos os parâmetros do item anterior fixos, para um só tipo de gás, o quão serão afetados os campos de temperatura no interior da tocha, com a alteração no número e espaçamento entre as espiras da bobina?

1.4 Hipóteses

- Pelo fato de as equações modelo utilizadas dependerem fortemente das propriedades de transporte do gás de trabalho em questão, espera-se que utilizar diferentes gases irá influir fortemente, principalmente nos campos de temperatura, já que a maioria das propriedades de transporte de um gás dependem fortemente da temperatura.
- Uma tocha de plasma de acoplamento indutivo irá apresentar, segundo a literatura, um comportamento semelhante a um transformador elétrico, sendo o primário

a própria bobina da tocha e o secundário o gás de trabalho. Portanto, por conta da indutância mútua, espera-se que a alteração em parâmetros da bobina altere estes parâmetros elétricos, que são definidos em função de parâmetros físicos de descarga do plasma.

1.5 Objetivo geral

O presente trabalho tem como objetivo geral escolher e modelar computacionalmente utilizando o software COMSOL Multiphysics[®] um modelo de tocha de plasma de acoplamento indutivo excitado por fonte RF.

1.6 Objetivos específicos

O presente trabalho tem como objetivos específicos:

- Escolher um modelo de tocha de plasma acoplada indutivamente que terá a sua geometria utilizada como base para o desenvolvimento da simulação.
- Aplicar todas as simplificações, condições de contorno e iniciais citadas na metodologia deste trabalho para a resolução do modelo, mantendo-se fixas, além das condições iniciais e de contorno, a vazão do gás, potência e frequência da fonte RF e alternando o gás de trabalho entre Argônio, Oxigênio e Nitrogênio, comparando entre si, em seguida, os resultados obtidos para o campo de velocidade e o campo de temperatura no interior da tocha.
- Segundo as mesmas condições do item anterior, em se tratando das condições iniciais, de contorno e os outros parâmetros citados, efetuar modificações no número de espiras e no espaçamento entre as espiras da bobina da tocha, comparando em seguida os resultados obtidos para o campo de velocidade e o campo de temperatura no interior da tocha.

1.7 Justificativa

Diferentes modelos de tocha de plasma e diferentes metodologias de geração do mesmo são utilizados em diversas aplicações. A tocha de plasma de acoplamento indutivo vêm sendo bastante difundida devido à algumas particularidades da mesma. Alguns processos industriais envolvendo plasmas exigem um certo tipo de pureza (ROTH, 1995). O mesmo autor cita que nos geradores de plasma RF, a interação com o plasma dar-se-á via correntes de deslocamento, e não correntes verdadeiras, tornando possível a entrega de potência ao plasma sem a necessidade de eletrodos em contato

com o plasma. A presença de eletrodos irá acarretar em impurezas no plasma, algo que pode não ser desejável, a depender da aplicação. Devido ao fato de não ser necessária a presença de eletrodos portadores de corrente em contato com o plasma, a própria vida útil dos reatores de plasma tende a melhorar, melhorando assim a sua confiabilidade.

Outro ponto de destaque se dá pelo fato de que é observável na literatura que o número de trabalhos que se propõe a modelar tochas de plasma utilizando gases de trabalho que não o Argônio não é tão vasto, devido justamente às suas propriedades. Em aplicações industriais, o tipo de gás utilizado irá depender também do tipo de aplicação a ser utilizada. Por exemplo, para corte de materiais ferrosos é desejável utilizar o oxigênio como gás de plasma, devido à ação exotérmica de oxidação do ferro, que irá adicionar calor ao processo ([ROTH, 1995](#)). Portanto, este trabalho visa apresentar a sua contribuição à literatura neste sentido, bem como apresentar uma geometria simples e um modelo relativamente fácil de ser resolvido, servindo como base para o entendimento de modelos de tocha de plasma mais complexos e mais realistas, que levem em consideração outros parâmetros não considerados neste modelo.

2 Fundamentos de Física de Plasmas

Neste capítulo será apresentada uma fundamentação teórica básica acerca de física de plasmas, necessária para o entendimento deste trabalho dissertativo. Inicialmente será definido o estado físico denominado plasma, bem como as suas características, como por exemplo a geração do plasma a partir de um gás eletricamente neutro, partindo da ionização do mesmo, suas características químicas, dentre outras. Uma compilação das principais metodologias para geração de plasmas encontrada na literatura também é apresentada, primeiramente com os tipos de plasma, que podem ser os plasmas frios e os plasmas térmicos, classificações estas que dependem de quanta energia é entregue ao plasma no processo de geração, e, em consequência desta energia, propriedades como densidade eletrônica e temperatura também podem mudar.

Os modos de geração de plasma, a saber: plasma de micro-ondas, plasma de acoplamento indutivo e capacitivo também serão mencionados, com maior ênfase à geração de plasma via acoplamento indutivo, que é o foco principal no desenvolvimento deste trabalho.

Em capítulos subsequentes, será citada a formulação matemática necessária para o desenvolvimento do modelo. Teremos um problema de escoamento de um fluido, já que o gás utilizado para a geração de plasma é injetado na tocha, portanto, equações como as equações da conservação da massa, do momento e da energia, serão apresentadas. As equações de Maxwell, do eletromagnetismo também são necessárias para a formulação, onde teremos a junção entre as equações em dinâmica dos fluidos e eletromagnetismo, denominada magnetohidrodinâmica. Para finalizar a fundamentação teórica apresentada neste trabalho será apresentada a ferramenta computacional utilizada para resolver as equações do modelo, o software COMSOL Multiphysics[®] e uma revisão da literatura acerca do método numérico utilizado pelo software para a resolução das equações diferenciais parciais que modelam matematicamente a tocha de plasma de acoplamento indutivo.

2.1 Definição das propriedades gerais do plasma

É sabido, de um consenso geral, que a matéria pode apresentar-se em três estados físicos: sólido, líquido e gasoso. Como exemplo clássico, temos a água, que pode se encontrar na forma líquida, de gelo ou vapor. Do ponto de vista físico, a distinção básica entre os sólidos, líquidos e gases, conforme é trazido por [Bittencourt \(2004\)](#) está na diferença da força das ligações que mantêm as partículas da matéria, em cada estado. Estas forças de ligação são geralmente fortes em um sólido, fracas em um líquido e

praticamente ausentes em um estado gasoso. O fato de estar em um destes estados físicos depende da sua energia cinética aleatória (energia térmica) de seus átomos ou moléculas, em outras palavras, de sua temperatura. Exatamente o equilíbrio térmico entre esta energia térmica das partículas e as forças de ligação que determinam o estado físico. Quando uma substância, em estado sólido ou líquido são aquecidos, os átomos adquirem cada vez mais energia cinética térmica até que esta seja maior que a energia potencial de ligação, assim temos o que é denominado na física de mudança de fase, que ocorre a uma temperatura constante para uma determinada pressão, e ao quantificar essa energia necessária para tal fato a denominamos de calor latente.

Fornecendo energia suficiente, a temperaturas suficientemente elevadas, uma fração considerável dos átomos possuirá energia o bastante para superar, devido às colisões, a energia de ligação entre os elétrons orbitais mais externos resultando em um gás ionizado, ou plasma. No entanto, [Bittencourt \(2004\)](#) ressalta que essa transição de um gás para um plasma não é uma transição de fase no sentido termodinâmico, uma vez que ocorre de forma gradual, com o aumento da temperatura. O plasma pode, então, ser produzido elevando-se a temperatura de uma substância até que se obtenha um certo grau de ionização. Sob uma condição de equilíbrio termodinâmico, o grau de ionização e a temperatura do elétron são relacionados pela equação de Saha:

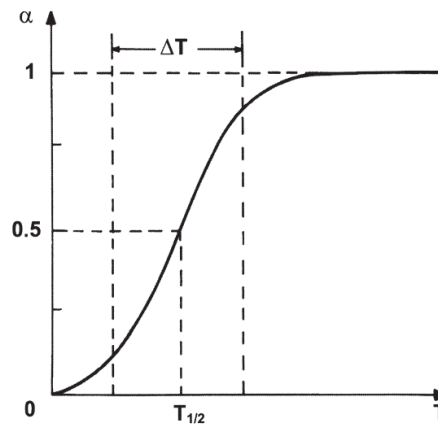
$$\frac{n_i}{n_n} = 2.405 \cdot 10^{21} T^{3/2} \frac{1}{n_i} \cdot e^{\frac{-U}{K \cdot T}} \quad (1)$$

Onde:

- n_i é a densidade de íons (m^{-3});
- n_n é a densidade de átomos (m^{-3});
- T é a temperatura do gás (K);
- U é a energia interna de ionização (eV);
- K é a constante de Boltzmann ($8.617 \cdot 10^{-5} \text{ eV}/K$).

A fração de partículas ionizadas em função da temperatura é um resultado obtido a partir da equação de Saha. Tal resultado é ilustrado no gráfico abaixo, mostrando o comportamento da curva de percentual de ionização.

Figura 1 – A função $\alpha(T)$ que representa o percentual de ionização, em função da temperatura



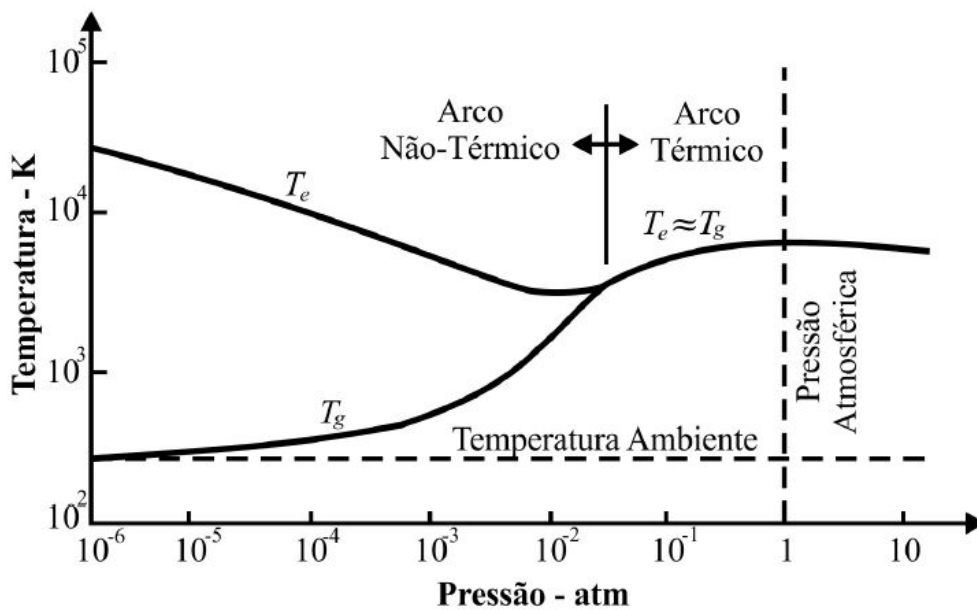
Fonte: BITTENCOURT, 2004

Existem diversos métodos descritos na literatura para a obtenção de plasmas. Bittencourt (2004) cita que a depender do método, o plasma pode ter uma alta ou baixa densidade, alta ou baixa temperatura, e assim por diante. Quanto a estas características e mudanças de propriedades em relação ao método de geração de plasmas, Chen et al. (1998) destaca que, a depender da quantidade de energia que é entregue ao plasma, as propriedades acima citadas, como densidade eletrônica e temperatura, variam de forma a distinguir o plasma em duas grandes categorias: o plasma frio e o plasma térmico. Em se tratando do equilíbrio termodinâmico, importante fator para determinar as condições às quais o modelo matemático presente na simulação deste trabalho dissertativo estão submetidas, temos que o plasma frio não apresenta qualquer tipo de equilíbrio termodinâmico, condição apresentada na literatura por Roth (1995) como *non-LTE – non – Local Thermodynamic Equilibrium*. Isto ocorre quando a pressão do plasma é abaixo de 10 kPa, fazendo prevalecer uma diferença de temperatura entre elétrons e íons. Estes tipos de plasma são usualmente empregados na indústria da microeletrônica, com energias em torno de 1 a 10 eV, e, neste caso, a temperatura dos elétrons é muito maior que a temperatura dos íons (ISOLDI, 2012). Já os plasmas térmicos, que tem como principal característica as altas temperaturas com elevadas densidades de energia, quando gerados à pressão atmosférica, da ordem de 100 kPa, apresentam baixa taxa de transferência de energia potencial do campo elétrico via colisões elásticas e inelásticas (ISOLDI, 2012). Devido à esta característica, temos uma maior proximidade entre a temperatura dos elétrons e íons em um equilíbrio térmico, condição denominada Equilíbrio Termodinâmico Local, ou *LTE – Local Thermodynamic Equilibrium*. Neste caso, a energia trocada durante as colisões entre elétrons e íons deve ser muito menor que a energia cinética proveniente do movimento dos elétrons, permitindo que estes tipos de plasma térmicos alcancem temperaturas da ordem de

$10^4 K$, com densidades eletrônicas em torno de 10^{21} e $10^{26} m^{-3}$ (ROTH, 1995).

A estabilidade do plasma é função da pressão. A baixas pressões, o caminho livre médio dos elétrons e das moléculas do gás é grande o suficiente para que se diminua a probabilidade de colisões, reduzindo a porcentagem de dissociação e ionização das moléculas, gerando, por consequência, um aumento na instabilidade do plasma. Com pressões suficientemente elevadas, na ordem da pressão atmosférica, as colisões moleculares são mais frequentes, favorecendo, portanto, a condição LTE. Na Figura 1 abaixo, podemos apreciar as temperaturas do elétron e do gás em função da pressão aplicada. Como se pode observar, em baixas pressões temos a temperatura do elétron muito maior que a temperatura do gás, enquanto que para pressões maiores que a pressão atmosférica – na verdade, em um intervalo que compreende valores um pouco abaixo de 1 atm – a temperatura do elétron e do gás tende a se igualar, entrando na condição LTE. Outras condições para cada região – equilíbrio termodinâmico ou sem equilíbrio – são mostradas na tabela 1.

Figura 2 – Temperatura do Plasma em função da pressão



Fonte: LANCASTER, 1986

O fato de estar sob condição LTE faz com que as temperaturas eletrônica, iônica e de partículas neutras sejam iguais, como mencionado anteriormente. Portanto, cada região do plasma pode ser definida por uma temperatura única, apesar de o equilíbrio ser meramente local (ROTH, 1995). Isto significa que podem existir fluxos de calor associados com gradientes de temperatura pela descarga. Esta análise geralmente é feita

Tabela 1 – Parâmetros do plasma em relação a seu equilíbrio

Parâmetros do plasma	Arco não-térmico	Arco térmico
Estado de equilíbrio	Cinético	Equilíbrio termodinâmico local
Densidade eletrônica – n_e (elétrons/m ³)	$10^{20} < n_e < 10^{21}$	$10^{22} < n_e < 10^{25}$
Pressão do gás – p (Pa)	$0,1 < p < 10^5$	$10^4 < p < 10^7$
Temperatura eletrônica – T_e (eV)	$0,2 < T_e < 2$	$1,0 < T_e < 10,0$
Temperatura do gás – T_g (eV)	$0,025 < T_g < 0,5$	$T_e = T_g$
Intensidade de Corrente Elétrica – I (A)	$1 < I < 50$	$50 < I < 10^4$
E/p (V/Pa.m)	Alta	Baixa
IE (kW/m)	$IE < 10,0$	$IE > 10,0$
Emissão catódica	Termoiônica	Campo
Intensidade Luminosa	Brilhante	Ofuscante
Transparência	Transparente	Opaca
Fração de Ionização	Indeterminada	Equação de Saha
Saída de Radiação	Indeterminada	Equilíbrio termodinâmico local

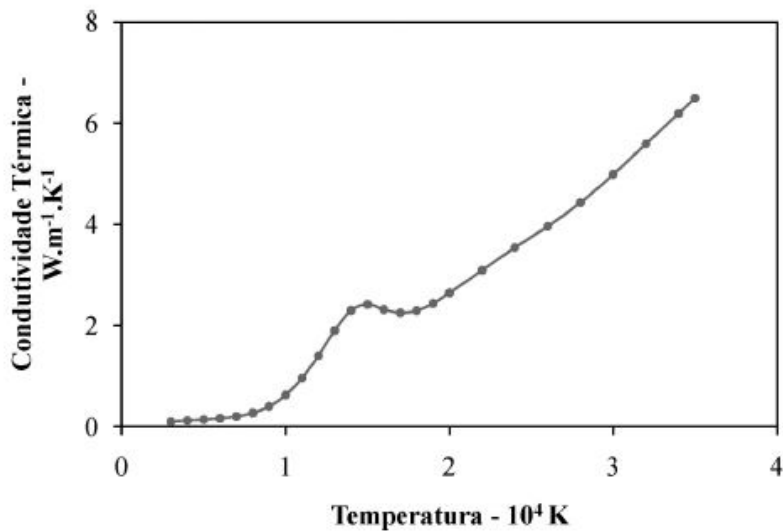
Fonte: ROTH, 1995

com a utilização de uma equação para a distribuição de temperatura, considerando as diferentes fontes de calor, trocas de calor, gradiente de temperaturas, dentre outros (LERMEN, 2011).

O presente trabalho, que é o desenvolvimento da modelagem computacional de uma tocha de plasma de acoplamento indutivo, irá fazer um estudo comparativo em que a tocha utiliza diferentes gases na descarga. Utilizar diferentes gases modifica consideravelmente o comportamento do plasma; já que, geralmente, os modelos matemáticos que descrevem a tocha de plasma são formulados por aproximações e simplificações que envolvem modelos de equações em dinâmica dos fluidos, transferência de calor, eletromagnetismo e magnetohidrodinâmica (LERMEN, 2011). Portanto, propriedades termodinâmicas, como densidade e calor específico, bem como coeficientes de transporte, a exemplo da condutividade térmica, elétrica, viscosidade, são de fundamental importância neste modelamento matemático, o que, de fato, modifica realmente o comportamento do plasma. No caso a se considerar, por exemplo, o fluxo de gás do plasma como um escoamento laminar, as equações da conservação de energia, massa e momentum dependem destes coeficientes citados que, conseqüentemente, dependem da temperatura. Logo, estas equações são todas acopladas e dependem fortemente da temperatura. Claro que, não somente, pois as equações modelo também

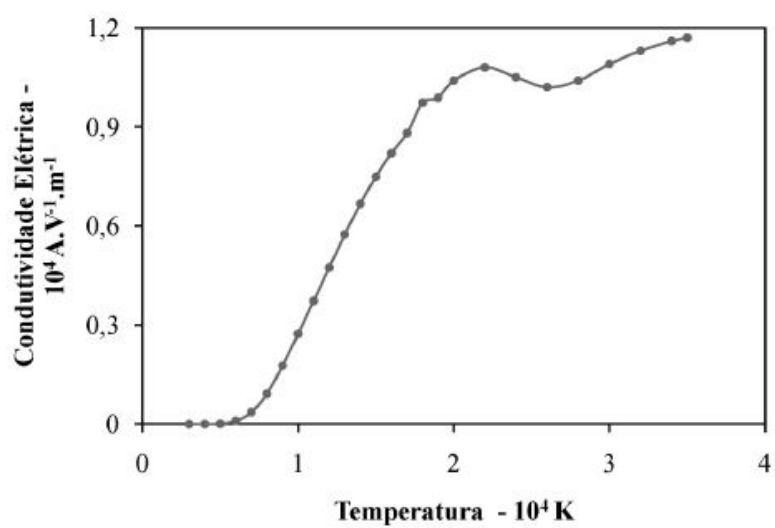
dependem das variáveis provenientes do eletromagnetismo. Para ilustrar a relação entre os coeficientes presentes nas equações modelo com a temperatura, temos a seguir um exemplo adaptado de (LANCASTER, 1986 apud LERMEN, 2011) que mostra as condutividades elétrica, térmica, a viscosidade e densidade de massa do gás argônio, em função da temperatura.

Figura 3 – Condutividade Térmica do Plasma



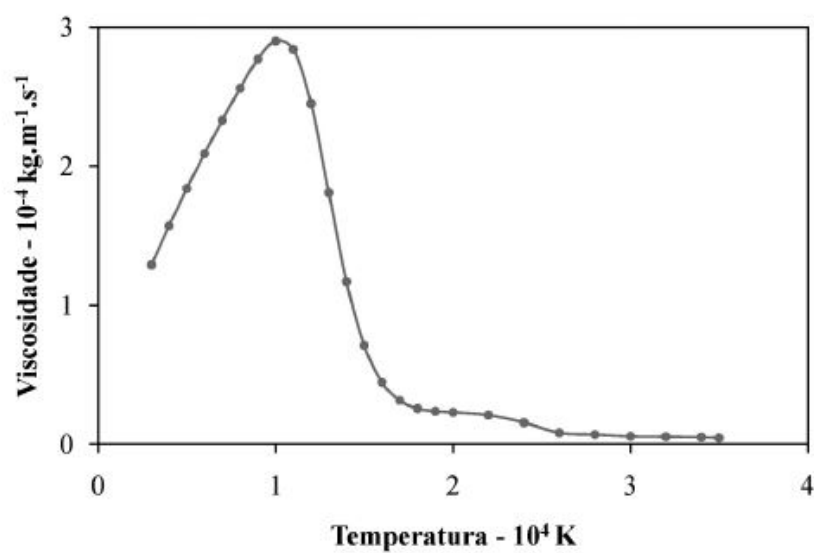
Fonte: LERMEN, 2011

Figura 4 – Condutividade Elétrica do Plasma



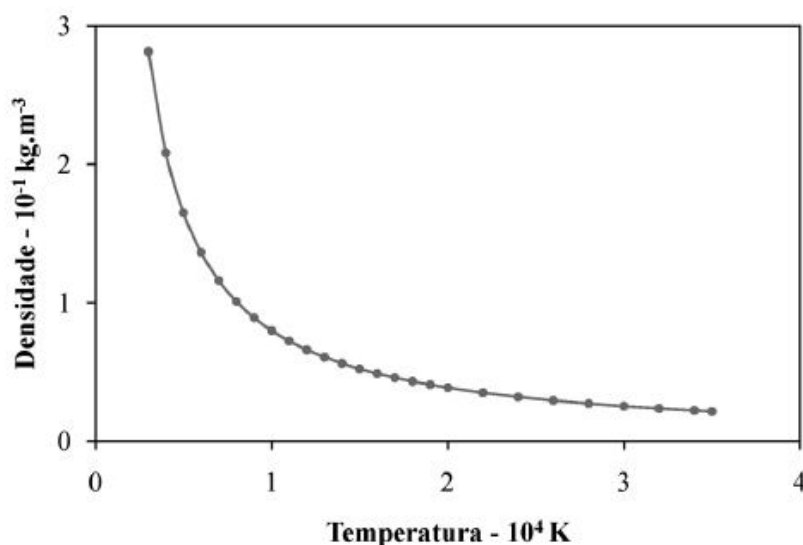
Fonte: LERMEN, 2011

Figura 5 – Viscosidade Elétrica do Plasma



Fonte: LERMEN, 2011

Figura 6 – Densidade demassa do Plasma



Fonte: LERMEN, 2011

A seguir, apresentaremos e definiremos o dispositivo denominado tocha de plasma, que será objeto de estudo deste trabalho. As principais características, tipos de tocha e modos de geração de plasma serão discutidos nesta seção.

2.2 Caracterização dos métodos para geração de Plasmas

As tochas de plasma são dispositivos em que a sua forma de construção e os equipamentos utilizados para tal finalidade dependem do modo de geração do plasma em questão, que podem ser tocha de plasma DC, tocha de acoplamento indutivo, catodo oco, entre outros (ISOLDI, 2012). Basicamente, em uma construção padrão, um gás de trabalho é aquecido por um arco elétrico, formando o jato de plasma, atingindo altas temperaturas. Parâmetros como geometria da tocha, refrigeração e fluxo de gás pode definir como se dá a expansão do jato de plasma, bem como sua estabilidade ou variações na potência da descarga (ROTH, 1995 apud ISOLDI, 2012).

Em se tratando da forma de aplicação de corrente elétrica nas tochas DC, que podem ser arcos diretos ou indiretos, as tochas podem ser classificadas em tochas de arco transferido e tochas de arco não transferido. Por exemplo, em um caso de arco não transferido, a tocha opera com catodo de tungstênio e anodo de cobre resfriado à água. O gás entra no corpo da tocha, percorre até a extremidade do catodo e sai do mesmo pelo anodo, e durante esse processo o gás passa pelo arco elétrico, gerando o plasma. A descarga ocorre entre o catodo e o anodo e a energia térmica é transferida

para um substrato pelo jato de plasma aquecido (ISOLDI, 2012). Já no caso do arco transferido, a descarga que ocorre entre o catodo e o anodo transfere calor diretamente para a peça de trabalho devido à passagem de corrente elétrica, ou seja, efeito joule. Neste caso, o catodo é usado como eletrodo emissor. Vale ressaltar que, por exemplo, as tochas de arco transferidos podem ser excitadas por fonte tanto AC quanto DC, sem que se ocasionem mudanças no processo, já que nos casos de frequência de 50 ou 60 Hz o período da frequência é muito maior que o tempo envolvido na maioria dos processos físicos no plasma, portanto, não há distinção nos casos de excitação DC ou AC no processo. Com frequências de excitação suficientemente elevadas, o período de oscilação torna-se comparável ao tempo envolvido nos processos físicos do plasma, que é o caso do plasma gerado por fonte RF (ISOLDI, 2012).

Para a transferência de energia ao gás para geração do plasma, as fontes de potência comumente utilizadas e descritas na literatura podem ser de corrente contínua, de rádio frequência ou micro-ondas. No caso das fontes de rádio frequência, elas podem interagir com o plasma com um acoplamento capacitivo ou um acoplamento indutivo. No caso de um acoplamento indutivo, temos que a geração do campo magnético resultante da passagem de corrente elétrica pela bobina interaja com o fluxo de gás, e o caso capacitivo, o processo se dá pelo campo elétrico resultante do capacitor envolvido. No caso da fonte de micro-ondas, temos que a elevação da frequência é responsável por essa interação. Independentemente do método, o grau de excitação dos campos elétrico ou magnéticos envolvidos dependem da frequência da fonte, da frequência de colisão dos elétrons com íons, determinando, assim, a condutividade elétrica e energia que é transferida no processo ao plasma (ISOLDI, 2012).

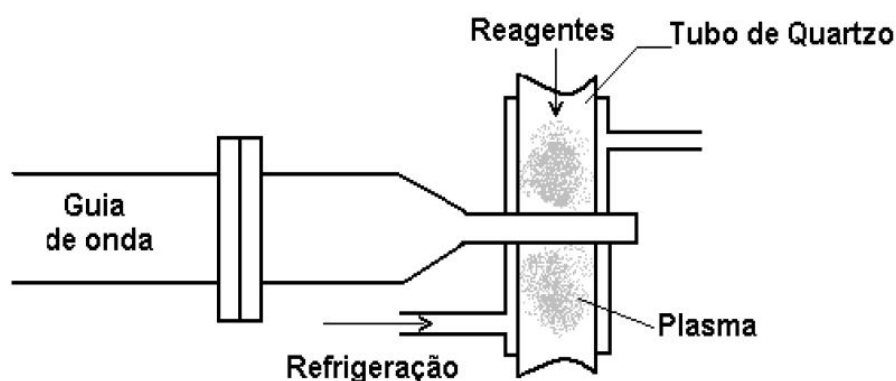
A seguir, iniciará-se uma pequena discussão acerca das formas de geração de plasma excitados por fonte RF (de acoplamento capacitivo ou indutivo) e plasma de micro-ondas. Uma maior ênfase será dada a tocha de plasma de acoplamento indutivo, por ser o tipo de tocha a ser modelada computacionalmente neste trabalho.

2.2.1 Plasmas de Micro-Ondas

O gerador de plasma de micro-ondas consiste-se basicamente de uma válvula de magnetron (como aquelas utilizadas em micro-ondas caseiros) que gera as micro-ondas, excitando uma cavidade ressonante (guia de ondas), gerando ondas estacionárias. Este guia é atravessado por um tubo de quartzo, onde no interior deste tubo é gerado o plasma em questão. (MIYAO et al., 2004). Eles apresentam maiores energias do que as obtidas com plasmas DC ou RF, por exemplo. Quanto a interação da onda eletromagnética de micro-ondas com o plasma, a mesma geralmente ocorre em regime coletivo, sem distinção entre elétrons e íons. Isso significa que a radiação interage com o plasma como que em um corpo dielétrico. Na imagem seguinte é mostrado um esquema

básico de geração de plasma por meio de micro-ondas.

Figura 7 – Plasmas de Micro-Ondas

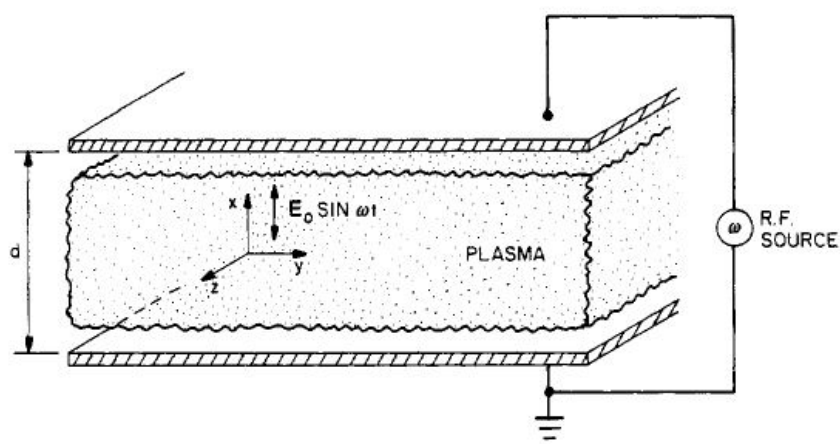


Fonte: ROTH, 1995

2.2.2 Reator de Plasma RF de Acoplamento Capacitivo

As tochas de plasma de acoplamento indutivo que serão discutidas na seção posterior utilizam uma alta corrente RF e o campo magnético gerado é responsável por transferir energia ao gás, formando o plasma. Os reatores de plasma RF capacitivos utilizados na indústria podem ser não são magnetizados e operam a uma frequência de 1 a 100 MHz. Eles se consistem em um grande capacitor de placas paralelas, acopladas a uma fonte RF, e o plasma será formado no interior das placas, como mostra a figura a seguir.

Figura 8 – Plasmas de Micro-Ondas



Fonte: ROTH, 1995

Os dois eletrodos paralelos e planos são conectados a uma fonte de tensão RF com uma frequência ω , dando origem a um campo elétrico uniforme na direção x e um campo magnético nulo em seu interior. Existe também a possibilidade de termos a mesma configuração da Figura 8, com o adicional de termos, além do campo elétrico variante no tempo, uma indução magnética constante, orientada na direção z .

Ao longo de um vetor de indução magnética, as propriedades do plasma são inalteradas das de um plasma não magnetizado, portanto, a orientação da indução magnética na mesma direção do campo elétrico oscilante. Orientando a indução magnética de forma paralela aos eletrodos, ou seja, na direção z , espera-se reduzir ainda mais a corrente verdadeira de íons e elétrons que fluem para os eletrodos e aumentar a significância das correntes de deslocamento no processo de geração e aquecimento do plasma (ROTH, 1995). Ainda segundo mesmo autor, tal efeito é desejável em uma diversidade de aplicações, pois as verdadeiras correntes de íons e elétrons podem introduzir impurezas no plasma através da pulverização catódica e erosão, além da pulverização catódica normalmente associada a descargas RF.

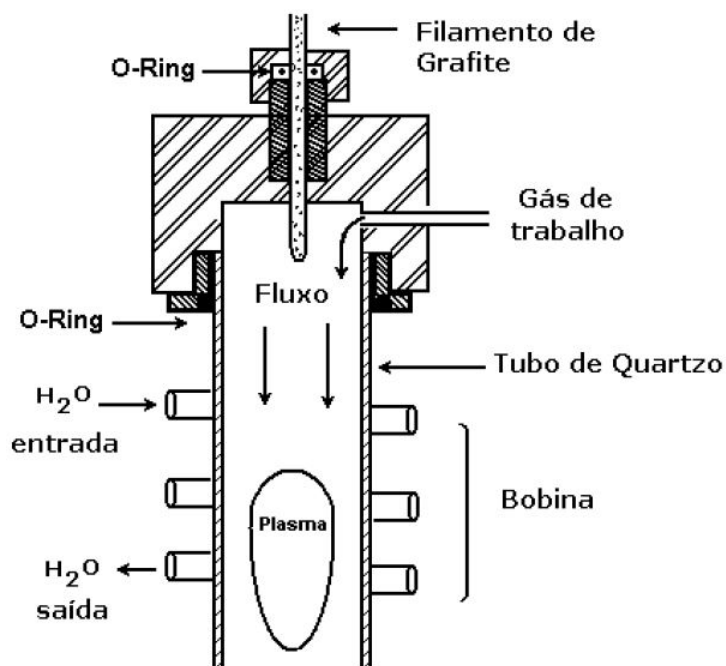
Os reatores capacitivos de placas paralelas muito provavelmente são os mais utilizados dentre os reatores capacitivos em aplicações industriais, tanto para fim de produção comercial quanto para fim de pesquisa e desenvolvimento (ROTH, 1995). Eles são usados, por exemplo, para estudos de química de superfície, deposição de filmes finos, para fabricação de componentes de microeletrônica, dentre outras importantes aplicações. Á seguir será apresentado em mais detalhes, como mencionado anteriormente, o funcionamento dos reatores a plasma de acoplamento indutivo, bem como a descrição detalhada da tocha de plasma de acoplamento indutivo.

2.2.3 Reator de Plasma RF de Acoplamento Indutivo

Nas seções anteriores foram apresentadas algumas formas de se gerar plasma, como o gerador de plasma com excitação DC, via micro-ondas ou com fonte de potência RF, podendo o reator apresentar acoplamento capacitivo, como já discutido na seção anterior, ou indutivo. Uma grande parte de aplicações industriais exigem algumas particularidades da fonte RF em relação à fonte DC. Nos geradores de plasma RF, a interação com o plasma dar-se-á via correntes de deslocamento, e não correntes verdadeiras, tornando possível a entrega de potência ao plasma sem a necessidade de eletrodos em contato com o mesmo. (ROTH, 1995). Isto se dá, pois, a presença de eletrodos e altas correntes elétricas em contato com o plasma é capaz de gerar impurezas, e isto pode ser prejudicial em processos em que a presença de impurezas não é desejável. O fato de não ser necessária a presença de eletrodos portadores de corrente em contato com o plasma tende a melhorar a própria vida útil dos reatores de plasma, melhorando a sua confiabilidade (ROTH, 1995).

Nos reatores a plasma de acoplamento indutivo, o plasma se inicia com a aplicação de um pulso de alta tensão e é mantido por uma potência RF aplicada à bobina que envolve o tubo que comporta o plasma. A entrega de potência da fonte RF ao plasma se dá por meio de correntes RF induzidas no plasma. Do ponto de vista elétrico, este reator terá um comportamento semelhante a um transformador (mais detalhes serão discutidos no próximo capítulo). A configuração básica de reatores deste tipo é mostrada na figura a seguir. Basicamente uma bobina de cobre com duas a oito voltas envolve um tubo geralmente feito de quartzo. No interior do tubo o plasma é gerado através das correntes induzidas no interior do mesmo, transferindo energia eletromagnética proveniente da corrente elétrica RF que circula na bobina, com o mesmo princípio do transformador. Geralmente as frequências da fonte variam de 10 KHz a 30 MHz e a pressão fica geralmente em torno da pressão atmosférica, variando geralmente de 1 torr a algumas centenas de torr, a depender da aplicação.

Figura 9 – Esquemático de uma Tocha de Plasma de Acoplamento Indutivo



Fonte: ISOLDI, 2013

Quanto à forma com que o campo magnético oscilante interage com o plasma para lhe fornecer potência, alguns parâmetros como frequência de oscilação do mesmo e frequência natural de plasma e de suas colisões determinam alguns outros parâmetros, como os citados Roth (1995): condutividade elétrica e frequência de transferência de energia ao plasma, por exemplo. Portanto, é importante entender a interação entre a onda eletromagnética e o plasma. A frequência natural de plasma é função da densidade

do número de elétrons:

$$\omega_{pe} = 2\pi\nu_{pe} = \sqrt{\frac{ne^2}{m\epsilon_0}} (\text{rad/s}) \quad (2)$$

Para compreender a equação 2, consideremos um caso de um plasma polarizado por duas placas paralelas, citado em (ROTH, 1995), mostrado na figura 10. A placa esquerda está aterrada e a direita conectada através de um interruptor de ação rápida, para um potencial $+V$. Quando o potencial V é desligado pela ação do interruptor, os elétrons, por serem mais leves que os íons, são atraídos para a placa esquerda e oscilarão entre a nuvem de íons positivos, que estão relativamente imóveis, até que este movimento oscilatório é amortecido por colisões. O objetivo agora é calcular a frequência desta oscilação, como mostrado. Considerando uma superfície de espessura dZ , com uma coordenada z normal à esta superfície, de origem na superfície do plasma, onde a carga superficial dos elétrons reside quando o plasma está polarizado, conforme mostra a figura 10. O campo elétrico está a apontar para a esquerda, neste caso, direção no qual uma carga de teste positiva se moveria. A densidade de carga superficial é dada por:

$$\sigma = neZ(C/m^2) \quad (3)$$

Portanto, o módulo do campo elétrico associado nesta superfície relaciona-se com a densidade de carga superficial da forma

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{neZ}{\epsilon_0} (V/m) \quad (4)$$

Este campo elétrico de polarização será igual e oposto ao campo elétrico aplicado. A equação de movimento de um elétron de massa m é dada por

$$m \frac{d^2 Z}{dt^2} = -eE = -\frac{ne^2 Z}{\epsilon_0} \quad (5)$$

O sinal negativo na equação se dá pelo fato de que a força em um elétron se dá em uma direção $-Z$. A equação acima pode ser escrita como:

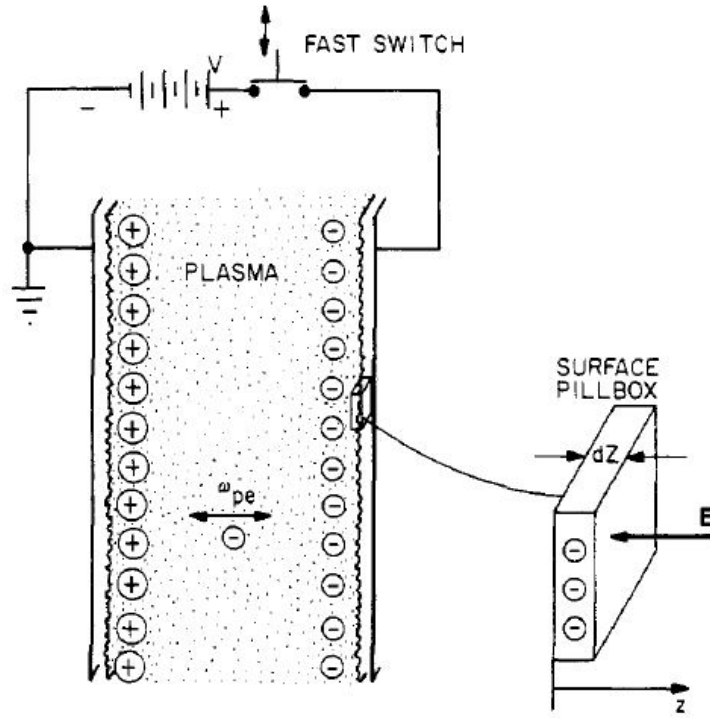
$$\frac{d^2 Z}{dt^2} = -\frac{ne^2}{m\epsilon_0} Z \quad (6)$$

A equação diferencial acima descreve um movimento harmônico simples, de frequência dada por:

$$\omega_{pe} = \left(\frac{ne^2}{m\epsilon_0} \right)^{1/2} (\text{rad/s}) \quad (7)$$

Que é o resultado dado em 2. Tal resultado é denominado frequência natural de plasma, a frequência com que os elétrons oscilam entre os íons mais pesados.

Figura 10 – Situação descrita para a dedução da equação 2.



Fonte: ROTH, 1995

Quando a frequência de radiação eletromagnética incidente está em um valor abaixo da frequência natural de plasma descrito por 7, a inércia dos elétrons será baixa o suficiente para que os mesmos respondam ao campo elétrico associado à onda eletromagnética incidente, e o elétron irá, portanto, absorver energia a partir dele, e essa energia, então, é convertida em calor por meio de colisões ou re-irradiada sob a forma de uma onda eletromagnética refletida a partir da superfície do plasma (ROTH, 1995). Acima desta frequência, a inércia do elétron será muito alta para permitir que ele responda completamente à onda eletromagnética incidente, sendo esta, portanto, livre para se propagar através do plasma como que em um meio dielétrico, no qual a interação da radiação eletromagnética com os elétrons se dará insignificante (ISOLDI, 2012).

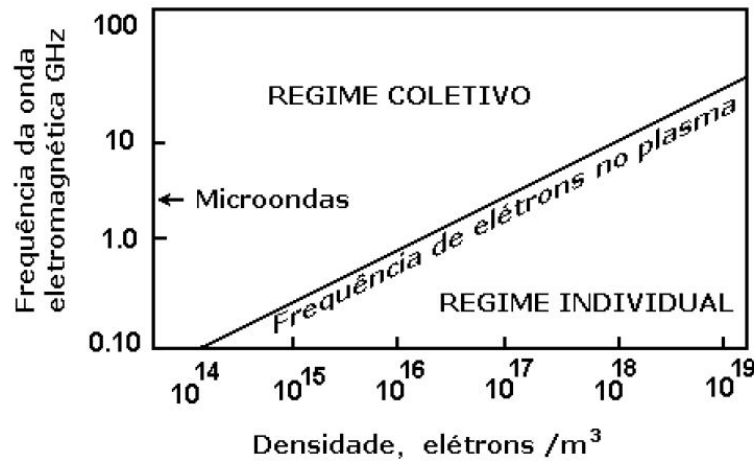
Roth (1995) traz a condição para que a frequência de radiação eletromagnética incidente seja menor que a frequência natural de plasma como sendo função apenas da densidade de número de elétrons $n_e m^{-3}$.

$$\nu_0 < \nu_{pe} = 8.890\sqrt{n_e}Hz \quad (8)$$

O número crítico para a densidade de número de elétrons, dada pelo mesmo autor, será dada por 9 e mostrado na figura 11.

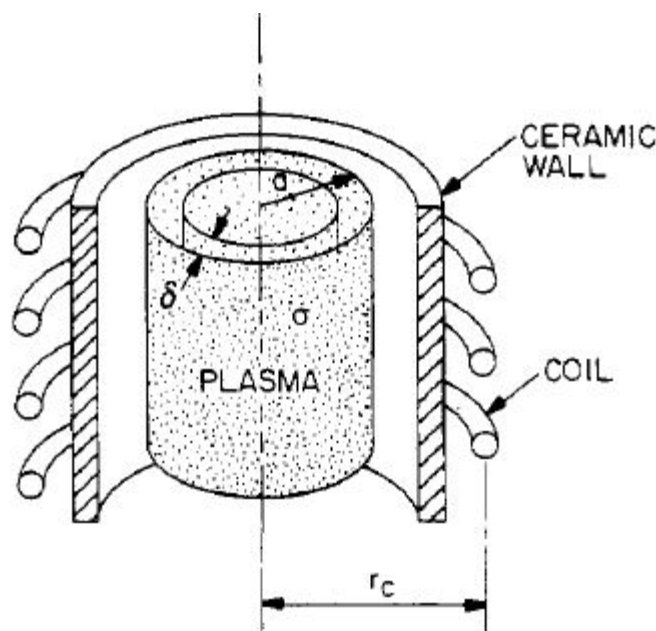
$$n_c = 1.2404 \times 10^{-2} \nu_0^2 \quad (9)$$

Figura 11 – Frequência da onda eletromagnética em função da densidade de elétrons



Fonte: ROTH *apud* ISOLDI, 2013

Quando o plasma está exposto a uma radiação RF com frequência menor que a frequência natural de plasma, a interação entre a energia RF ocorre em uma camada de interação superficial. Essa interação superficial é comumente denominada na literatura especializada como sendo *skin depth*, ou profundidade de atenuação. Essa interação superficial é mostrada na figura 12, que mostra um plasma cilíndrico de raio a , recebendo potência RF através da bobina de raio r_c .

Figura 12 – Plasma cilíndrico com condutividade elétrica σ , raio a , e *skin depth* δ , gerado através de um acoplamento indutivo

Fonte: ROTH *apud* ISOLDI, 2013

Induzindo uma densidade de corrente J na região do plasma com permissividade elétrica ϵ_0 , permeabilidade magnética μ_0 e condutividade σ , podemos determinar uma expressão para a profundidade de atenuação em função da frequência RF aplicada ω e da já citada condutividade elétrica do plasma μ como sendo

$$\delta \approx \sqrt{\frac{2}{\sigma\omega\mu_0}} \quad (10)$$

A profundidade de atenuação, segundo [Isoldi \(2012\)](#), é da ordem do comprimento de onda da frequência natural de plasma. Ainda segundo citação do autor, para densidades eletrônicas da ordem de 10^{15} a $10^{17} m^{-3}$, a profundidade de atenuação fica entre 3 e 30 *cm*, respectivamente.

Resumidamente, nos plasmas térmicos ocorrem um processo de transferência de energia via colisões entre os elétrons livres e partículas neutras. Devido à elevada pressão, há um número suficientemente grande de colisões que acaba por distribuir energia entre as partículas. Neste processo de transferência, podemos considerar em muitas aplicações de cunho industrial que a temperatura dos elétrons é próxima da dos íons - *LTE*, condição suficiente para que os plasmas alcancem elevadas temperaturas associadas e elevadas densidades de energia.

Nas próximas seções deste capítulo, serão abordados os aspectos matemáticos e computacionais utilizados como base para o desenvolvimento desta dissertação. Como já mencionado no início do capítulo, uma apresentação de conceitos físicos envolvidos na modelagem computacional da tocha, a saber: dinâmica dos fluidos, eletromagnetismo e magnetohidrodinâmica. Por fim, uma breve revisão do método numérico empregado pelo software utilizado para resolver as equações diferenciais parciais, o método dos elementos finitos, será apresentada, juntamente a uma breve descrição acerca do software.

3 Formulação matemática

Um problema de ciências ou engenharia, no geral, pode ser modelado por meio de equações modelo. Estas equações, em sua maioria das vezes, envolve o conceito de taxa de variação de uma variável em função de uma ou de várias outras variáveis. Geralmente o segundo caso, que envolve derivadas parciais e as chamadas equações diferenciais parciais são mais presentes até mesmo que as equações diferenciais ordinárias, que representam equações em que aparecem derivadas de uma função de uma variável, justamente pelo fato de os problemas da vida real aparecerem grandezas que variam em função de várias outras grandezas. Utilizando as relações de variáveis que representam algum fenômeno físico ou de engenharia e as chamadas leis da conservação - como por exemplo, a lei da conservação da massa, da energia, e do momentum, equações diferenciais parciais são utilizadas para representar este modelo. Um problema da vida real geralmente apresenta uma grande complexidade, pois os mesmos apresentam diversas variáveis, condições, o que tendem a dificultar totalmente o modelo, tornando-o, em sua maioria das vezes, impossível de se resolver de forma analítica. Daí entram os métodos numéricos: problemas que não têm solução analítica podem ser resolvidos por intermédio de métodos numéricos.

Devido à complexidade de um modelo real, geralmente um modelo com aproximações é admitido, gerando equações um pouco mais simples de se resolver, e equações que admitem uma solução exata ou uma solução numérica de proximidade razoável. A grande questão é: até que ponto a resposta exata (ou uma boa aproximação numérica) de um problema aproximado pode ser usado como resposta aproximada de um problema real? Isso depende de uma série de fatores, e geralmente o conhecimento massivo do problema a ser modelado em questão nos dará a resposta de quais simplificações podem ser feitas sem que o modelo perca a sua originalidade e sua razoabilidade na aproximação. Nas próximas sub-seções, serão apresentados as principais físicas e equações utilizadas pelo software de modelamento que, segundo a literatura especializada, conseguem apresentar uma boa resposta de um modelo aproximado de tochas de plasma, ou seja, apresentam uma resposta que pode ser usada como modelo aproximado do modelo real.

3.1 Dinâmica dos fluidos

Na tocha de plasma de acoplamento indutivo, um fluxo de gás é formado no interior do tubo, local onde será formado o plasma. Por conta de tal fluxo de gás, um modelo de escoamento de fluidos pode ser utilizado neste caso para determinar uma

aproximação para os campos de velocidade e pressão associados ao fluxo de gás na tocha de plasma.

Do ponto de vista geral, pode ser considerado como um fluido a matéria no estado líquido ou gasoso. Como já foi mencionado em seção anterior deste capítulo, basicamente o que irá diferenciar o estado gasoso do líquido em um fluido são a distância e a magnitude do movimento entre suas moléculas. Em se tratando da diferenças entre fluidos e sólidos, tem-se que corpos sólidos, que apresentam estrutura molecular coesa, suportam as chamadas *tensões de cisalhamento*. Os fluidos não são capazes de resistir a estas tensões, portanto, em resposta a estas tensões, um fluido irá deformar-se ou *escoar*. Em se tratando do escoamento do fluido, podemos classificá-los em dois tipos: os escoamento *laminares e turbulentos*. Fortuna (2102) define o escoamento laminar como aqueles em que camadas muito finas de fluido (lâminas) parecem deslizar uma sobre a outra, enquanto que o escoamento turbulento consiste-se em um movimento caótico de partículas de fluido individuais. O mesmo autor ainda enfatiza a questão de que laminar ou turbulento não são propriedades intrínsecas do fluido, mas sim ao estado em que o fluido se encontra devido às condições do escoamento. Portanto, o escoamento do fluido pode ser laminar ou turbulento. Em se tratando do caso do fluxo de gás na tocha de plasma, diversas publicações tratam esse escoamento no regime laminar. Escoamentos no regime turbulento também são mostrados na literatura. Como o regime laminar representa bem no caso a ser simulado nesta dissertação, consideraremos o regime como laminar neste contexto, e, portanto, a discussão tratada nessa subseção será exclusivamente sobre as equações modelo de escoamento de fluidos em regime laminar.

As equações que modelam o escoamento de fluidos são derivadas de leis de conservação da física. São elas:

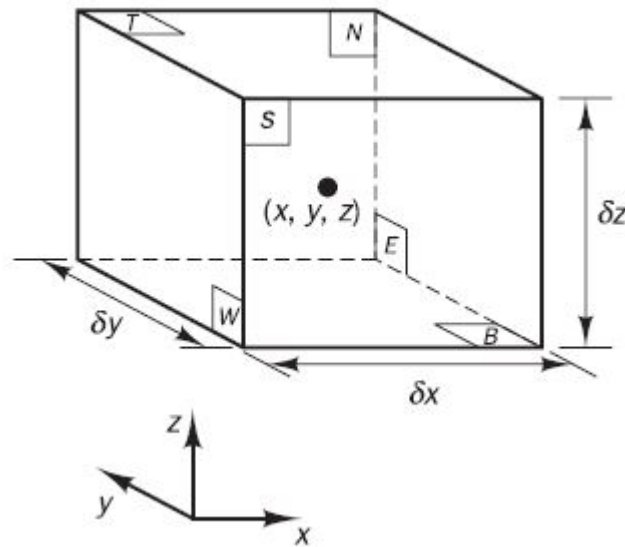
- A massa do fluido se conserva durante o escoamento;
- A taxa de variação do momentum é igual a soma das forças em uma partícula de um fluido (segunda lei de Newton);
- A taxa de variação da energia é igual a soma da taxa de adição de calor e a taxa de trabalho realizado em uma partícula de fluido (primeira lei da termodinâmica

Versteeg (2007) traz que, na maioria das aplicações práticas, o fluido é tratado como um *continuum*. Isso, segundo o autor, significa que, de um ponto de vista de escalas macroscópicas, a estrutura molecular da matéria e os movimentos moleculares são ignorados. A descrição do comportamento do escoamento do fluido é dada por propriedades macroscópicas, a saber: velocidade, pressão, densidade e temperatura, bem como

as suas taxas de variação espacial e temporais, que irão formar as Equações Diferenciais Parciais - EDP's - que modelam o fenômeno.

Todas as propriedades do fluido são dadas como função do tempo e espaço. Em um modelo tridimensional, por exemplo, temos que $\rho(x, y, z, t)$, $p(x, y, z, t)$, $T(x, y, z, t)$ e $\mathbf{u}(x, y, z, t)$ representam os campos escalares de densidade, pressão, temperatura e o campo vetorial de velocidades, respectivamente. Para evitar uma notação pesada, as deduções das equações apresentadas nessa subseção, todas adaptadas de (VERSTEEG, 2007) não irão explicitar a dependência espacial e temporal das propriedades do fluido. Logo, quando for citado, por exemplo, ρ , subentende-se a sua dependência pelo tempo e espaço. Portanto, consideremos um pequeno elemento de volume de fluido, mostrado na figura à seguir, de faces δx , δy , δz . Por ser um elemento muito pequeno, as propriedades deste fluido neste pequeno elemento volumétrico pode ser aproximado com uma boa acurácia considerando apenas os dois primeiros termos de uma expansão em série de Taylor.

Figura 13 – Pequeno volume de fluido



Fonte: VERSTEEG *et al*, 2007

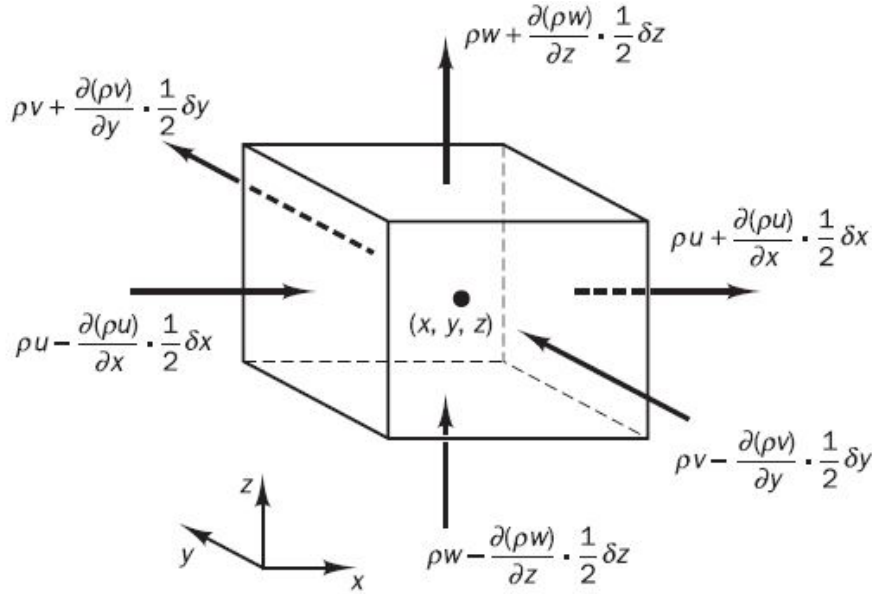
Para encontrarmos a primeira equação, que é a equação diferencial da continuidade, sendo $\dot{m}$ o fluxo de massa, temos que:

$$\dot{m}_{entra} - \dot{m}_{sai} = \frac{\partial}{\partial t} m_{elemento} \quad (11)$$

Pela figura à seguir, a taxa de fluxo de massa através da face do elemento de fluido, aplicado no ponto que dista $\frac{1}{2}\delta a$ do centro do elemento, sendo a a face em questão (x, y

ou z) é dado pelo produto da densidade, área e componente de velocidade normal à face em questão (kg/s).

Figura 14 – Fluxo de massa que entra e sai do elemento



Fonte: VERSTEEG *et al*, 2007

Fazendo-se o balanço de massa utilizando-se as taxas de fluxo de massa da figura 14, aplicando a equação 11, rearranjando os termos do lado esquerdo da equação e dividindo pelo elemento de volume $\delta x \delta y \delta z$ - considerando que $m = \rho \delta x \delta y \delta z$, o balanço de massa nos dá:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (12)$$

Sendo u, v e w as três componentes da velocidade, temos que $\mathbf{u} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$ e $\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}$. Considerando o escoamento incompressível - a massa específica não muda conforme segue a sua trajetória ($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, ρ constante), temos, finalmente a equação da continuidade para um escoamento incompressível:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (13)$$

Em se tratando da conservação do momentum, a segunda lei de Newton diz que a taxa de variação do momentum numa partícula de fluido é igual ao somatório das forças que agem na mesma. Utilizando a notação de derivada total¹, as taxas de aumento

¹Considerando uma propriedade de fluido ϕ , a derivada total ou substancial desta propriedade é dada por $\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi$. Note que u, v e w aparecem via regra da cadeia, onde são iguais, respectivamente às velocidades nas direções cartesianas $\frac{dx}{dt}$, $\frac{dy}{dt}$ e $\frac{dz}{dt}$.

do momentum nas direções x, y e z por unidade de volume são dadas, respectivamente, por:

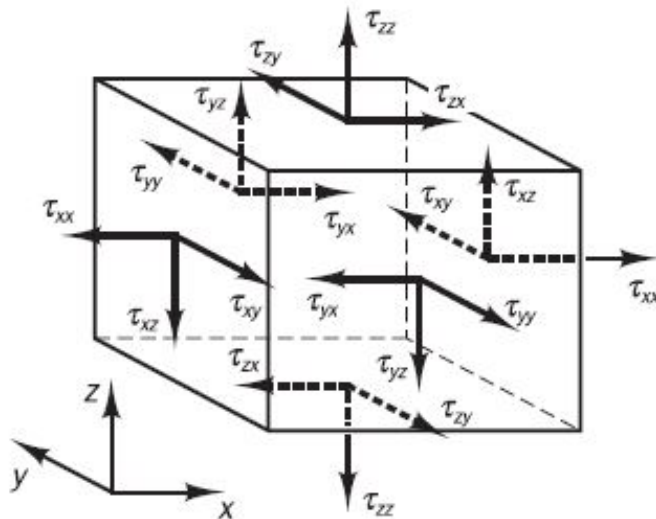
$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} \\ \rho \frac{Dv}{Dt} \\ \rho \frac{Dw}{Dt} \end{aligned} \quad (14)$$

Versteeg (2007) define dois tipos de força em uma partícula de fluido:

- Forças de superfície: Pressão, forças viscosas, força gravitacional;
- Forças de corpo: Força centrífuga, força eletromagnética.

O autor ainda define como prática comum a definição da separação dos termos de força de superfície da equação do momentum, incluindo os efeitos de força de corpo como termos fonte, aqui denotado por S_M . Quanto às forças de superfície, elas são caracterizadas em termo das forças de pressão ou forças compressivas, que são normais à superfície do volume de fluido, apontadas para o interior do volume, e em termos da força viscosa, esta definida por um *tensor*. Cada face do volume de fluido possui três componentes, dois tangenciais e um normal à superfície do fluido, como na figura à seguir.

Figura 15 – Forças viscosas agindo em um elemento de fluido



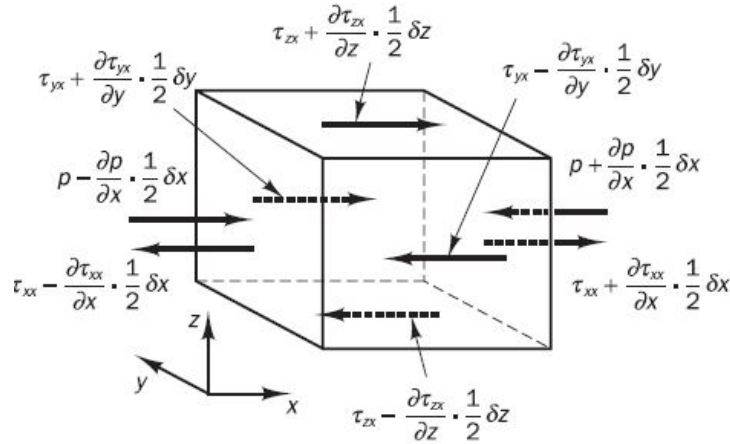
Fonte: VERSTEEG *et al*, 2007

Os componentes do tensor podem ser escritos em notação matricial:

$$\tau = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Considerando todas as forças que agem na direção x:

Figura 16 – Forças de superfície na direção x agindo no elemento de fluido



Fonte: VERSTEEG *et al*, 2007

Calculando a força líquida entre os pares de face adjacentes, ou seja, somando as forças da figura 16, encontraremos a componente x da equação do momentum, que será o resultado da equação de componente x em 14 igual a:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (16)$$

De maneira semelhante, pode-se deduzir as equações do momentum nas outras direções cartesianas. Em termos da derivada substancial ou total, utilizando a notação vetorial, embutindo-se as três componentes da equação vetorial:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_M \quad (17)$$

Em se tratando da equação da energia, ela é derivada da primeira lei da termodinâmica, que diz que a taxa de crescimento de energia no elemento de fluido será igual a soma da taxa líquida de calor adicionado ao elemento de fluido e a taxa líquida de trabalho realizado na mesma. Portanto, faz-se necessário definir o trabalho e a taxa de calor mencionados, para que se possa definir a taxa de crescimento de energia, dada em termos da derivada material, de forma semelhante à equação da quantidade de movimento². Em se tratando do trabalho realizado pelas forças, por exemplo, no eixo x,

²Matematicamente, $\rho \frac{DE}{Dt}$.

pode-se multiplicar as forças indicadas na figura 16 pela velocidade na direção dada. Neste caso, fazendo manipulações algébricas, teremos o trabalho líquido nesta direção dado por:

$$\left[\frac{\partial(u(-p + \tau_{xx}))}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} \right] \delta x \delta y \delta z \quad (18)$$

De forma análoga, podemos encontrar o trabalho líquido nas outras direções cartesianas. Somando as equações nas três direções, dividindo pelo elemento de volume e explicitando a pressão em termos de sua notação vetorial de divergente:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial u \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \right. \\ & \left. + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} + \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} \right] - \nabla \cdot p \mathbf{u} \end{aligned} \quad (19)$$

A próxima parcela para a equação da energia é a parcela relacionada à taxa líquida de calor adicionado ao elemento de fluido. A grandeza vetorial $\mathbf{q}$ têm suas componentes dadas pela figura 17. Com raciocínio análogo às equações desenvolvidas anteriormente, pode-se calcular a taxa líquida de calor, considerando o calor que entra e o calor que sai de cada face normal aos eixos cartesianos x , y e z , respectivamente:

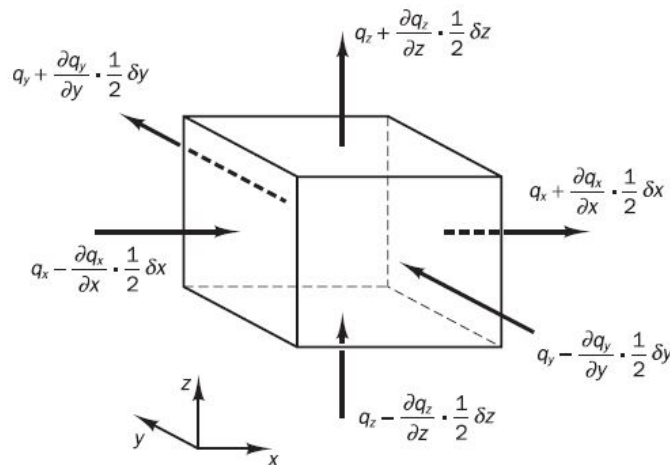
$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} = -\nabla \cdot \mathbf{q} \quad (20)$$

Lembrando a lei de Fourier, em que a condução de calor em dada direção a pode ser dada em termos do seu gradiente local $q_a = \frac{\partial T}{\partial a}$, esta expressão pode ser combinada com a expressão 20 e escrever na forma vetorial uma expressão para $\mathbf{q}$:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (21)$$

Finalmente, combinando as equações 19 e 21, teremos a equação da energia total, ou seja, bastando somá-las.

Figura 17 – Componentes do vetor de fluxo de calor $\mathbf{q}$ agindo no elemento de fluido.



[Fortuna \(2102\)](#) traz a classificação para fluidos *newtonianos* e *não newtonianos*. Tendo a tensão de cisalhamento em função da taxa de deformação de um fluido, quando a relação entre eles é linear, o fluido é dito como newtoniano, caso contrário, ele é dito como não newtoniano. O mesmo autor traz que escoamentos de muitos fluidos reais, como água e ar, são ditos como escoamentos de fluidos newtonianos. Como exemplos de escoamentos de fluidos não newtonianos, temos os polímeros, tintas e sangue. É sabido também da literatura que existem diversas formas de representar o tensor dado pela equação 15. [Versteeg \(2007\)](#) cita que em um fluido newtoniano as tensões viscosas são proporcionais às taxas de deformação do mesmo, com constante de proporcionalidade para fluidos compressíveis dado por μ e λ , representando a viscosidade dinâmica, relacionando tensões com deformações lineares, e a viscosidade por deformação volumétrica, respectivamente. Neste caso, os nove componentes de stress viscoso são:

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \tau_{yy} &= 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \tau_{zz} &= 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)\end{aligned}\quad (22)$$

Para gases, uma boa aproximação para a viscosidade λ é dada por $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ ([SCHLICHTING apud VERSTEEG et al, 2007](#)). Portanto, substituindo as expressões dadas por 22 nas equações do momentum, teremos as equações de *Navier-Stokes*, em homenagem aos cientistas Claude-Louis Navier (1827) e George Gabriel Stokes (1945)³:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + S_M \quad (23)$$

Interessante observarmos que, das equações de Navier-Stokes, fazendo $\mu = 0$ teremos um caso de um escoamento *invíscido* - sem viscosidade - que nos remete à equação de Euler (1755) e, desta, as bastante usadas em aplicações simples e práticas de engenharia, as equações de Bernoulli (1738).

³Aqui, apresentada a versão da equação de Navier Stokes em que a massa específica e a viscosidade do fluido são constantes. A maioria dos líquidos podem ser considerados como fluidos incompressíveis, enquanto que a maioria dos gases possui viscosidade aproximadamente constante. Para a versão completa das equações de Navier-Stokes, consultar detalhadamente em ([FORTUNA, 2102](#)) ou ([VERSTEEG, 2007](#)), bibliografias bases para o presente subcapítulo deste texto

Até este ponto, considerando as versões não vetoriais das equações acima deduzidas, adaptadas de [Versteeg \(2007\)](#), um sistema com cinco Equações Diferenciais Parciais e cinco incógnitas, sendo elas u, v, w, ρ e p .

3.2 Eletromagnetismo

Como já citado anteriormente, a modelagem computacional de um problema de plasma acoplado indutivamente em equilíbrio, mais necessariamente uma tocha de plasma de acoplamento indutivo, irá mesclar equações de dinâmica dos fluidos e eletromagnetismo, para formar as equações de magnetohidrodinâmica. As equações de dinâmica dos fluidos irão utilizar a suposição de escoamento laminar para o fluxo de gás, enquanto que as equações do eletromagnetismo irão fornecer a interação eletromagnética da corrente elétrica da potência RF aplicada na bobina. O campo eletromagnético gerado irá interagir com o fluxo de gás, fornecendo energia para que o mesmo possa se ionizar para o estado de plasma. Nesta subseção, então, serão discutidas as equações de *Maxwell* para o eletromagnetismo, que consiste basicamente em descrever a inter-relação entre campos elétricos e magnéticos. As deduções das equações nesta subseção foram adaptadas de ([SADIKU, 2012](#)).

A primeira das quatro equações de Maxwell, utilizada para a determinação de campos eletrostáticos, são derivadas da chamada lei de Gauss, que determina que o fluxo elétrico total Ψ ⁴ através de qualquer superfície fechada é igual à carga elétrica total envolvida na superfície. Matematicamente:

$$\Psi = Q_{envolv}$$

$$\Psi = \oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = Q_{envolv} = \int_v \rho_v dv$$

Aplicando o teorema da divergência na integral de superfície:

$$\oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = \int_v (\nabla \cdot \mathbf{D}) dv$$

As integrais de volume se cancelam, nos dando:

$$\rho_v = \nabla \cdot \mathbf{D} \quad (24)$$

Tal equação estabelece que a densidade volumétrica de cargas será igual à densidade do fluxo elétrico. Tal fato não é surpresa ao se evidenciar que a aplicação do teorema

⁴Aqui dado em termos da densidade de fluxo elétrico $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ como $\Psi = \oint_S \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S}$. A constante que relaciona a densidade de fluxo elétrico com o campo elétrico ϵ_0 é a constante de permissividade elétrica do espaço livre.

da divergência na integral de superfície consiste-se em dividi-la por um elemento infinitesimal de volume, quando o mesmo tende a zero. Como a integral de superfície dada é igual a própria carga, temos que neste resultado a carga está dividida pelo volume, o que nos dá uma densidade volumétrica de cargas.

Das quatro equações de Maxwell, duas delas que relacionam o fluxo magnético ou o campo magnético são derivadas de equações deduzidas para campos magnetostáticos. Como campos estáticos não têm uma natureza de aplicação prática, convém demonstrar as duas equações mencionadas para campos magnéticos estáticos e, depois, introduzir elementos nas mesmas para que possam satisfazer situações em que se apresentem campos magnéticos variáveis no tempo, que é o que ocorre na grande maioria das aplicações práticas em ciências e engenharia. De forma análoga à definição da densidade de fluxo elétrico, temos também a densidade de fluxo magnético dada por:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (25)$$

Onde o vetor $\mathbf{H}$ é o vetor do campo magnético, μ_0 é a constante de permeabilidade no espaço livre e $\mathbf{B}$ é a densidade de fluxo magnético. Portanto, também de forma análoga ao caso do fluxo elétrico, o fluxo magnético através de uma superfície S é dado por:

$$\Psi = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (26)$$

Diferentemente das linhas de campo eletrostático, as linhas de um campo magnético sempre se fecham sobre si mesmas, como mostra a figura 18, por conta de que não é possível existir um polo magnético isolado, ou cargas magnéticas isoladas (SADIKU, 2012). Um exemplo clássico deste fato é a tentativa de divisão de um ímã em duas partes. Indefinidamente, sempre ao ocorrer a divisão se formarão dois novos ímãs. Portanto, este fato enuncia que uma carga magnética isolada não existe. Em outras palavras, o fluxo magnético através de uma superfície fechada é sempre nula:

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (27)$$

Podemos aplicar o teorema da divergência na equação 27 para encontrar a segunda equação de Maxwell na forma diferencial, como é mais usual de se apresentar, até mesmo para a aplicação dos métodos numéricos. Aplicando o teorema:

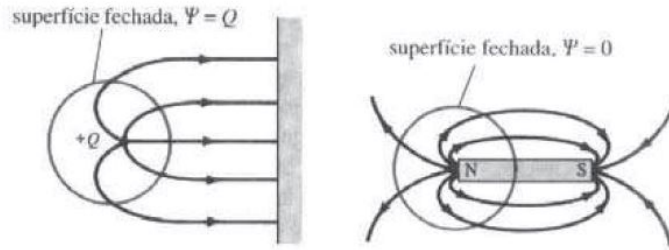
$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \int_v (\nabla \cdot \mathbf{B}) dv = 0$$

Cancelando-se as integrais de volume, por serem iguais:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (28)$$

Esta equação pode ser interpretada no sentido de que o campo magnetostático não tem fontes nem semidouros, sugerindo que as linhas de campo magnético são sempre contínuas (SADIKU, 2012).

Figura 18 – Demonstração do fluxo que sai de uma superfície fechada, para campos elétricos, à esquerda, e campos magnéticos, à direita.



Fonte: SADIKU, 2012

A próxima equação de Maxwell primeiramente é deduzida para campos magnetostáticos. Ao tentar aplicá-la para campos variantes no tempo, percebe-se a inconsistência matemática presente, daí dar-se-á a necessidade de se introduzir um novo elemento para que a equação possa fazer sentido. Esta equação em questão é derivada da lei circuital de Ampère, que estabelece que a integral de linha de uma componente tangencial do campo magnético $\mathbf{H}$ em torno de um caminho fechado é igual a corrente líquida envolvida pelo caminho. Matematicamente:

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = I_{envolv} \quad (29)$$

Aplicando o teorema de Stokes ao lado esquerdo da equação:

$$I_{envolv} = \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \int_S (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot d\mathbf{S}$$

A corrente elétrica envolvida pode ser escrita em termos da densidade superficial de corrente:

$$I_{envolv} = \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S}$$

Finalmente, ao se comparar estas integrais, teremos

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (30)$$

A inconsistência de se utilizar este resultado para campos magnéticos variantes no tempo é simples de se observar. A equação da continuidade da corrente, derivada do princípio da conservação da carga elétrica, é dada como segue:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (31)$$

Para correntes estacionárias, ou seja, invariantes no tempo, necessariamente $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ e $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Do cálculo vetorial, sabe-se que a divergência do rotacional de um campo vetorial é nula. Portanto, aplicando-se na equação 30:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = 0 = \nabla \cdot \mathbf{J}$$

O que é inconsistente com a equação 31, para correntes variantes no tempo. [Sadiku \(2012\)](#) introduz um novo termo na equação 30:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \mathbf{J}_d \quad (32)$$

Para determinar este novo termo, novamente é aplicada a divergência do rotacional:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{H}) = 0 = \nabla \cdot \mathbf{J} + \nabla \cdot \mathbf{J}_d$$

Compatibilizando com a equação da continuidade da corrente e utilizando o resultado para densidade de corrente da lei de Gauss 24:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_d = -\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \rho_v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\nabla \cdot \mathbf{D}) = \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}$$

Ou, em outras palavras:

$$\mathbf{J}_d = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (33)$$

Finalmente, substituindo 33 em 32:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (34)$$

Portanto, temos a terceira equação de Maxwell, baseada na lei circuital de Ampère, onde $\mathbf{J}_d$ é a densidade de corrente de deslocamento e $\mathbf{J}$ é a densidade de corrente de condução, dada por $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. A inserção deste termo na equação é de extrema importância para aplicações tecnológicas. Em baixas frequências, $\mathbf{J}_d$ é desprezível quando se comparado a $\mathbf{J}$. Entretanto, em frequência de rádio, os dois termos são comparáveis. Tal fato só pôde ter sido comprovado experimentalmente após o enunciado desta equação de Maxwell, pelo professor de física alemão Heinrich Rudolf Hertz, pois na época de Maxwell não existiam fontes de alta frequência. Hertz foi o primeiro cientista a gerar e detetar ondas de rádio. Portanto, baseada na variável $\mathbf{J}_d$, que é a densidade de corrente de deslocamento, podemos definir a corrente de deslocamento como sendo:

$$I_d = \int \mathbf{J}_d \cdot d\mathbf{S} = \int \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} \quad (35)$$

É interessante observar que temos a corrente de deslocamento como sendo função da densidade de fluxo elétrico variável no tempo. Utilizando como exemplo a tocha de plasma acoplada indutivamente e excitada por fonte RF, [Roth \(1995\)](#) traz que, quando a frequência aplicada na bobina torna-se elevada, o período de oscilação irá se equiparar

ao tempo com que os elétrons e os íons levam para atravessar a bainha entre o plasma e os eletrodos. Neste tipo de excitação, a fonte de potência RF interage quase que exclusivamente com o plasma devido à correntes de deslocamento. Portanto, tal fato condiz com a teoria proposta por Maxwell, que diz que as correntes de deslocamento irão aparecer somente em altas frequências.

Finalmente, para completar o conjunto das quatro equações que descrevem o eletromagnetismo, falta uma importantíssima equação, que é responsável por embasar toda a teoria por trás de máquinas elétricas, como transformadores e motores elétricos: a Lei de Faraday. Oersted descobriu experimentalmente que uma corrente elétrica contínua era capaz de interferir em um ponteiro de uma bússola, indicando que a corrente elétrica produziria um campo magnético que interagira com a bússola. Mais tarde, Michael Faraday descobriu que um campo magnético variável no tempo poderia produzir uma corrente elétrica. Um campo magnético estático não é capaz de produzir esta corrente, mas o campo magnético variável no tempo irá produzir uma força eletromotriz em um circuito fechado, *fem* esta que é denominada *tensão induzida*. Portanto, o enunciado de Faraday diz que a taxa de variação temporal do fluxo magnético irá produzir uma fem induzida. Matematicamente:

$$V_{fem} = -\frac{d\lambda}{dt} = -N \frac{d\Psi}{dt} \quad (36)$$

Onde aqui N é o número de espiras no circuito e Ψ é o fluxo magnético em cada espira. O sinal negativo indica que a tensão induzida se dá de forma a se opor à variação do fluxo magnético que a induziu, o que está de acordo com a lei de Lenz, que enuncia que o sentido da corrente elétrica induzida dar-se-á de forma que o campo magnético gerado por esta corrente irá se opor ao campo magnético do fluxo que a induziu. A lei de Faraday, que irá compor a quarta e última equação de Maxwell, irá propor a relação entre campos elétricos e magnéticos. Primeiramente, há de se definir qual a relação entre a tensão induzida V_{fem} com um suposto campo elétrico. Além de serem produzidos por cargas elétricas estáticas, os campos elétricos podem ser produzidos por fontes de fem. Por exemplo, considerando uma bateria, há um acúmulo de cargas em seu interior, que irá produzir um campo elétrico. Portanto, podemos escrever a equação 36 em termos de $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$, como sendo⁵:

$$V_{fem} = \oint_L \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (37)$$

Sadiku (2012) traz que a variação temporal do fluxo magnético pode ser interpretada de três formas:

- Espira estacionária e campo magnético variável;

⁵Aqui, considerando N=1

- Área da espira enlaçada pelo campo magnético variável e o próprio campo magnético estático⁶;
- Tanto a área quanto o campo variam no tempo.

Na primeira situação, a equação 37 se torna:

$$V_{fem} = \oint_L \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = - \int_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} \quad (38)$$

Esta fem é denominada fem dp transformador, pois é o mesmo princípio para a tensão induzida no enrolamento secundário de um transformador elétrico. Aplicando o teorema de Stokes na integral de linha da equação acima:

$$\int_S (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot d\mathbf{S} = - \int_S \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S}$$

Igualando as duas integrais de superfície:

$$\nabla \times \mathbf{E} = - \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (39)$$

Na situação em que a espira se movimenta em um campo estático, nos remetemos ao caso de motores e geradores elétricos de corrente contínua, vistos na figura 19. Quando uma carga elétrica se movimenta na presença de um campo magnético $\mathbf{B}$, a uma velocidade uniforme $\mathbf{u}$, temos a presença de uma força de natureza magnética dada por

$$\mathbf{F}_m = Q\mathbf{u} \times \mathbf{B} \quad (40)$$

Associado a um campo elétrico de movimento $\mathbf{E}_m$ da forma:

$$\mathbf{E}_m = \frac{\mathbf{F}_m}{Q} = \mathbf{u} \times \mathbf{B} \quad (41)$$

Logo, neste caso, a fem será:

$$V_{fem} = \oint_L \mathbf{E}_m \cdot d\mathbf{L} = \oint_L (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{l} \quad (42)$$

Quando se aplica o teorema de Stokes na equação 42, igualando as integrais de superfície que surgirem, teremos:

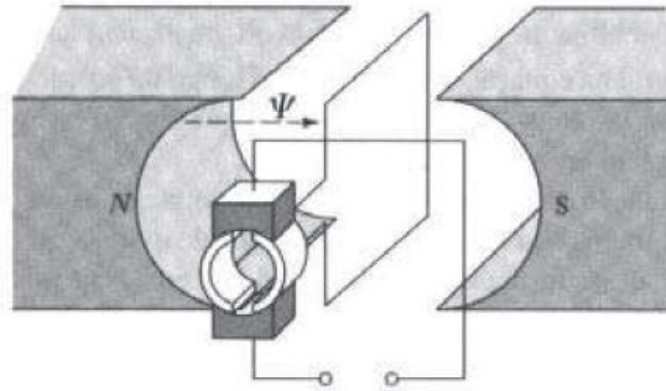
$$\nabla \times \mathbf{E}_m = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (43)$$

Uma combinação das duas situações, ou seja, quando campo e área da espira variam, teremos uma combinação das equações 38 e 43. Combinando-as, teremos:

$$\nabla \times \mathbf{E} = - \int_S \left[\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) \right] \cdot d\mathbf{l} \quad (44)$$

⁶Consiste-se, por exemplo, em mover uma espira dentro de um campo magnético estacionário.

Figura 19 – Caso em que a espira se movimenta em um campo magnético estático. Neste caso, dizemos que a área está variando. Isso equivale a dizer que a área da espira que é enlaçado pelo campo magnético irá variar.



Fonte: SADIKU, 2012

Em relação à última equação de Maxwell, qual forma utilizar irá depender da situação em questão, ou seja, quem estaria variando, o campo ou a área da espira condutora. Pelo fato de utilizarmos correntes alternadas, é usual a situação em que o campo está variando, portanto, a equação 39 é usualmente empregada na literatura como sendo a forma final da quarta equação de Maxwell, adaptada para campos magnéticos variantes no tempo.

Partindo de toda a teoria vista, deduzimos as quatro equações de Maxwell para o eletromagnetismo em sua forma final, aplicável à campos eletromagnéticos oscilantes no tempo. Pudemos observar que cargas estáticas geram campos eletrostáticos, cargas magnéticas ou correntes contínuas geram campos magnetostáticos e correntes alternadas geram campos magnéticos variáveis no tempo. Portanto, as quatro equação são as equações 24, 28, 34 e 39. Estas equações podem, agora, ser combinadas juntamente às equações para fluido dinâmica vistas na seção anterior para descrever o movimento de fluidos condutores de eletricidade, que é o caso dos plasmas. A próxima seção irá relacionar as equações de Navier Stokes com as equações de Maxwell.

3.3 MagnetoHidroDinâmica

Como descrito na subseção anterior, as equações de Maxwell, juntamente às equações de Navier-Stokes, da conservação da massa (ou continuidade) e da energia são capazes de modelar o comportamento de um plasma. Tais equações devem ser devidamente mescladas e manipuladas de forma a obtermos equações modelo que descrevem razoavelmente o problema a ser modelado. Por definição, a MagnetoHidroDinâmica (MHD) busca estudar as propriedades de transporte de partícula e energia

em fluidos condutores de eletricidade, bem como a evolução do campo magnético envolvido no processo. A sua teoria afirma que os campos magnéticos podem induzir correntes elétricas em um fluido condutor, criando aquecimento e movimento nesse fluido. Estes fenômenos irão interagir novamente com o campo magnético em questão, alterando-o.

O estudo da MHD teve início com o físico sueco Hannes Alfvén (1908 - 1995), cientista que fora agraciado com o Nobel de Física, em 1970, por suas descobertas em MHD e na física de plasmas. Portanto, antes de iniciarmos a discussão sobre as equações em MHD, convém enunciar o teorema de Alfvén, aqui adaptado por (RONCHI, 2013). A sua intenção é de se estudar a evolução do campo magnético, ou seja, como irá variar um fluxo magnético no tempo ao longo de uma superfície aberta que evolui no tempo. Assim, teremos em $t = 0$ um $S(t) = S_1$ e em $t = t + \Delta t$, $S(t + \Delta t) = S_2$. Considerando o fluxo magnético em função de t e do vetor posição $\mathbf{r}$:

$$\Psi(t) = \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S} \quad (45)$$

A taxa de variação temporal deste fluxo magnético será:

$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int_{S_2} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \cdot d\mathbf{S} - \int_{S_1} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{S} \right] \quad (46)$$

Expandindo $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ em termos de uma série de Taylor:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \Delta t + \dots \quad (47)$$

Substituindo 47 em 46, quando $\Delta t \rightarrow 0$, teremos:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\int_{S_2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} + \frac{1}{\Delta t} \left(\int_{S_2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} - \int_{S_1} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \right) \right] \quad (48)$$

Onde aqui omitimos a dependência de $\mathbf{B}$, pois neste ponto ele sempre está em função de $(\mathbf{r}, t)$. De acordo com a lei de Faraday, que é dada pela terceira equação de Maxwell na sua forma integral, a equação 37, e considerando que C_1 é o contorno que define a área S_1 , podemos escrever:

$$\int_{S_2} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \cdot d\mathbf{S} = \oint_{C_1} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} \quad (49)$$

Como o divergente do fluxo magnético é nulo, de acordo com a segunda equação de Maxwell apresentada neste texto, a equação 28, o fluxo total em uma superfície fechada deve ser também nulo. Isso permite escrever a diferença nos fluxos nas superfícies abertas da equação 48 como sendo:

$$\int_{S_2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} - \int_{S_1} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \oint_{C_1} \mathbf{B} \cdot [\mathbf{u} \Delta t \times d\mathbf{l}] \quad (50)$$

Então:

$$\begin{aligned}\frac{d\Psi}{dt} &= \oint_{C_1} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} + \oint_{C_1} \mathbf{B} \cdot [\mathbf{u} \times d\mathbf{l}] \\ \frac{d\Psi}{dt} &= \oint_{C_1} (\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{l}\end{aligned}\quad (51)$$

Onde aqui $\mathbf{u}$ é o campo de velocidades do fluido condutor de eletricidade em questão. Convém notar que tal resultado apresenta semelhança quanto à lei de Ohm generalizada:

$$\mathbf{J} = \sigma(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (52)$$

Se considerarmos o fluido como um condutor perfeito⁷, teremos que:

$$\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B} = 0 \quad (53)$$

O que nos dá, pela equação 51:

$$\frac{d\Psi}{dt} = 0 \quad (54)$$

Tal resultado, conforme observado por Ronchi (2013) mostra que as linhas de fluxo magnético em uma área qualquer do fluido se manterá constante ao longo do tempo, enquanto a mesma evolui espacialmente. Isso significa dizer que as linhas de campo estão fixas ao fluido, portanto o fluido irá se mover apenas perpendicularmente ao campo magnético. Este fenômeno também pode ser verificado ao se observar a seguinte equação:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{B}) + n_m \nabla^2 \mathbf{B} \quad (55)$$

Sendo n_m a viscosidade magnética, dada por $n_m = 1/\mu_0\sigma_0$, sendo estes a permeabilidade magnética e a condutividade elétrica, respectivamente. O primeiro termo do lado direito da igualdade é chamado de termo de fluxo do campo magnético, e o segundo termo é o termo de difusão. Sendo L algum comprimento característico para a variação dos parâmetros envolvidos, a razão entre o termo de fluxo e o termo de difusão é chamado de número magnético de Reynolds:

$$R_m = \frac{uL}{n_m} \quad (56)$$

Se $R_m \ll 1$, predomina o termo de difusão na equação 55. Já se $R_m \gg 1$, o termo de fluxo será dominante ao termo de difusão da referida equação. Esta equação também evidencia o que foi citado aqui anteriormente: Em plasmas de alta condutividade, as linhas de campo magnético se movem juntamente com o fluido. Esta condição é denominada na literatura como condição de "congelamento" das linhas de campo magnético.

⁷Idealmente, $\sigma \rightarrow \infty$ em um condutor perfeito. Considerando a lei de Ohm em sua forma pontual, para que a magnitude da densidade da corrente $j = \sigma E$ seja finita, temos que o módulo do campo elétrico $E \rightarrow 0$.

A primeira equação em MHD é exatamente a equação da conservação da massa, dada pela equação 12. Em regime estacionário, a taxa de variação temporal da densidade é nula. Considerando que o escoamento é compressível⁸, a equação 12 nos dá, para a MHD:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (57)$$

Enquanto que a equação da conservação da massa permanece inalterada, considerando um fluido condutor, a exemplo do plasma, é necessário que sejam efetuadas alterações, no sentido de inserção de termos e omissão de outros na equação da conservação do momentum. A equação 17 foi definida na subseção anterior, em uma formulação mais geral. Logo após algumas definições em relação ao tensor de stress viscoso, aos coeficientes de viscosidade e considerando um fluido Newtoniano, a equação foi modificada para nos fornecer as equações da Navier-Stokes, dado por 23. Em uma formulação ainda mais geral que a dada por 17, podemos definir um tensor total de stress $\hat{\mathbf{T}}$, que irá embutir as forças de superfície e as forças de corpo, definidas já na subseção anterior. Daí, escreveremos a equação da continuidade como sendo:

$$\frac{D(\rho \mathbf{u})}{Dt} = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{T}} \quad (58)$$

Uma redefinição do tensor total de stress irá acrescentar a contribuição da força de natureza magnética que irá interagir fluido. Note que essas forças poderiam aparecer embutidas no termo fonte S_M da equação 17. Para tal, é necessário que seja definida a *força de Lorentz* (SADIKU, 2012).

Sabe-se, ta eletrostática, que uma força elétrica $\mathbf{F}_e$ sobre uma carga elétrica Q imersa em um campo elétrico é dada pela fórmula experimental de Coulomb, como sendo

$$\mathbf{F}_e = Q\mathbf{E} \quad (59)$$

Onde, sendo Q positivo, os vetores força elétrica e campo elétrico terão a mesma orientação. Já uma carga em movimento pode experimentar uma força de natureza magnética. Considerando uma carga elétrica Q em movimento, com velocidade $\mathbf{u}$, teremos:

$$\mathbf{F}_m = Q\mathbf{u} \times \mathbf{B} \quad (60)$$

Ou seja, o vetor de densidade de fluxo magnético será normal ao vetor velocidade, devido ao produto vetorial envolvido na equação. A força total que irá agir em uma carga Q em movimento na presença de um campo elétrico e um campo magnético será a soma de 59 e 60:

$$\mathbf{F} = Q(\mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}) \quad (61)$$

⁸Neste contexto, para a simulação computacional utilizando o COMSOL, é considerado um escoamento compressível com $Ma < 0.3$

Esta é a força de Lorentz, em homenagem a Hendrik Lorentz. Note que essa expressão denota a força em função de uma carga Q . Para um conjunto de n partículas contidas em um volume ΔV , a expressão se tornará:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{\Delta V} \sum_k f_k = \frac{1}{\Delta V} \sum_{k=0}^n q_k (\mathbf{E} + \mathbf{u}_k \times \mathbf{B}) \quad (62)$$

Rearranjando os termos:

$$\mathbf{F} = \left(\frac{1}{\Delta V} \sum_k q_k \right) \mathbf{E} + \left(\frac{1}{\Delta V} \sum_{k=0}^n q_k \mathbf{u}_k \right) \times \mathbf{B} \quad (63)$$

Definindo os termos entre parênteses:

$$\mathbf{F} = \rho_e \mathbf{E} + \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (64)$$

Na dedução da lei de ohm generalizada, dada pela equação 53, uma observação foi feita em relação ao condutor perfeito. Considerando a lei de Ohm pontual, de magnitude $J = \sigma E$, foi mostrado que, considerando um condutor perfeito, quando a condutividade tende ao infinito, o campo elétrico deve tender a zero, para equilibrar a relação e tornar a densidade de corrente um valor finito. Ou seja, se $\sigma \rightarrow \infty$, $\mathbf{E} \rightarrow 0$ no interior do condutor. Logo, considerando um fluido condutor ideal, podemos simplificar 64 para:

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} \times \mathbf{B} \quad (65)$$

A força de Lorentz simplificada dada acima, usada em MHD ideal, será incorporada à equação da conservação do Momentum, dada pela formulação geral pela equação 58. Mais detalhes sobre o tensor de stress será discutido no próximo capítulo deste trabalho, que tratará sobre os procedimentos metodológicos. A equação da energia e a equação de indução em MHD, que é a modificação da equação 34, serão também apresentadas e reformuladas para o problema em questão no próximo capítulo.

Todo o embasamento físico e matemático para a compreensão deste trabalho foram apresentados nas seções anteriores. O entendimento das deduções das equações, bem como do comportamento do plasma à determinada excitação é importante, no sentido de apresentar, no próximo capítulo, as equações finais utilizadas no modelo de tocha apresentado posteriormente. Nas próximas duas seções, serão apresentados os métodos numéricos utilizados pelo software para discretizar e resolver as equações diferenciais parciais, bem como uma visão geral acerca desta ferramenta computacional, o *COMSOL Multiphysics*®.

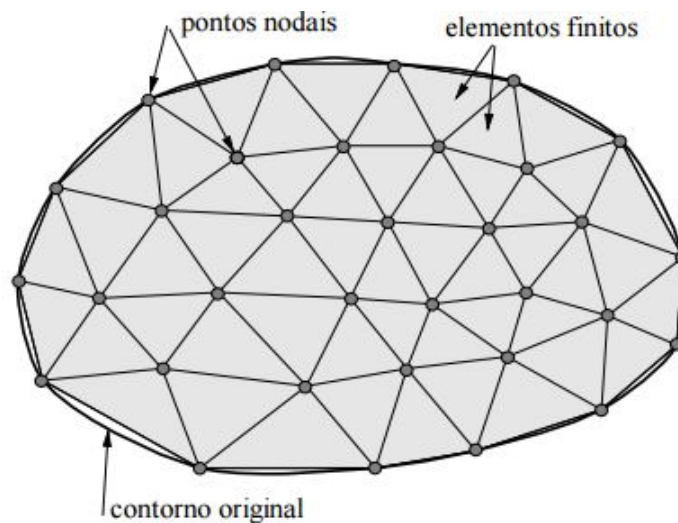
3.4 Métodos Numéricos: Método dos Elementos Finitos

Na seção posterior, iremos apresentar a ferramenta computacional utilizada para modelar a tocha de plasma. Tal ferramenta, como será visto, é baseada em métodos

numéricos avançados para a resolução de Equações Diferenciais Parciais (EDP) que descrevem os fenômenos físicos presentes nas bibliotecas de equações do software. Devido ao fato de o programa ser baseado quase que integralmente no método dos elementos finitos, convém apresentarmos uma revisão acerca do método numérico em questão, compreendendo assim como o mesmo é implementado no COMSOL para a resolução das equações. Para um melhor entendimento da implementação do mesmo, iremos apresentar as definições juntamente a um exemplo aplicativo relacionado a transferência de calor. A apresentação do método juntamente a um exemplo de aplicação torna mais fácil o entendimento por parte do leitor. O Método dos Elementos Finitos (MEF) se consiste em um método numérico que visa aproximar numericamente a análise de uma infinidade de fenômenos físicos que ocorrem em meios contínuos e que são descritos por equações diferenciais parciais, que são apresentadas juntamente à condições adequadas, que são as condições de contorno - o que denominamos problema de valor de contorno - e, em muitas vezes, às condições iniciais, para problemas variantes no tempo.

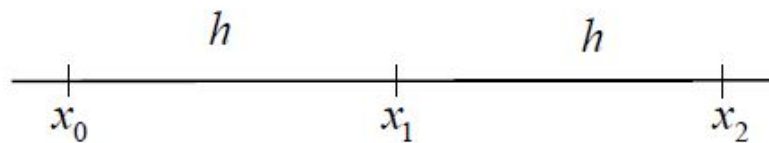
Sabemos que a solução analítica de problemas que envolvem derivação, integração, equações diferenciais ordinárias e parciais ou equações íntegro-diferenciais nos dá uma solução para um meio contínuo. Para uma solução numérica, qualquer um destes problemas deve ter o domínio discretizado. Então, basicamente, para obtermos a discretização de um meio contínuo, iremos subdividir a região em sub-regiões formadas por geometria simples (triângulos, quadriláteros, cúbicos, a depender se o problema é definido em uma região Bi ou Tri dimensional). A figura 20 mostra um exemplo de um meio contínuo bi-dimensional subdividido em regiões triangulares, onde tal divisão consiste-se na criação da *malha computacional*.

Figura 20 – Malha de elementos finitos para uma região com geometria 2D.



A nomenclatura dada ao método consiste-se, basicamente, em denominar os elementos formados pelas sub-regiões de elementos finitos justamente em contraste aos elementos infinitesimais do cálculo diferencial e integral, nomenclatura esta definida por Ray Clough, na década de 50 (SOUZA, 2003). Como se pode observar na figura 20, os vértices dos triângulos (neste caso, são triângulos) formados são chamados *pontos nodais*. Exatamente nestes pontos em que a solução será conhecida. Fazendo-se uma analogia simples, consideremos um caso unidimensional, dado pela figura 21. Aqui, o domínio linear é igualmente espaçado de h e a solução de uma Equação Diferencial Ordinária (EDO) nos dará um valor $y(x_n)$ para cada ponto de malha x_n . Para se encontrar a solução entre estes pontos, pode ser utilizada uma interpolação, para encontrar uma função analítica que passa por todos estes pontos.

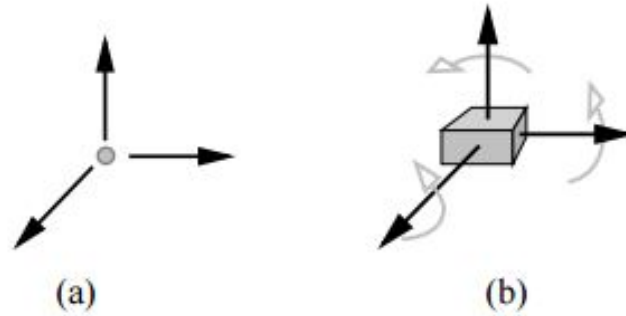
Figura 21 – Exemplo de malha 1D.



Fonte: Elaboração própria, 2017

Além do conceito de malhas de nós, definidos anteriormente, convém definir outro conceito importante, do ponto de vista do MEF. Trata-se do conceito de *graus de liberdade*, que, segundo Souza (2003), advém da ideia do movimento de partículas em problemas de mecânica. De acordo com tal conceito, um ponto no espaço 3D irá apresentar três graus de liberdade, relacionados a movimentos de translação, e um volume qualquer genérico irá apresentar no espaço 3D seis graus de liberdade, sendo três deles referentes à possíveis movimentos de translação e os outros três relacionados à movimentos de rotação, como podemos ver na figura 22. O comportamento do elemento obtido a partir da discretização é definido, então, pelo número de nós, tipo de malha (triangular, por exemplo, ou seja, a sua forma) e número de Graus de Liberdade (GDL). A apresentação do MEF aqui é adaptada de (SOUZA, 2003). O método será apresentado juntamente a um exemplo aplicativo de transferência de calor 2D.

Figura 22 – Representação dos graus de liberdade para um ponto e um pequeno volume, em uma geometria 3D.



Fonte: Souza, 2003

3.4.1 Formulação Forte de um problema

Consideremos, pois, um domínio Ω contínuo, de contorno Γ , dada em uma região 2D, mostrado em 23. Denominando uma função $Q(x, y)$ como taxa de geração de calor, fonte de calor por unidade de volume e tempo e $q_x(x, y)$ e $q_y(x, y)$ as componentes do fluxo de calor, dado por fluxo de calor por unidade de área e tempo, a equação governante do problema de condução de calor no domínio dado Ω é modelada por:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + Q = 0 \quad (66)$$

O vetor fluxo de calor, dado por $\mathbf{q}$ é função do gradiente de temperatura T . Sendo $\mathbf{k}$ o coeficiente de condutividade térmica, dado por:

$$\mathbf{k}(x, y) = \begin{bmatrix} k_{xx}(x, y) & k_{xy}(x, y) \\ k_{xy}(x, y) & k_{yy}(x, y) \end{bmatrix}$$

O fluxo de calor será:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \nabla T \quad (67)$$

Considerando um meio isotrópico e homogêneo, temos que $k_{xy} = 0$ e $k_{xx} = k_{yy} = k$. A matriz de condutividade térmica é reescrita:

$$\mathbf{k}(x, y) = \begin{bmatrix} k(x, y) & 0 \\ 0 & k(x, y) \end{bmatrix} = k(x, y) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = k(x, y) \mathbf{I}$$

Teremos:

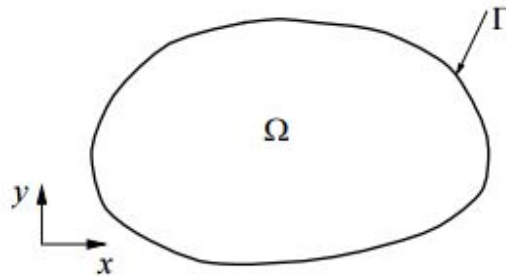
$$\nabla \cdot k \mathbf{I} \nabla T + Q = 0 \quad (68)$$

Note que, sendo $k \mathbf{I} = cte$ e considerando um problema sem fontes, teremos a Equação de Laplace:

$$\nabla^2 T = 0$$

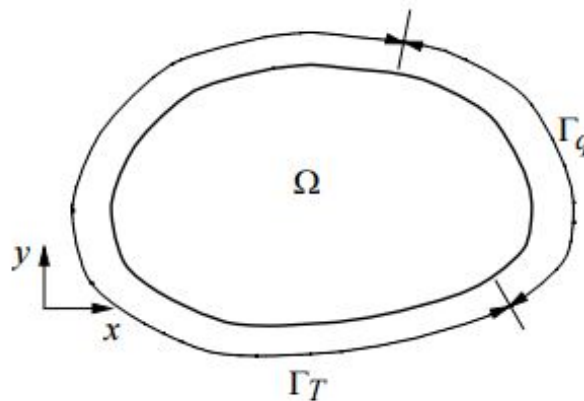
$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (69)$$

Figura 23 – Domínio 2D do exemplo aplicativo de condução de calor.



Fonte: Souza, 2003

Figura 24 – Domínio 2D do exemplo aplicativo de condução de calor.



Fonte: Souza, 2003

Quanto às condições de contorno, [Souza \(2003\)](#) traz que três tipos de condição de contorno diferentes podem ser aplicadas para o problema de condução de calor. Dentre eles, os dois principais são:

- Imposição de temperatura;
- Imposição de fluxo de calor.

Para isso, o autor divide o contorno em duas sub-regiões, como mostrado na figura [24](#). No primeiro tipo de condição de contorno, um valor de temperatura constante é determinado no contorno Γ_T , e no segundo tipo de condição de contorno mencionado,

o o fluxo de calor normal à região de contorno Γ_q . Assim, de forma geral, o problema de condução de calor bidimensional descrito em Ω é dado da seguinte forma:

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + Q = 0 \quad (70)$$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \nabla T \quad (71)$$

Com as condições de contorno:

$$\begin{cases} T = \bar{T} \\ -\mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}} = \bar{q}_n \end{cases} \quad (72)$$

As equações dadas por 70, 71 e 72 são chamadas *formulação forte* do problema. A solução do problema em sua formulação forte nos dá a solução no contínuo, ou seja, a solução $\forall(x, y)$ do meio. Para aplicação do MEF, convém apresentar as equações acima em sua *formulação fraca*.

3.4.2 Formulação Fraca de um problema

A formulação fraca do problema se faz necessária para se desenvolver a metodologia da resolução do problema via método dos elementos finitos. Iremos aqui, ainda adaptado de Souza (2003), obter a formulação fraca do problema proposto na subseção anterior, de transferência de calor. Primeiramente, multiplica-se a equação 70 por uma função arbitrária, aqui denominada $w(x, y)$. Utilizando uma notação menos carregada para as derivadas parciais, o resultado da multiplicação será:

$$w(x, y)(q_{xx} + q_{yy} - Q) = 0 \quad (73)$$

Após isso, integra-se a equação 73 sobre o domínio Ω :

$$\int_{\Omega} w(x, y)(q_{xx} + q_{yy} - Q) d\Omega = 0 \quad (74)$$

Multiplicando a função w pelas derivadas em q , utilizando a regra da derivada da produto, temos que:

$$\int_{\Omega} [(wq_x)_x + (wq_y)_y - w_xq_x - w_yq_y - wQ] d\Omega = 0 \quad (75)$$

Utilizamos, então, o teorema integral de Gaus, para substituir as integrais de superfície para obter integrais de linha, no contorno da região, em substituição a:

$$\int_{\Omega} [(wq_x)_x + (wq_y)_y] d\Omega = \int_{\Gamma} [(wq_x)\hat{n}_x + (wq_y)\hat{n}_y] d\Gamma = \int_{\Gamma} w\mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}}.d\Gamma \quad (76)$$

Substituindo a equação 76 em 75, teremos:

$$\int_{\Omega} w(q_{xx} + q_{yy} - Q) d\Omega = \int_{\Omega} [-w_xq_x - w_yq_y - wQ] d\Omega + \int_{\Gamma} w\mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}}.d\Gamma = 0 \quad (77)$$

Utilizando as condições de contorno dadas pela 72, lembrando que o fluxo de calor normal à superfície de contorno é conhecido, podemos reescrever o último termo da equação 77 como sendo:

$$\int_{\Gamma} w \mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}}.d\Gamma = \int_{\Gamma_T} w \mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}}.d\Gamma - \int_{\Gamma_q} w \bar{q}_n d\Gamma \quad (78)$$

O termo integral que contém $\mathbf{q}^T \hat{\mathbf{n}}$ não é conhecido na região de contorno dada pela integral. Isto pode ser eliminado adicionando uma condição de restrição à função w , fazendo com que a mesma seja nula na região de contorno Γ_T , anulando o termo correspondente na integral acima. Fazendo-se então as substituições de 78 e 77 em 76, reescrevendo o fluxo de calor $\mathbf{q}$ em termos da temperatura T , teremos:

$$\int_{\Omega} (\nabla w)^T \mathbf{k} (\nabla T) d\Omega = \int_{\Omega} w Q. d\Omega + \int_{\Gamma_q} w \bar{q}_n d\Gamma \quad (79)$$

A formulação integral proposta acima é utilizada pra o desenvolvimento do MEF. Através da aplicação do método, a EDP que governa o problema é dado por:

$$\mathbf{KT} = \mathbf{F} \quad (80)$$

Onde, neste caso, $\mathbf{K}$ será a matriz de condutividade do problema, denominada na literatura como matriz de rigidez, e $\mathbf{F}$ será um vetor que representaria fontes de calor nos nós da malha, na literatura denominado de vetor de forças. O vetor $\mathbf{T}$ é o vetor de incógnitas, que no caso é um vetor de temperaturas. Essas incógnitas estão associadas aos nós da malha computacional. No caso de uma malha com elementos finitos triangulares lineares, para cada triângulo teremos três nós, associados aos seus vértices. No problema ilustrativo de condução de calor, cada nó possui um grau de liberdade, e cada grau de liberdade está associado a um valor de temperatura. Portanto, um triângulo possuirá três vértices, três graus de liberdade e três valores de temperatura associados. No problema bi-dimensional em questão, por exemplo, a temperatura será dada nos vértices em função das coordenadas cartesianas x e y . A figura 20 exemplificou o processo da geração da malha computacional através dos triângulos. Valores de temperatura intermediários a estes triângulos podem ser obtidos por meio de interpolação polinomial.

O MEF de Galerkin pode ser obtido por meio de um estudo global ou local (AVILA, 2010). Em um estudo local ou elementar, trabalha-se com um elemento qualquer do domínio dado. Por exemplo, um elemento arbitrário e tem sua temperatura dada nos nós n_1 , n_2 e n_3 como uma função linear das coordenadas (x, y) , como mostra a figura 25. Aqui, no caso do exemplo dado, o campo de temperaturas é calculado nos nós dados pelos vértices do triângulo. Sendo T a solução exata do problema, definimos a solução elementar T^e como sendo:

$$T^e(x, y) = \sum_{i=1}^3 T_i^e N_i(x, y) \quad (81)$$

Onde as bases locais lineares em cada elemento serão:

$$\begin{aligned} N_1(x, y) &= \frac{1}{2A^e} [(x_2y_3 - x_3y_2) + (y_2 - y_3)x(x_3 - x_2)y] \\ N_2(x, y) &= \frac{1}{2A^e} [(x_3y_1 - x_1y_3) + (y_3 - y_1)x(x_1 - x_3)y] \\ N_3(x, y) &= \frac{1}{2A^e} [(x_1y_2 - x_2y_1) + (y_1 - y_2)x(x_2 - x_1)y] \end{aligned} \quad (82)$$

Sendo A^e a área de cada elemento e . Portanto, a determinação do campo de temperaturas pode ser dado por:

$$T(x, y) = \mathbf{N}(x, y)\mathbf{T}^e \quad (83)$$

De forma análoga ao campo de temperaturas $T(x, y)$, a função teste dada $w(x, y)$ também pode ser interpolada linearmente no interior de cada elemento. Utilizando a mesma matriz das funções de forma:

$$w(x, y) = \mathbf{N}(x, y)\mathbf{w}^e \quad (84)$$

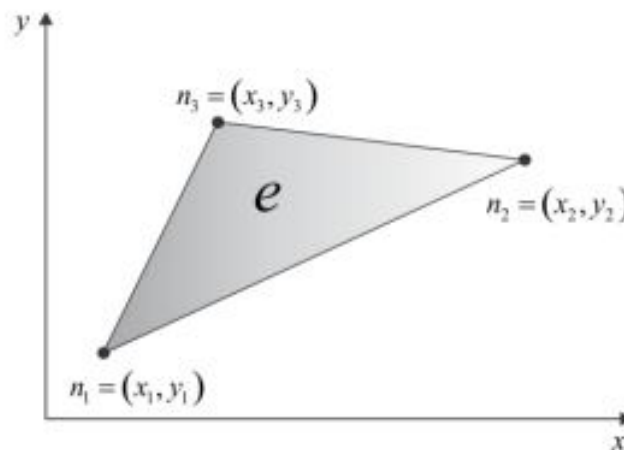
As relações dadas por 83 e 84 podem ser utilizadas também para determinar os gradientes dados pela formulação 79. Por exemplo, para o campo de temperaturas:

$$\nabla T(x, y) = \nabla \mathbf{N}(x, y)\mathbf{T}^e = \mathbf{B}(x, y)\mathbf{T}^e$$

$$\mathbf{B}(x, y) = \begin{bmatrix} k(x, y) & 0 \\ 0 & k(x, y) \end{bmatrix} = k(x, y) \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial N_2(x, y)}{\partial x} & \frac{\partial N_3(x, y)}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1(x, y)}{\partial y} & \frac{\partial N_2(x, y)}{\partial y} & \frac{\partial N_3(x, y)}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (85)$$

Tais relações, ao serem substituídas em 79, considerando o domínio como sendo o triângulo elementar, resultará em um problema de resolver um sistema linear que fora dado por 80.

Figura 25 – Elemento arbitrário e e as coordenadas dos nós.



Na próxima seção, iremos descrever a ferramenta computacional a ser utilizada, que têm o método numérico apresentado nessa seção como base para a resolução das EDP'S envolvidas no problema.

4 Ferramenta Computacional: COMSOL Multiphysics[®]

A ferramenta computacional escolhida para a resolução das equações modelo da tocha de plasma via acoplamento indutivo foi o software COMSOL Multiphysics[®]. O COMSOL é uma plataforma de software multipropósito baseada em métodos numéricos avançados para modelar e simular problemas baseados em física. Aqui, veremos uma descrição em linhas gerais acerca dessa ferramenta computacional. A maioria das informações apresentadas neste capítulo foram extraídas da documentação do software, bem como do seu endereço na Web ([COMSOL MULTYPHYSICS, 2017](http://www.comsol.com/multiphysics)).

A empresa foi fundada pelo Dr. Svante Littmarck e Mr. Farhad Saeidi, no ano de 1986. Mas, só mais tarde, em 1998, que fora lançado a primeira versão do principal produto da empresa, que é o software em questão. Como enunciado, o software é uma poderosa ferramenta interativa para o desenvolvimento de modelagens de problemas físicos, científicos e de engenharia de todos os tipos. O software conta com uma numerosa biblioteca de equações, separadas pelo que o mesmo denomina físicas. Cada física possui um conjunto de equações, e aqui há também problemas que podem ser resolvidos integrando-se várias físicas, formando um problema multifísico. Por exemplo, no contexto deste trabalho, a modelagem de tochas de plasma, como já mencionado diversas vezes no escopo deste texto, acopla equações para fluidos e para eletromagnetismo, exemplificando um caso de um problema multifísico resolvido pelo COMSOL. Em se tratando das bibliotecas de equações, separadas por físicas ou áreas de conhecimento, as versões mais recentes do software possuem as seguintes interfaces ou módulos:

- Acústico
- Biociência
- Reações Químicas
- Corrosão
- Difusão
- Eletroquímica
- Eletromagnetismo
- Dinâmica dos Fluidos
- Geofísica
- Transferência de Calor

- Sistemas Micro Eletro Mecânicos
- Engenharia de Microondas
- Ótica
- Física de Plasmas
- Escoamento em Meios Porosos
- Mecânica Estrutural
- Dispositivos Semicondutores
- Propagação de Ondas

Dentre outros¹. O grande trunfo do programa, como mencionado, é a possibilidade de modelar problemas multifísicos. É sabido que no mundo real os problemas tendem a acoplar diversas áreas do conhecimento. Tal possibilidade de modelar numericamente dá uma margem a possibilidade de modelar um maior número de problemas que outros pacotes de equações disponíveis não teriam.

De forma geral, ao se escolher a física ou as físicas a serem utilizadas, o usuário automaticamente seleciona quais equações irá trabalhar. Também é possível configurar o tipo de estudo. Se escolhida a opção de estudo estacionário, por exemplo, as equações relacionadas às físicas selecionadas não terão a dependência do tempo, por exemplo. As equações podem também ser resolvidas no domínio do tempo ou no domínio da frequência. O software possui extensão para softwares de CAD, onde o mesmo pode ler arquivos de formatos próprios para estes softwares, como também existe uma janela de CAD, onde o usuário poderá escolher qual tipo de geometria irá utilizar - se 1D, 2D, 2D com simetria ou 3D - e, com as ferramentas de desenho, geometrias das mais simples às mais complexas podem ser criadas. O programa consta também com uma extensa lista de materiais, onde todos os materiais cadastrados possuem todas as propriedades térmicas, elétricas, mecânicas, com valores previamente definidos. Após a definição de uma geometria, cada domínio da mesma pode ser definida a um tipo de material, e as propriedades deste material já pré cadastradas comporão as equações modelo.

Após definida a geometria, o programa também conta com um assistente para a geração da malha computacional. Existem ferramentas para a criação de malhas automáticas e semiautomáticas, como por exemplo malhas tetraédricas livres e malha varrida. Por padrão, ele possui um algoritmo para a criação de malha tetraédrica automática para físicas definidas em geometrias de sólidos, e uma malha tetraédrica e de camada limite para fluidos. O usuário, se assim escolher, pode assumir controle

¹Para verificar lista completa, consultar documentação no site da companhia.

na sequência de criação das malhas, podendo optar por uma mistura de elementos tetraédricos, prismáticos ou hexaédricos. As malhas são adaptativas.

Em se tratando das equações, simplificações podem ser definidas durante a configuração do modelo. As condições iniciais e de contorno também podem ser definidas, tornando possível a resolução das Equações Diferenciais Parciais. Quanto aos métodos numéricos programados no COMSOL, ele utiliza vários métodos diferentes, como: método dos elementos finitos, método dos volumes finitos, métodos de elementos de contorno, método de rastreamento de partículas. Por *default*, o COMSOL vem programado a utilizar o método dos elementos finitos. De acordo com a documentação do software, métodos via elementos finitos totalmente acoplados são gerados automaticamente pelo software no momento da resolução, sendo este método patenteado de gerar elementos finitos dinamicamente o responsável pelas combinações multifísicas possíveis de se implementar ao se utilizar dessa ferramenta computacional.

O pós processamento do COMSOL segue a mesma linha das outras funcionalidades: funcionalidades relativamente fáceis de se configurar, devido à interface gráfica amigável. Os resultados podem ser visualizados em escalas de cores, que podem ser pré definidas pelo usuário. Para geometrias 3D, cortes podem ser feitos para fornecer o perfil de determinada distribuição de uma variável em um plano pertencente ao domínio. A possibilidade de cortes 1D em geometrias 2D, por exemplo, para fornecer o gráfico da função da variável calculada em função do arco definido pelo usuário é também interessantíssima, do ponto de vista de análise de resultados. Nesta ocasião, um contorno pode ser selecionado e a distribuição da variável é mostrada em função do comprimento deste arco definido, na forma de um gráfico unidimensional. Durante a execução do método numérico, inclusive, é mostrado um *log*, onde graficamente também é mostrado o número de iterações, informações sobre a convergência do método, dentre outros parâmetros importantes.

O presente capítulo apresentou uma ferramenta computacional já consolidada para modelagem computacional, ferramenta esta que, inclusive, forneceu diversas publicações em trabalhos de diversas áreas do conhecimento. Portanto, após a descrição da formulação física, matemática e computacional do problema a ser modelado, apresentaremos no próximo capítulo os procedimentos metodológicos adotados para a definição do modelo de tocha de plasma de acoplamento indutivo.

5 Procedimentos Metodológicos

O presente capítulo irá abordar os procedimentos metodológicos utilizados para modelar e simular a tocha de plasma. Primeiramente, uma pequena revisão irá apresentar alguns exemplos de trabalhos na literatura que se propuseram a escolher e modelar uma tocha de plasma acoplada indutivamente. Dentre estes exemplos, teremos exemplos de tochas modeladas com o COMSOL e outras modeladas com outros pacotes de software. A apresentação de exemplos de trabalhos modelados irá nortear todas as escolhas feitas aqui - do modelo de tocha escolhido à simplificações na geometria e nas equações, bem como justificar os parâmetros de tocha alterados e suas comparações de resultados, apresentados no próximo capítulo. Em seguida, a tocha escolhida será apresentada, onde será definida a sua geometria e a geração da malha computacional para a aplicação do método dos elementos finitos. No entanto, antes da apresentação da geração da malha, convém apresentar as físicas envolvidas e suas equações, aqui já adaptadas as equações apresentadas no capítulo 2 otimizadas para aplicação no COMSOL, ou seja, da forma em que as mesmas são programadas no software. As condições de contorno utilizadas serão definidas. Após todas as definições, serão propostas modificações da geometria da tocha e do gás de trabalho, a fim de observar como a mudança nestes parâmetros podem alterar os resultados da simulação, em se tratando do campo de temperaturas e o campo de velocidades do gás de trabalho.

5.1 Introdução

A fim de situar em que contexto este trabalho se apresenta na literatura, convém apresentar alguns exemplos de trabalhos publicados em que a modelagem de tocha de plasma de acoplamento indutivo foi o tema central. As tochas de plasma de acoplamento indutivo, excitadas por uma fonte RF, são fontes limpas de alta energia que possuem um imenso número de aplicações industriais.

Como citado anteriormente, existem diversas metodologias para geração de plasmas, e a escolha de qual método de geração irá depender, por muitas vezes, de qual processo irá utilizar o plasma gerado. Roth (1995) mencionam, por exemplo, o fato de a tocha de plasma DC fornecer energia ao plasma através de correntes de condução, sendo necessário o uso de eletrodos. O uso de tochas de plasma excitadas por RF dispensa estes eletrodos, reduzindo a contaminação do plasma por impurezas; e, além disso, plasmas gerados por RF irão gerar maiores temperaturas dos elétrons, também apresentando maior estabilidade (ISOLDI, 2012). Tais fatos justificam o interesse por se modelar tochas de plasma de acoplamento indutivo excitadas por fonte RF.

Em se tratando dos trabalhos acerca do tema na literatura, há um número considerável de publicações que abrangem o tema. [Mostaghimi et al. \(1987\)](#) desenvolvem a modelagem bidimensional de uma tocha acoplada indutivamente RF sob as condições LTE - ou equilíbrio termodinâmico local - na pressão atmosférica, indicando que os resultados de simulações sob as condições LTE representam uma boa aproximação em relação aos modelos non-LTE. Os autores indicam também que, para pressões mais baixas, tal formulação não é válida. Tal resultado é condizente com o gráfico apresentado na figura 2. De acordo com o gráfico, para uma pressão muito abaixo da pressão atmosférica, a temperatura do elétron é bem maior que a temperatura do gás. No mesmo trabalho, são citadas algumas contribuições uni dimensionais do problema. Em publicação posterior, [Mostaghimi e Boulos \(1990\)](#) estudam o efeito da frequência de excitação RF, também em um plasma sob as condições LTE, submetido à pressão atmosférica. Para uma tocha com o Argônio como sendo o gás de trabalho, o autor mostrou que altas frequências resultam em baixos níveis de temperatura na tocha, bem como um aumento na diferença entre as temperaturas do elétron e do átomo/íon, em comparação com resultados experimentais.

[Xue et al. \(2001\)](#) trazem um modelo bidimensional em uma formulação de campo prolongado. Na formulação de campo prolongado, os autores estendem o domínio computacional para o cálculo do campo eletromagnético para fora da região de descarga do plasma, pois os mesmos citam o fato de que as condições de fronteira padrões do vetor potencial magnético fazem o modelo convergir mais lentamente do que a formulação proposta, que resulta em condições de fronteiras de campo distantes e mais simples. Em tal modelo, a corrente induzida na bobina por contribuição da corrente do plasma é negligenciada, e as condições LTE sob pressão atmosférica com gás de trabalho Argônio também são consideradas. Bons resultados são obtidos utilizando o software FLUENT^{©1}.

Em [Bernardi et al. \(2003\)](#) e [Colombo e Ghedini \(2007\)](#), são propostos modelos tridimensionais de geometria não simplificada, também resolvidos com o FLUENT[©]. Ambos os trabalhos consideram o mesmo modelo de tocha e as mesmas condições de equilíbrio termodinâmico e pressão atmosférica para o gás Argônio, com a diferença que o segundo trabalho considera um modelo turbulento da tocha e seu comportamento. Ambos os trabalhos acrescentam a contribuição tridimensional das bobinas, que no caso 3D mostram exatamente o efeito da falta de simetria, como a presença de pontos quentes na parede da tocha devido ao deslocamento da descarga do plasma. Lembrando que os modelos 2D consideram o problema como simétrico, do ponto de vista do eixo axial, e tais resultados, por vezes, não podem ser representados em tal modelo. Portanto, os resultados obtidos são comparados com os modelos 2D convencionais e melhorados,

¹Software da empresa ANSYS[©] especializado em resolver problemas CFD - *Computational Fluid Dinamyc*. Para mais informações, acesse www.ansys.com.

sendo os melhorados aqueles que apresentam a inclusão de efeitos da bobina 3D.

Em se tratando de modelos utilizando o COMSOL, diversas publicações foram realizadas ([BREZMES; BREITKOPF, 2015](#)); ([JIA et al., 2010](#)); ([IKHLEF et al., 2014](#)); ([BAHOUH et al., 2014](#)). [Jia et al. \(2010\)](#) trazem modelos de reatores a plasma acoplados indutivamente propostos pela *Gec Conference Cell*². [Brezmes e Breitkopf \(2015\)](#) focam o trabalho em apresentar um modelo com menor custo computacional, e ambos apresentam boas aproximações comparando-se com resultados analíticos. [Ikhlef et al. \(2014\)](#) trazem o modelo juntamente a uma discussão acerca do método dos elementos finitos e como ele irá acoplar as equações governantes, a saber as equações MHD e as equações para fluidos e transferência de calor.

Os exemplos de trabalhos mostrados utilizam um modelo semelhante de tocha de plasma, cada qual apresentando pequenas particularidades em se tratando da geometria da tocha, condições de contorno e condições iniciais. Como consenso quase que geral, temos que as tochas são modeladas considerando as condições LTE sob pressão atmosférica, utilizando o Argônio como gás de trabalho. Publicações contendo diferentes tipos de gases são mais escassas. Por exemplo, em [Chen et al. \(1998\)](#), um modelo de tocha parecido com os modelos apresentados anteriormente é utilizado, no entanto, o gás de trabalho é uma mistura Argônio-Hidrogênio. No trabalho em questão, por exemplo, a difusão do hidrogênio na mistura de gás foi modelada utilizando a abordagem de coeficiente de difusão combinada. Partindo dos resultados apresentados, iremos definir os parâmetros da tocha a ser modelada neste trabalho dissertativo, como a sua geometria, condições iniciais, condições de contorno e a apresentação das equações de MHD simplificadas e otimizadas para tal.

5.2 O modelo da tocha

Como mencionado no capítulo 2, [Roth \(1995\)](#) descreve que as tochas de plasma de acoplamento indutivo compartilham de uma mesma configuração básica. Um ou mais tubos de quarto concêntricos são responsáveis por comportar o gás que será transformado em plasma, enquanto que uma bobina de cobre, geralmente de seção circular, envolve este tubo, com um número de, geralmente, quatro a oito espiras. Devido à sua simplicidade, a geometria da tocha de plasma utilizada neste trabalho é uma adaptação da geometria utilizada por ([COLOMBO; GHEDINI, 2007](#)); ([BERNARDI et al., 2003](#)); ([MERKHOUF; BOULOS, 2000](#)); ([XUE et al., 2001](#)); ([DOLBEC et al., 2013](#)). Se tratam dos modelos desenvolvidos pela Tekna Plasma Systems Inc. Nas figuras à seguir mostramos os modelos de tocha disponíveis e, em mais detalhes, um esquemático da tocha escolhida, a Tekna PL-35.

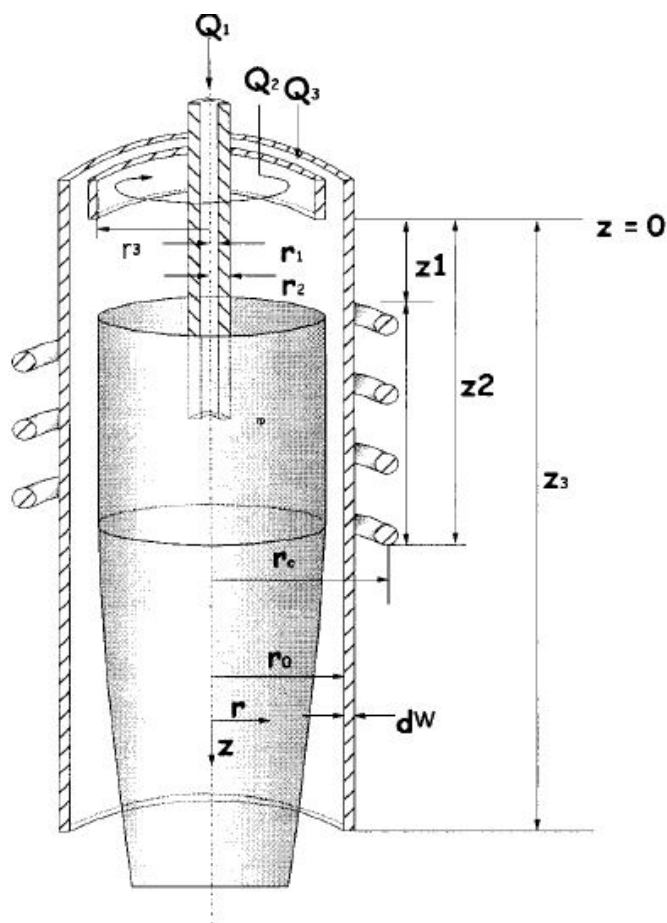
²Para mais informações, consulte: ([OLTHOFF; GREENBERG, 1995](#))

Figura 26 – Modelos de tocha desenvolvidos pela Tekna Plasma Systems Inc.



Fonte: DOLBEC *et al*, 2008

Figura 27 – Esquemático da Tekna PL 35



Fonte: MERKHOUF *et al*, 2000

Como se pode observar na figura 27, a tocha é formada por três tubos de quartzo concêntricos, por onde o gás de trabalho é injetado, denominados na literatura por *carrie tube*, *central tube* e *sheath tube*, respectivamente para os tubos interno, intermediário e externo. O tubo externo é envolto pela bobina de cobre, que receberá a potência RF necessária para formar o plasma. Este modelo serviu como base para que fosse, então, desenhado no COMSOL com uma geometria simplificada, representando os tubos concêntricos e a bobina que envolve o tubo mais externo, como mostra a figura à seguir. O desenho feito no COMSOL utilizando um domínio computacional bidimensional. Comparando-se com a figura 27, consideremos um corte no eixo central da tocha. Devido à simetria em relação ao eixo central, foi representado apenas uma das metades da tocha. À seguir temos o desenho feito, seguido de uma tabela com as principais medidas indicadas. O comprimento L_0 representa o comprimento do tubo externo, sendo referente ao comprimento z_3 da figura 27. Já os comprimentos R_0 , R_1 e R_2 representam r_0 , r_1 e r_3 , enquanto que d_1 e d_2 estão para z_1 e z_2 . As espessuras dos tubos são representados por w e dw , no COMSOL e na figura 27, respectivamente. As demais medidas podem ser encontradas em [Merkhouf e Boulos \(2000\)](#).

Figura 28 – Geometria da tocha desenhada no COMSOL

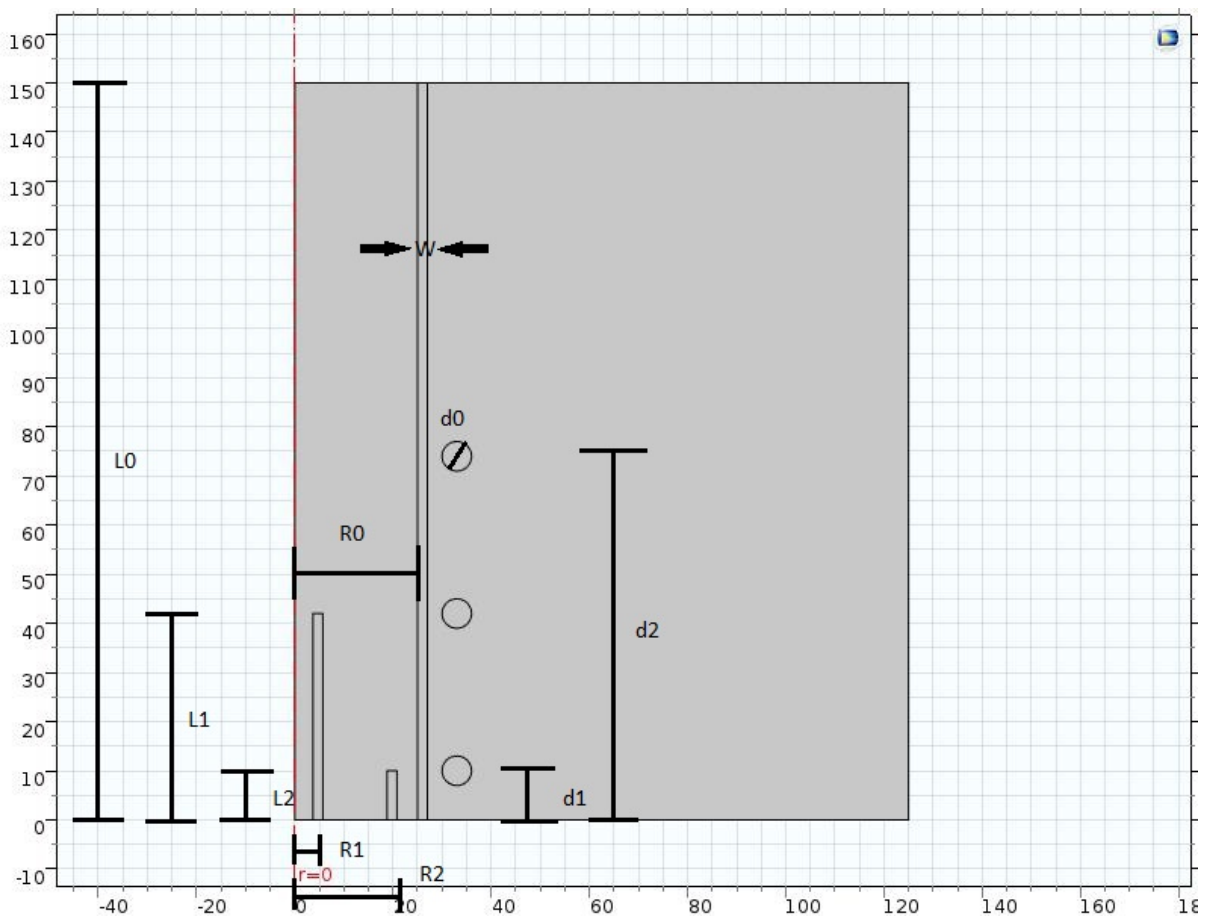


Tabela 2 – Medidas em destaque da tocha de plasma modelada

Label	Medida [mm]
L_0	150
L_1	42
L_2	10
R_0	25
R_1	3.7
R_2	18.8
d_0	6
d_1	10
d_2	74
$\delta\omega$	2

Fonte: MERKHOUF *et al*, 2000

Podemos verificar o desenho da geometria, os três retângulos com base ω e altura distintas representam os tubos de quartzo, sendo o ω a sua espessura. Os três círculos representados são a representação da bobina de cobre que envolve o tubo. O restante do domínio computacional, à direita da bobina, representa o ar que circunda a tocha, ou seja, o ambiente externo. Os três tubos concêntricos que formam o corpo da tocha de plasma têm entradas de gás independentes. Conforme definido por [Salazar et al. \(2012\)](#), o tubo externo é chamado tubo de confinamento do plasma. No tubo intermediário ou *carrie tube*, que se estende até a altura da primeira espira, será carregado um fluxo de gás auxiliar Q_3 . Este gás escoado ao longo da parede do tubo de confinamento irá reduzir as perdas condutivas e convectivas do plasma, além de limitar o sobreaquecimento do tubo de confinamento. Um fluxo de gás Q_2 é injetado entre o tubo intermediário e central, longitudinalmente com uma componente de vórtice. Neste gás ocorre a descarga ionizante, além de o mesmo isolar termicamente o plasma do tubo externo. Este fluxo é semeado com íons e elétrons por meio de uma bobina de Tesla, já que o plasma térmico é difícil de ser ionizado, portanto, a bobina é necessária para iniciar a descarga. Finalmente, um fluxo de gás Q_1 flui no tubo central. Quando existente, este tubo introduz os materiais reativos ou as pólvoras utilizadas em tratamento de superfícies. Em espectrometria de emissão atômica, que é um método analítico para determinação de elementos em pequenas quantidades de uma amostra, a amostra pode geralmente ser uma solução nebulizada, resultando em um fino spray ou aerossol, sendo transportado por um gás inerte, através do tubo central da tocha de plasma, por exemplo ([ISOLDI, 2012](#)).

5.3 Configuração das físicas envolvidas: Condições Iniciais e condições de Contorno

Como já mencionado anteriormente neste texto, o problema de modelar a tocha de plasma acoplada indutivamente escolhida irá aproximar a solução dos campos de temperatura e escoamento utilizando modelos matemáticos para eletromagnetismo e dinâmica dos fluidos, utilizando as equações de MagnetoHidroDinâmica. As equações modelo para estes tipos de problema foram definidas no capítulo 2, em que foi feita uma revisão dos conceitos fundamentais aplicados à fundamentação teórica do problema. No software utilizado, estas equações são combinadas com as físicas *Magnetic Fields*, que irá resolver as equações de Maxwell e encontrar os campos elétricos e magnéticos, a partir da potência elétrica aplicada na bobina que irá excitar o plasma; *heat transfer in fluids*, que irá tratar dos fenômenos de transferência de calor no plasma, como por exemplo o calor transferido do plasma para a parede do tubo externo da tocha; e *Laminar Flow*, que irá resolver as equações de Navier Stokes e a equação da continuidade para um fluido em escoamento laminar. Como as equações foram apresentadas no capítulo anterior, convém apresentá-las na forma em que as mesmas são utilizadas no software, com todas condições e simplificações envolvidas. Apresentaremos, então, nas subseções anteriores, as físicas e equações envolvidas, bem como as condições de iniciais e de contorno adotadas.

5.3.1 Equações dominantes

A interface do programa que contém as físicas mencionadas no capítulo anterior é a interface *Equilibrium Inductively Coupled Plasma*, que irá mesclar as físicas para estudar descargas de equilíbrio sustentadas por correntes de indução. Na interface para campos eletromagnéticos, as equações de Maxwell (equações 24, 28, 34 e 44) são resolvidas utilizando o vetor potencial magnético. Da teoria dos campos de vetores, sabe-se que a divergência do rotacional de um campo vetorial é sempre nula. Relembrando da lei de Gauss para campos magnéticos, teremos que:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

Ora, aplicando a propriedade de campos vetorial para a equação de Maxwell, teremos:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (86)$$

A representação do campo magnético pelo vetor potencial dada pelo COMSOL é uma forma conveniente e, além do mais, elegante, para se calcular campos elétricos, magnéticos e lei de Ampère. Por exemplo, a densidade de corrente elétrica é dada em

termos do vetor potencial magnético, no que chamamos de *equação vetorial de Poisson*, similar à equação de Poisson da eletrostática. A mesma é dada por:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J} \quad (87)$$

Lembrando que o Laplaciano de um campo vetorial é dado por:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}$$

Em se tratando da interface transferência de calor, a mesma no COMSOL irá relacionar o gradiente de temperaturas, o campo de velocidades, a capacidade térmica e um termo fonte. Portanto:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (k \nabla T) = Q \quad (88)$$

Sendo o termo fonte dado em termos das seguintes componentes:

- Perdas Ôhmicas: $\mathbf{Q} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$;
- Perdas por radiação volumétrica líquida, Q_{rad} , dependente das propriedades do material;
- Transporte de Entalpia (energia transportada pela corrente elétrica):

O campo elétrico proveniente das perdas Ôhmicas mostrado é dado em termos do vetor potencial magnético:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (89)$$

Finalmente, para a interface que irá resolver o escoamento considerado laminar, a equação da conservação do momentum é apresentada como segue:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \mathbf{F} \quad (90)$$

Notemos que na forma da equação do momentum - a mesma apresentada no capítulo 2 - dada pelo COMSOL, a mesma está em termos da densidade ρ , pressão p , viscosidade μ , representando as forças de superfície. Aqui, ainda, $\mathbf{I}$ é uma matriz identidade, e a força de corpo $\mathbf{F}$ é a força de Lorentz, dada pela equação 65. Vale ressaltar que, em relação à compressibilidade, o modelo adotado é compressível com número de Mach $M_a < 0.3$.

5.3.2 Condições Iniciais e Condições de Contorno

Definidas as físicas e as equações do modelo, estamos aptos a definir as condições iniciais e de contorno adotadas no modelo de tocha. Algumas condições adotadas no

modelo deste trabalho são semelhantes às utilizadas em (MOSTAGHIMI et al., 1987); (XUE et al., 2001); (BAHOUE et al., 2014). Em relação à geometria, considerando r como sendo o eixo radial ou horizontal, e z como sendo o eixo axial ou vertical, dada pela figura 28, as condições iniciais para a velocidade do gás na entrada da tocha e as condições de contorno para a temperatura nas paredes da tocha são dadas como:

$$v_z = \begin{cases} \frac{Q_1}{\pi R_1^2}, r \leq R_1 \\ \frac{Q_2}{\pi(R_2^2 - R_1^2)}, R_1 \leq r \leq R_2 \\ \frac{Q_3}{\pi(R_0^2 - R_2^2)}, R_2 \leq r \leq R_0 \end{cases} \quad (91)$$

$$v_r = 0 \quad (92)$$

$$T = 300K \quad (93)$$

Onde Q representa as vazões do gás nos tubos central, intermediário e no tubo externo, como sendo, respectivamente, 1 lpm, 3lpm e 25 lpm (Litro por Minuto) para Q_1 , Q_2 e Q_3 . Como definido, a componente tangencial da velocidade é nula, e a temperatura dada se refere à temperatura inicial do gás e a temperatura inicial da parede da tocha. Além do mais, temos a condição de isolamento magnética na entrada e saída da tocha, bem como nas "paredes" do meio a circunda, que é o ar:

$$\mathbf{n} \times \mathbf{A} = 0 \quad (94)$$

Sendo $\mathbf{n}$ um vetor normal à superfície e $\mathbf{A}$ o já mencionado vetor potencial magnético. A condição de isolamento térmica também é aplicada:

$$-\mathbf{n} \cdot (-k \nabla T) = 0 \quad (95)$$

Ou seja, o gradiente de temperatura na direção normal, para fora da fronteira, é nula, na entrada e saída da tocha. Para o escoamento laminar, é aplicada a condição *no slip*, ou "sem escorregamento", onde a velocidade nas paredes é nula. Os valores iniciais para campo de velocidades, pressão e vetor potencial magnético são considerados nulos.

5.3.3 Simplificações e outros parâmetros

Além das condições mostradas na seção anterior, as seguintes condições são também adotadas neste modelo:

- A tocha de plasma é modelada seguindo configuração 2D com simetria no eixo axial;

- Componente axial da corrente elétrica é desprezada;
- Componente tangencial da velocidade é desprezada;
- Escoamento Laminar em estado estacionário, à pressão atmosférica;
- Plasma opticamente fino, sob as condições de equilíbrio termodinâmico LTE;
- Dissipação viscosa e trabalho realizado pela pressão na equação da energia são desprezados
- Caráter colisional (frequência de colisões) não serão abordados neste contexto

Os últimos parâmetros a serem definidos para executar o modelo da tocha são a frequência da fonte RF e a potência RF aplicada. A frequência considerada em todos os casos estudados foi de 3 MHz³. A potência RF aplicada na bobina, que consequentemente irá definir também a corrente e tensão aplicadas, foi de 15 kW para todos os casos do estudo comparativo com diferentes gases e 11 kW para o modelo com modificações na geometria, para o gás Argônio.

5.4 O estudo comparativo: Modificações no gás de trabalho e na geometria da tocha

Conforme pode ser observado pelas equações dominantes que modelam o fenômeno, todas elas requerem especificações dos materiais envolvidos, que são, consequentemente, função da temperatura. Portanto, a definição dos materiais na geometria montada influem fortemente nos resultados. Quanto ao material da bobina, o mesmo é definido como sendo de cobre puro. O material dos tubos que compõe as paredes da tocha é o quartzo, e o meio que cerca a tocha em suas fronteiras é o ar atmosférico. Uma atenção especial aqui é dada para um importante material a ser definido: o gás de trabalho. Tendo em vista as observações aqui feitas em relação à influência das propriedades de transporte nas equações dominantes, este trabalho se propõe a fazer um estudo comparativo entre diferentes gases de descarga para a geometria proposta, baseada na geometria da tocha Tekna PL-35. Portanto, os seguintes gases de trabalho serão testados:

- Argônio;
- Oxigênio;

³Por normatização internacional, a frequência de 13.56 MHz é regulamentada para aplicações industriais, científicas e médicas. No entanto, foi escolhida uma frequência de 3 MHz para este trabalho, por se tratar ainda de um trabalho de cunho teórico. Tal escolha se deu para que se acrescente à literatura resultados em uma faixa de frequências diferente, para fins acadêmicos.

- Nitrogênio.

As equações dominantes serão resolvidas para cada caso, onde pretende-se encontrar:

- Temperatura na parede da tocha;
- Distribuição radial de temperatura, na altura da terceira espira da bobina;
- Distribuição axial de temperatura, no eixo de simetria da tocha;
- Velocidade Axial, no eixo de simetria da tocha;
- Perfil de temperaturas 2D.

Em cada caso, os gráficos da temperatura e velocidade em função do comprimento do arco definido (radial ou axial) serão plotados e comparados entre si. Também serão computados e mostrados em gráfico de escala de cores a distribuição de temperatura por todo o domínio da tocha de plasma. Tais resultados mostrarão a influência que as propriedades de transporte do gás podem ter na determinação dos campos de velocidade e temperaturas calculados numericamente pelo software COMSOL.

No capítulo anterior foi mencionado que a tocha de plasma de acoplamento indutivo se comporta como um transformador, sendo a bobina primária representada pelo indutor e a bobina secundária representada pelo próprio plasma. [Salazar et al. \(2012\)](#) traz uma discussão acerca desta representação. Na discussão trazida pelo autor, a descarga indutiva no plasma é descrita por meio de um modelo de um transformador elétrico virtual, com núcleo de ar, no qual o primário é o indutor da tocha e o secundário formado pelo anel de plasma. Desta forma, alguns parâmetros do plasma podem ser representados por grandezas elétricas mensuráveis. Além disto, por apresentar comportamento semelhante ao transformador, modificações no número de espiras da bobina da tocha implicam em modificações no primário do transformador virtual. Como existe uma indutância mútua que é resultado da interação da indutância da bobina da tocha e a indutância de descarga do plasma, tais modificações irão modificar o comportamento do plasma.

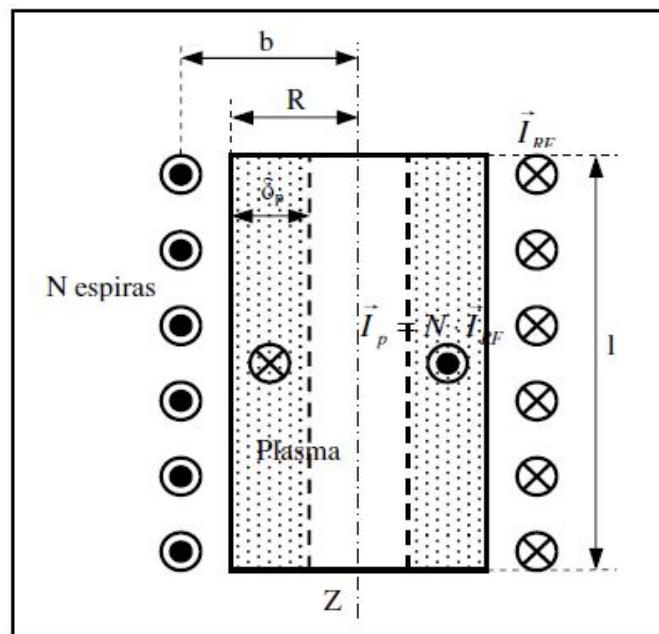
Considerando as colocações do parágrafo anterior, serão propostas as seguintes modificações na geometria da tocha de plasma, a fim de observar como tais modificações irão acarretar em mudanças nos campos de temperatura axial, radial (na altura da terceira espira da bobina da tocha) e na parede da mesma:

- 3 voltas;
- 4 voltas, com espaçamento entre as espiras de 32 mm;

- 4 voltas, com espaçamento entre as espiras de 20 mm.

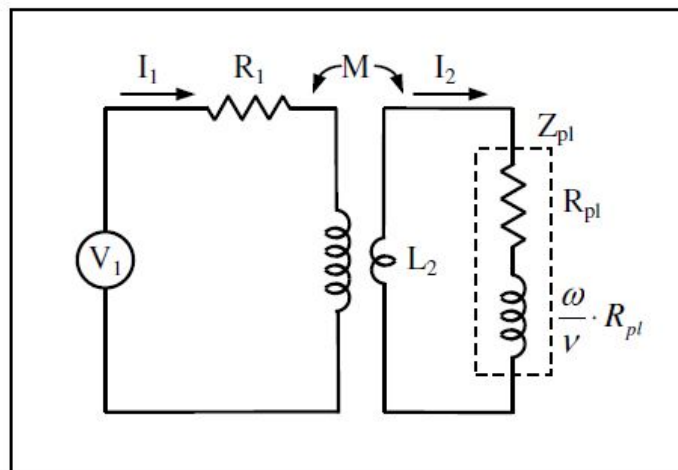
As modificações na geometria serão propostas para uma tocha em operação com a mesma frequência de 3 MHz da fonte RF, potência de 11 kW aplicada para um gás de trabalho como sendo o Argônio. Tais resultados serão comparados, a fim de se observar a influência destas modificações na geometria nos perfis de temperatura na região citada.

Figura 29 – A tocha representada como um modelo de transformador virtual



Fonte: Salazar *et al*, 2012

Figura 30 – Modelo transformador da tocha



Fonte: Salazar *et al*, 2012

Finalmente, dentre os parâmetros citados, os principais seguem compilados nas tabelas á seguir.

Tabela 3 – Parâmetros fixos

Parâmetro	Valor [unidade]
Frequência RF	3 [MHz]
Vazão Q_1	1 [lpm]
Vazão Q_1	3 [lpm]
Vazão Q_1	25 [lpm]

Fonte: Elaboração própria, 2017

Tabela 4 – Modificações no gás de trabalho

Gás
Argônio
Oxigênio
Nitrogênio

Fonte: Elaboração própria, 2017

Tabela 5 – Modificações na geometria da bobina

Nº de espiras	Espaçamento entre espiras [mm]
3	32
4	42
4	20

Fonte: Elaboração própria, 2017

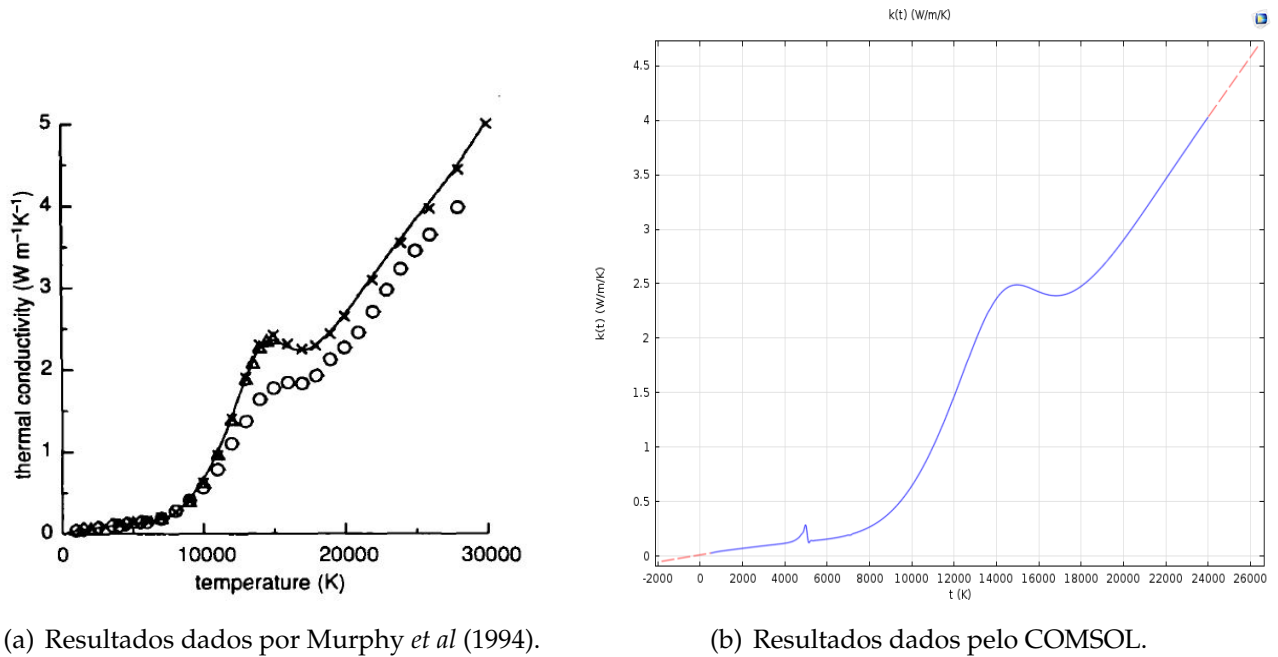
5.5 Validação do modelo

As propriedades de transportes dos três gases utilizados podem ser consultadas em (MURPHY; ARUNDELLI, 1994) e (MURPHY, 2000). Em ambos os trabalhos, os valores das propriedades, como condutividade térmica e elétrica, por exemplo, são calculados e comparados com resultados experimentais presentes na literatura, apresentando uma boa aproximação. Para validar a solução proposta pelo COMSOL, convém analisar como estas propriedades são dadas pelo mesmo, ou seja, se as propriedades apresentadas na literatura se assemelham às configuradas no COMSOL.

No software, as propriedades dos materiais já vêm prontamente configuradas. Pelo fato de o mesmo ser um software de código fechado, não é possível obter a fonte destes dados. Provavelmente é proveniente de algum banco de dados privado. Os valores das propriedades são dadas em valores discretos, em função da temperatura. Para gerar um gráfico contínuo, no software foi feita uma interpolação por Splines

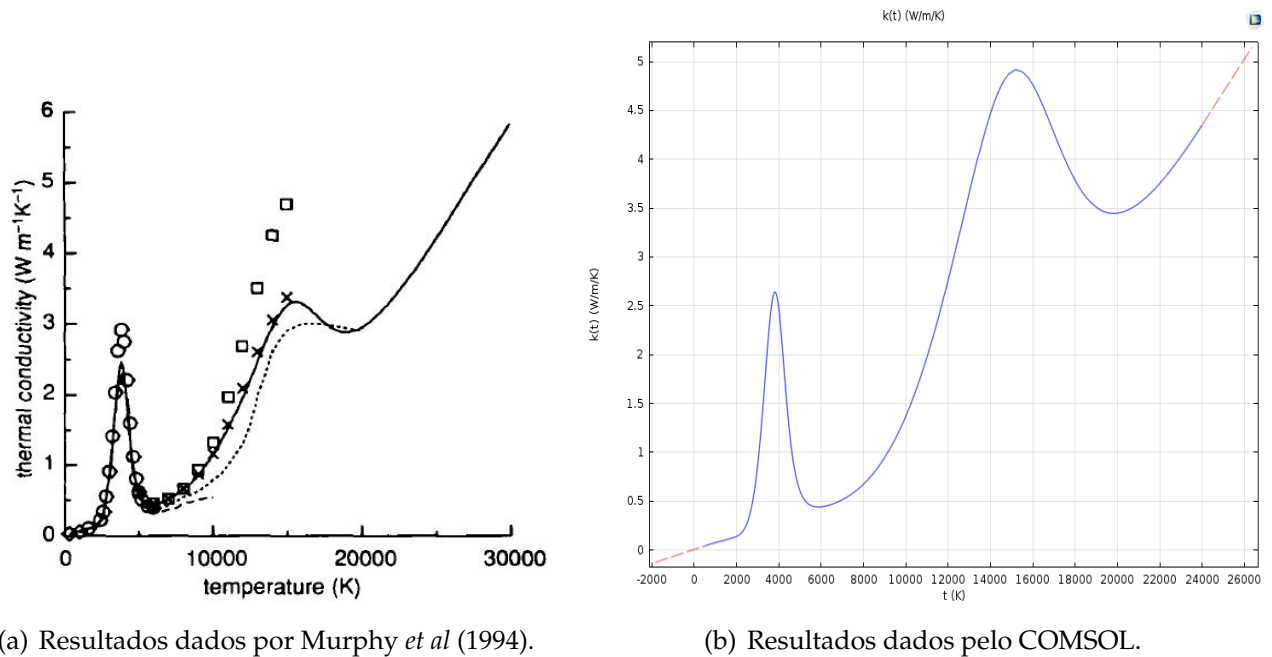
Cúbicos em um intervalo dado, e fora do intervalo foi feita uma extrapolação linear. Tais resultados podem ser comparados com os resultados calculados por (MURPHY; ARUNDELLI, 1994), que por sua vez apresentaram boa aproximação com valores experimentais. A exemplo da condutividade térmica, a comparação é dada a seguir.

Figura 31 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy *et al* (1994) e pelo COMSOL para o gás Argônio



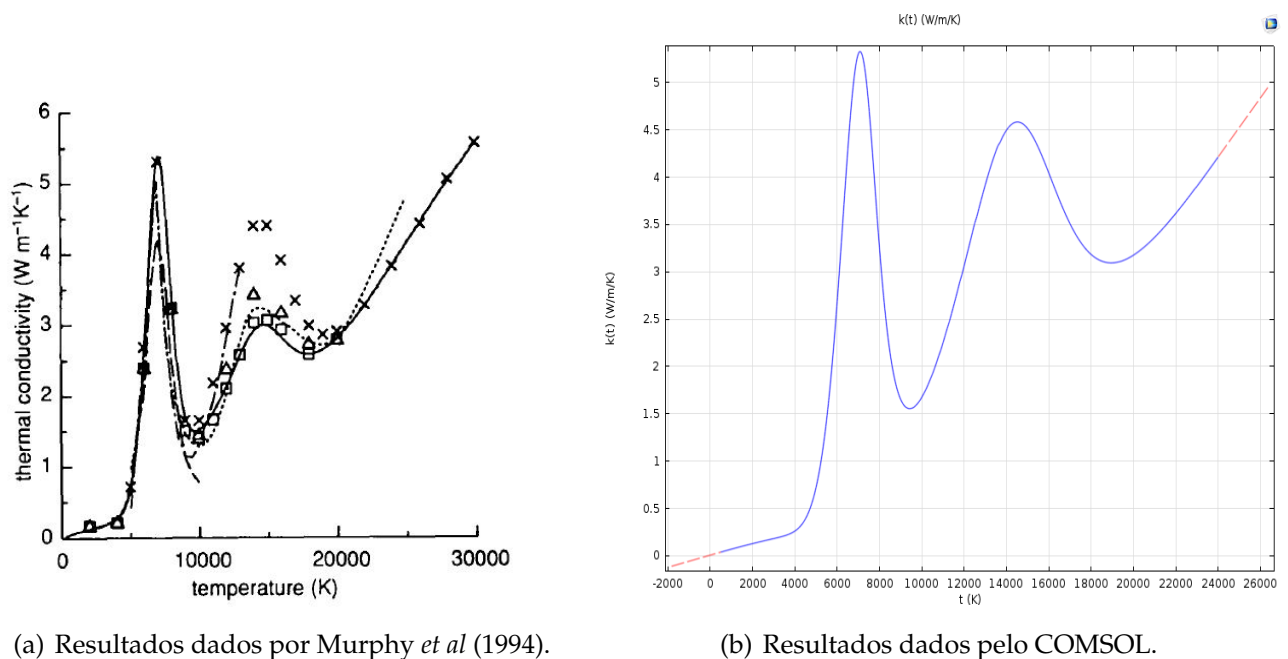
Fonte: Murphy *et al* (1994); Elaboração própria (2017)

Figura 32 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy *et al* (1994) e pelo COMSOL para o gás Oxigênio



Fonte: Murphy *et al* (1994); Elaboração própria (2017)

Figura 33 – Comparação da condutividade térmica dada por Murphy *et al* (1994) e pelo COMSOL para o gás Nitrogênio



Fonte: Murphy *et al* (1994); Elaboração própria (2017)

Tais resultados evidenciam uma boa aproximação entre os modelos teóricos

calculados em (MURPHY; ARUNDELLI, 1994), que já foram validados com resultados experimentais, e os modelos interpolados pelo COMSOL, evidenciando uma boa aproximação do modelo com a realidade. Tal validação é importante no sentido da confiabilidade dos cálculos feitos para diferentes gases que não são apresentados na literatura, para as condições admitidas neste trabalho.

5.6 Geração da malha computacional

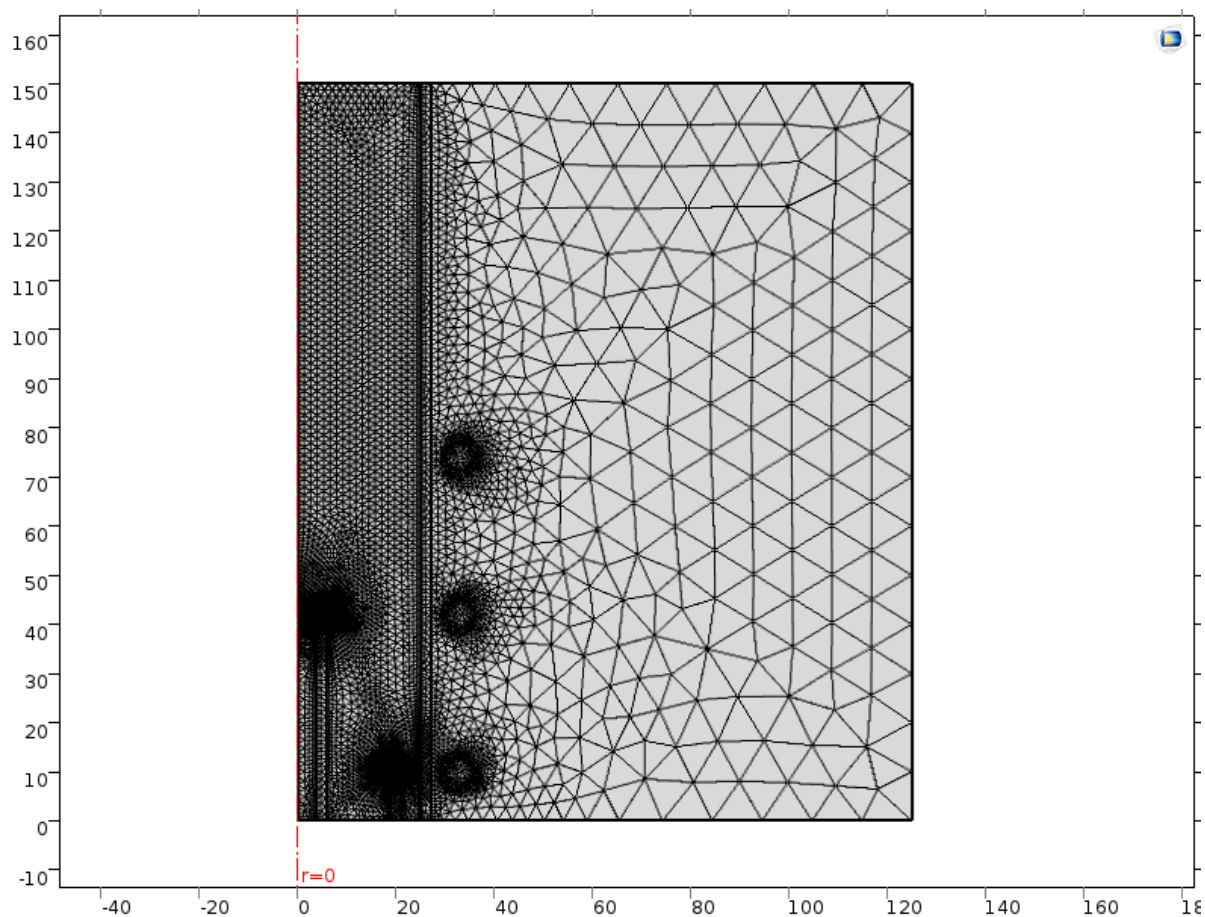
Para a aplicação do MEF pelo COMSOL, a fim de resolver as equações, uma malha computacional formada por 10039 elementos triangulares foi formada. Em relação às malhas computacionais, elas podem ser dos seguintes tipos (FORTUNA, 2102):

- Estruturada: Apresentam uma regularidade na distribuição espacial dos pontos;
- Estruturada coincidente com a fronteira: Utilizada em domínios compostos por geometrias complexas. Ela se adapta à geometria e, em geral, utiliza um sistema de coordenadas generalizadas;
- Não estruturada: Não existe uma regularidade na distribuição dos pontos. É uma forma mais direta de discretizar domínios complexos.

As malhas não estruturadas estão em crescente popularidade em softwares numéricos. No COMSOL, uma operação definida como *partition domain* permite particionar o domínio de diversas maneiras, especificando curvas e superfícies específicas no domínio. Tal metodologia utilizada pelo software é útil quando é melhor representar uma determinada parte da geometria com uma malha estruturada, ao invés de em sua totalidade ser representada com uma malha não estruturada.

A malha adaptativa gerada é mais refinada nas regiões das paredes da tocha, na entrada do fluxo de gás e na região em torno das espiras da bobina. A região interna do tubo conta com uma malha fina, enquanto que na região do domínio em torno da tocha, que compõe o ar atmosférico, é gerada uma malha mais grossa. Para todos os casos foi gerada a mesma malha, apenas com uma ressalva para os casos de modificação na geometria. A inserção de uma espira a mais, por exemplo, ocasionou um aumento no número de elementos, por conta de mais uma região do domínio em formato circular, onde a malha em seu contorno é apresentada em uma composição extremamente fina.

Figura 34 – Geração da malha computacional



Fonte: Elaboração própria, 2017.

Utilizando uma máquina Dell Inspiron 14 série 5000, com sistema operacional Windows 8, processador Intel Core i5, 8 GB de memória RAM, os modelos foram executados com um tempo médio de 20 minutos. No software, foi feito um estudo *frequency transient*. Os resultados alcançados para um tempo $t = 1s$ serão apresentados no capítulo à seguir.

6 Resultados e discussões

No presente capítulo, serão apresentados os resultados das simulações feitas. Para a geometria proposta, os parâmetros investigados foram os campos de temperatura e velocidades na tocha para diferentes os gases Argônio, Oxigênio e Nitrogênio. Serão destacadas as temperaturas na parede da tocha, no eixo de simetria axial e a distribuição radial de temperatura, na altura da terceira espira da bobina, onde em todos os modelos foi constatado aparecerem os maiores gradientes de temperatura. A velocidade no eixo de simetria axial também será mostrada. Já para o caso da modificação na geometria da bobina da tocha, gráficos de temperatura também serão comparados entre si para os eixos axial, no eixo de simetria e na parede da tocha, e radial, na altura da terceira bobina. Neste caso, a altura da terceira bobina irá depender de quantas espiras são consideradas e qual o espaçamento entre elas.

Vale ressaltar que o COMSOL permite que se desenhe um arco na região do domínio computacional da tocha, onde pode ser encontrada a distribuição de alguma variável de interesse em função deste comprimento de arco. Tal análise é aqui utilizada para se analisar de forma mais clara as distribuições de temperatura no interior da tocha, onde estes comprimentos de arco são os eixos radial e axiais citados anteriormente. Todos resultados computados no estudo *frequency transient* do COMSOL são mostrados para $t = 1s$.

6.1 Modificações no gás de trabalho

Aqui, todas as simulações utilizaram a mesma geometria da tocha, submetida às mesmas condições de contorno. A potência RF aplicada na bobina foi de 15 kW. As vazões de gás para os tubos central, intermediário e externo, Q_1 , Q_2 e Q_3 , respectivamente, foram de 1, 3 e 25 lpm (litros por minuto). A frequência de operação da fonte RF considerada foi de 3 MHz.

Em se tratando da temperatura máxima alcançada, foi verificado que a utilização do gás argônio acarretou em maiores temperaturas, seguido do oxigênio e nitrogênio. Foram obtidos os valores à seguir:

As figuras 35, 36 e 37 mostram os perfis de temperatura em fatia para os gases Argônio, Oxigênio e Nitrogênio, respectivamente. Como se pode observar, para o argônio, a região de concentração de suas mais altas temperaturas é menor que para os gases Oxigênio e Nitrogênio. Para estes dois, principalmente o oxigênio, esta região se estende até a saída da tocha, mantendo uma distribuição de temperaturas mais uniforme. Observa-se uma maior similaridade entre os campos de temperatura para os gases

Tabela 6 – Temperatura máxima alcançada

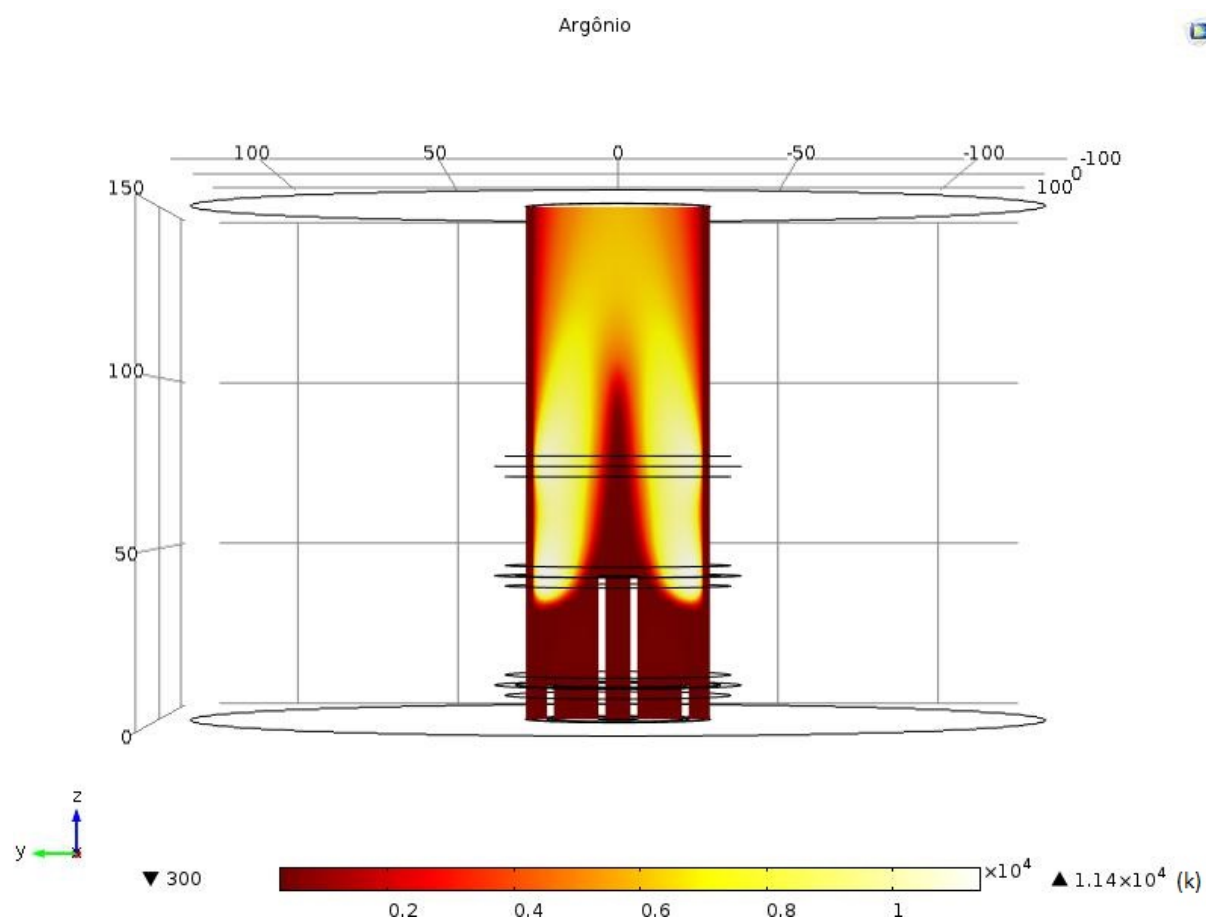
Gás	Temperatura [K]
Argônio	11400
Oxigênio	4167
Nitrogênio	3073

Fonte: Elaboração própria, 2017

Oxigênio e Nitrogênio. No Argônio, observa-se variações mais bruscas na temperatura axial, por exemplo. A temperatura apresenta-se baixa até, aproximadamente, $z = 80mm$, um pouco acima da altura da terceira espira da bobina, onde só após isto começa a crescer, atingindo um valor próximo a $7000K$. Em outras palavras, a distribuição de temperaturas é mais uniforme para o oxigênio e nitrogênio em relação ao argônio.

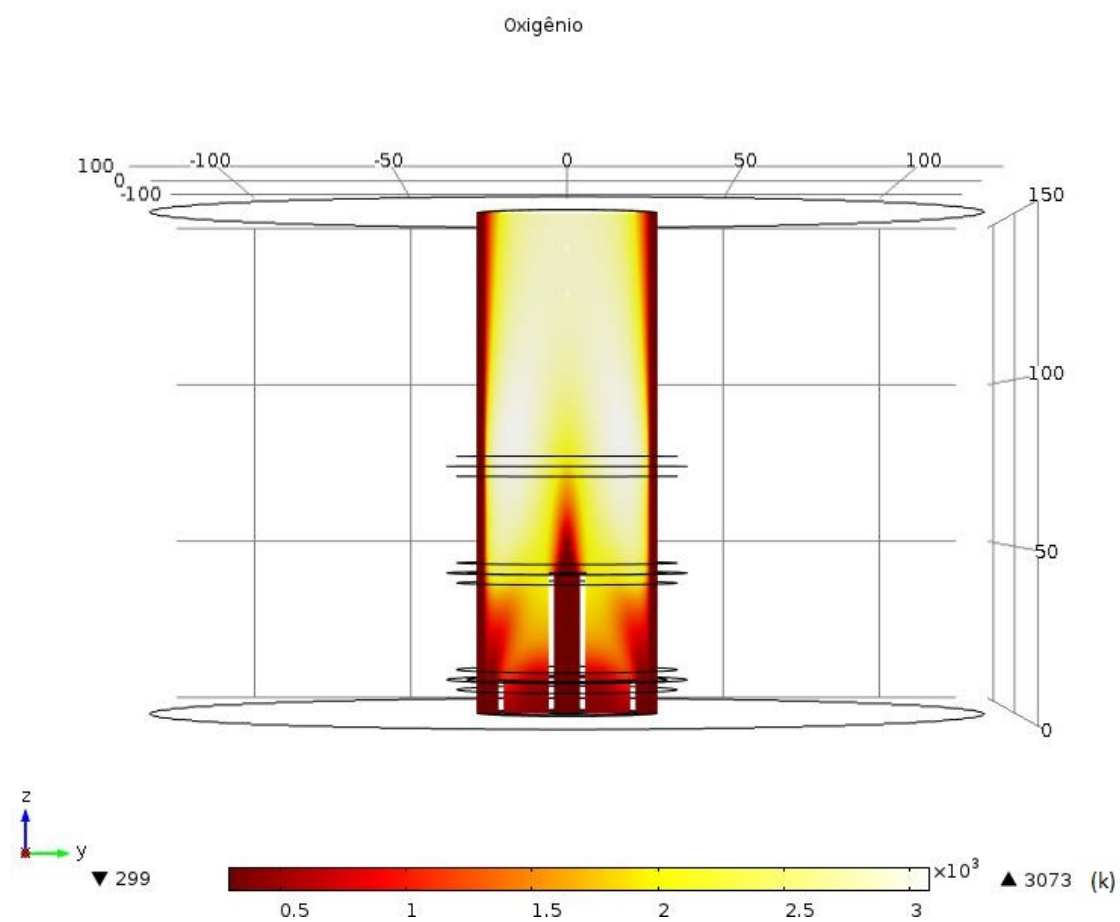
Tal fato pode ser explicado devido às propriedades de transporte dos gases utilizados. Como mencionado em outros trechos deste trabalho, seria provável que a mudança no gás de trabalho acarretasse em grandes mudanças nos perfis de temperatura, justamente pelas propriedades de transporte dos diferentes gases. Conforme pode ser observado em [Murphy e Arundelli \(1994\)](#), as condutividade térmica do oxigênio e nitrogênio são maiores que o argônio para a faixa de temperatura alcançada pelas tochas simuladas. Tal fato é evidenciado pela distribuição mais uniforme de temperaturas apresentados por estes, em comparação com o argônio. Em se tratando dos valores máximos de temperatura alcançados, sugere-se que a eficiência no processo de transferência de energia é maior para o gás argônio que para os outros gases, o que pode justificar as suas temperaturas alcançadas serem mais elevadas.

Figura 35 – Distribuição de temperaturas para o gás Argônio



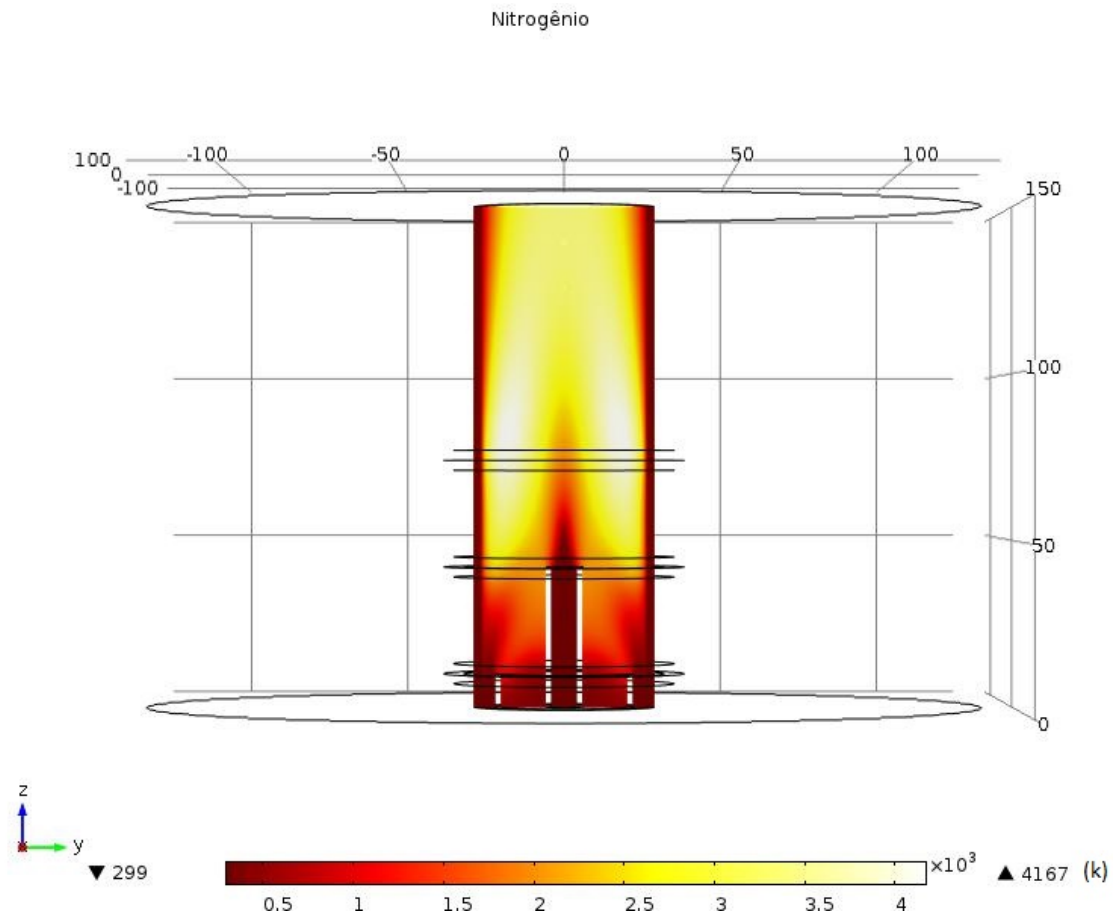
Fonte: Elaboração própria, 2017.

Figura 36 – Distribuição de temperaturas para o gás Oxigênio



Fonte: Elaboração própria, 2017.

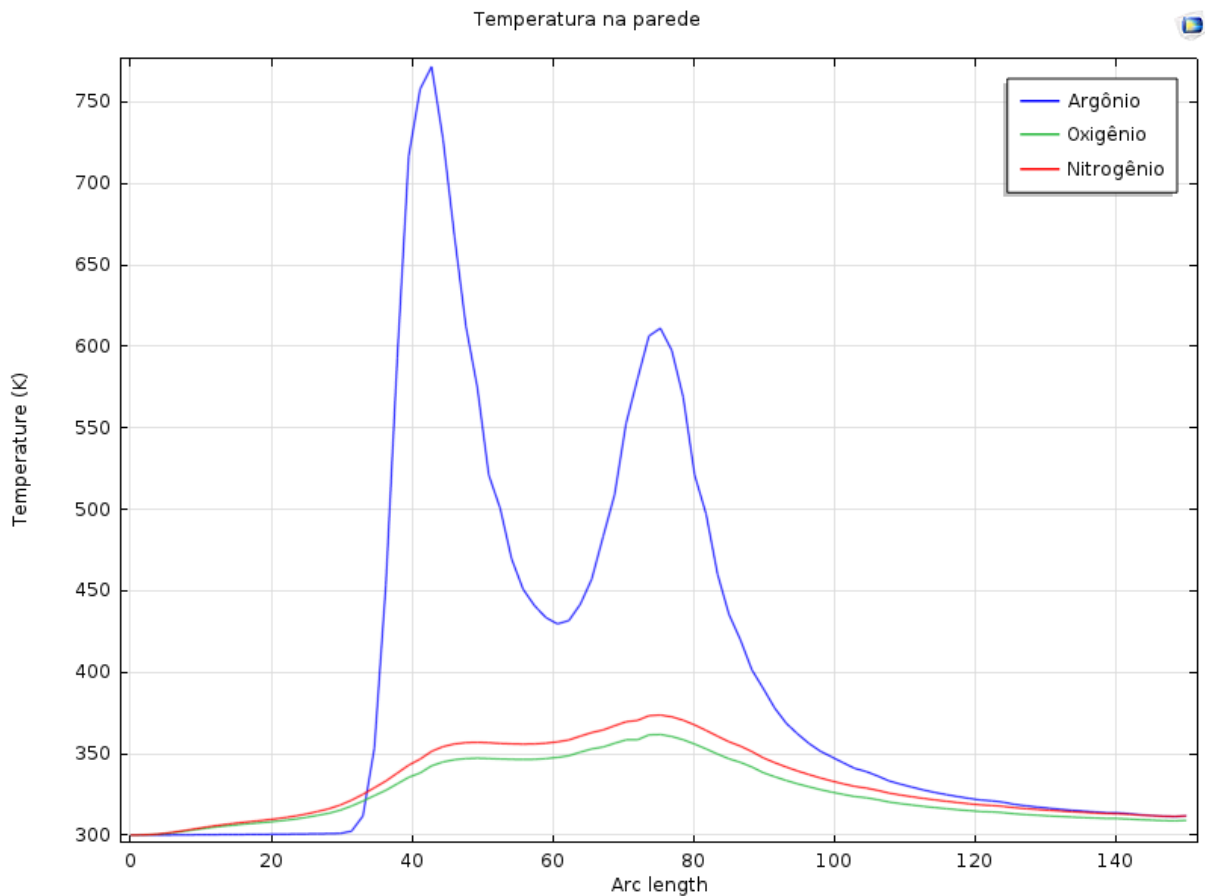
Figura 37 – Distribuição de temperaturas para o gás Nitrogênio



Fonte: Elaboração própria, 2017.

A verificação da temperatura nas paredes da tocha é um ponto importante, pois a mesma deve ser monitorada no sentido de não apresentar temperaturas mais elevadas que a temperatura de fusão do material que a compõe. Como pode-se observar, na figura 38, é mostrado um gráfico da temperatura da tocha ao longo da parede, internamente, no tubo de quartzo externo. Observa-se um pico máximo de temperatura que têm valor em torno de $750K$ para o gás Argônio, a uma altura de, em média, $40mm$ em relação à entrada da tocha. Observa-se que a região que compreende a bobina, em torno de 40 a $80mm$ é a região de concentração das mais altas temperaturas. Tal resultado era realmente de se esperar, pois esta é a região em que está inserida fisicamente a bobina portadora de corrente elétrica, portanto, apresentando as regiões de maiores concentrações de temperatura nas paredes da tocha. No caso do quartzo, que tem uma temperatura de fusão da ordem de $973K$, observou-se que para o modelo proposto nenhum dos três gases apresentou temperaturas próximas, com exceção do já citado caso do Argônio.

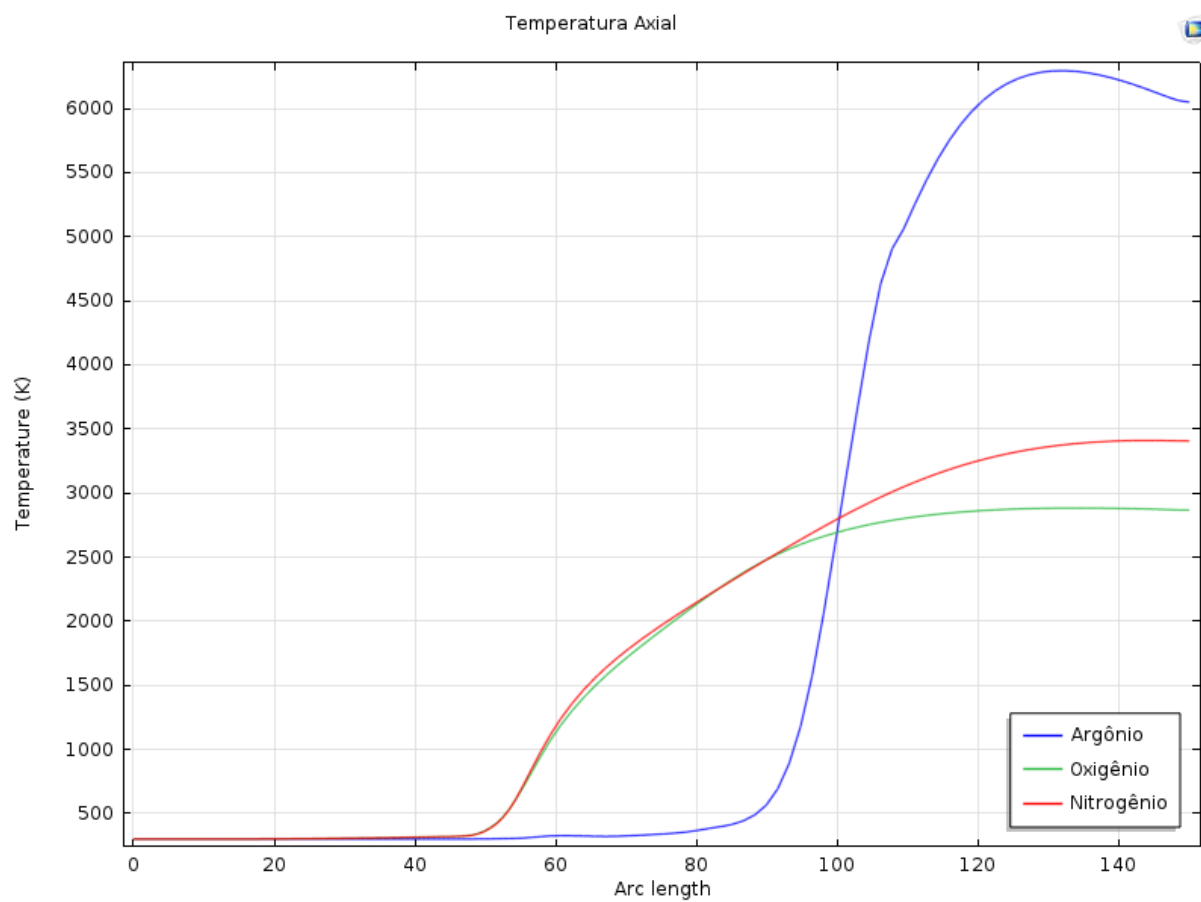
Figura 38 – Temperatura nas paredes do tubo externo da tocha



Fonte: Elaboração própria, 2017.

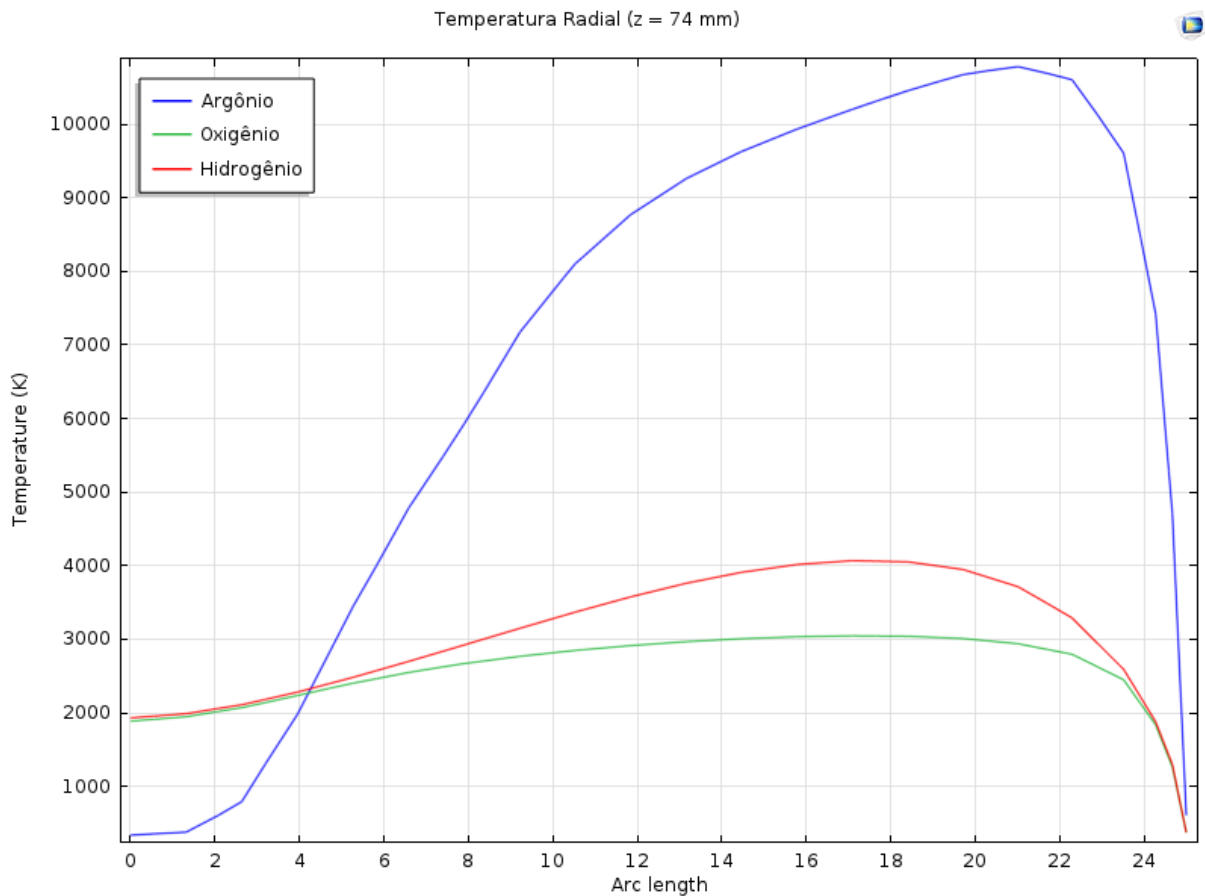
O gráfico das temperaturas na região de simetria axial, na figura 39, mostra que a temperatura tende a crescer quanto mais se aproxima à saída da tocha. Aqui, mais uma vez, as temperaturas do oxigênio e nitrogênio são mais equiparáveis, começando a crescer à partir da altura da segunda espira da bobina, conforme mostra o gráfico da figura 40. Ainda de acordo com mesma figura, observa-se que para o Argônio, a temperatura apresenta-se baixa e só começa a crescer na altura pouco acima da terceira espira, alcançando valores bem maiores que para os outros dois gases, conforme evidenciado nas figuras anteriores. Em todas as tochas, como observado nas figuras 35, 36 e 37, as maiores temperaturas concentram-se na região mais próximas às paredes da bobina. Portanto, comparando-se as figuras citadas com a tabela 6, as maiores concentrações de temperatura não estão no eixo central da tocha. As maiores temperaturas se concentram em regiões próximas às paredes e também em alturas próximas à região das espiras da bobina. Tal resultado foi esperado, pois se trata de uma tocha de plasma de acoplamento indutivo. Como a energia é transferida pelo campo magnético gerado pela bobina, tal região irá concentrar as maiores temperaturas.

Figura 39 – Temperatura no centro da tocha



Fonte: Elaboração própria, 2017.

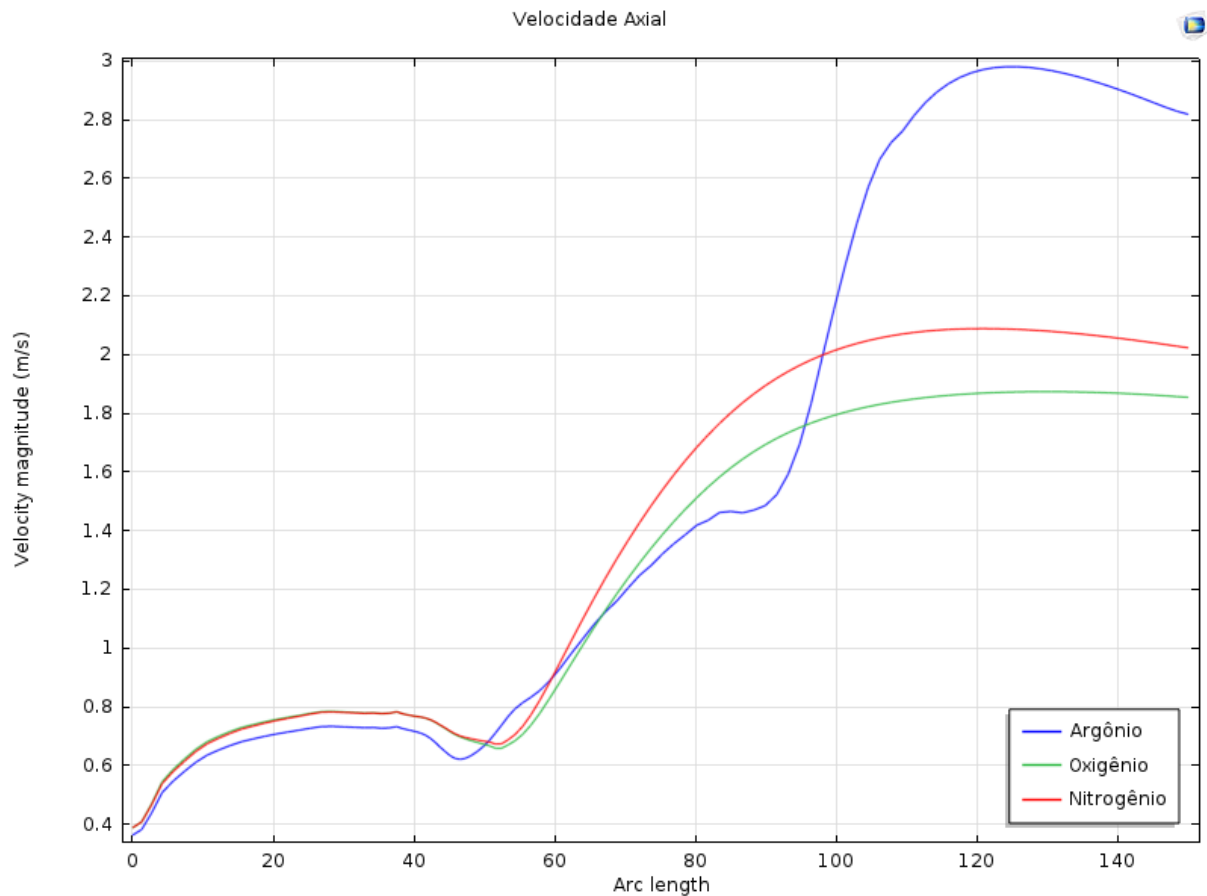
Figura 40 – Distribuição radial de temperatura na altura da terceira espira



Fonte: Elaboração própria, 2017.

Em se tratando do campo de velocidades calculado, considerando o fluxo de gás um escoamento laminar compressível, os valores encontrados foram razoavelmente próximos para todos os fluxos de gases estudado. A figura 41 mostra a comparação da velocidade mensurada no centro da tocha. O Argônio apresentou um campo de velocidades com magnitude levemente maior que os outros dois gases. Neste caso, evidencia-se que as modificações mais significativas apresentadas até aqui se tratam dos campos de temperatura, e não dos campos de velocidade. Como o interesse maior aqui são realmente nos campos de temperatura, as discussões apresentadas se concentram mais fortemente nestes resultados.

Figura 41 – Velocidade do gás no centro da tocha



Fonte: Elaboração própria, 2017.

À seguir, introduziremos as modificações na geometria da bobina da tocha, para um fluxo de gás Argônio nas mesmas condições dos modelos já apresentados.

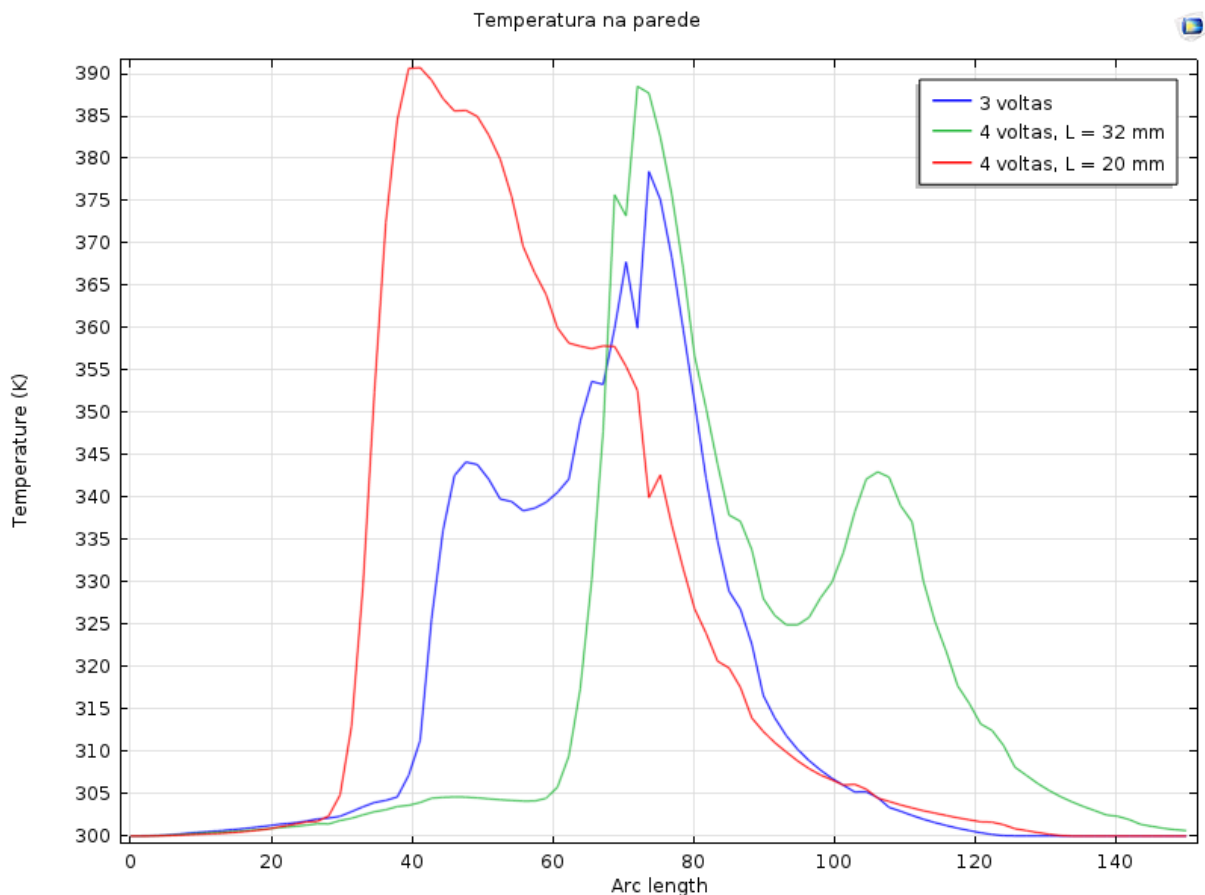
6.2 Modificações na geometria da tocha

Por ser o gás de trabalho mais comumente utilizado na literatura, as modificações na geometria proposta serão admitidas para o modelo de tocha que utiliza o Argônio. Roth (1995) afirma que os gases nobres, como o Argônio, são purificados com relativa facilidade, geralmente não sofrem reações plasmáticas ou dissociação e, portanto, sofrem menos processos físicos que podem afetar as medições experimentais feitas neles. Por este motivo é mais extenso na literatura as simulações e experimentos práticos utilizando este gás.

Em relação aos resultados do campo de temperaturas, observa-se que, na parede, a geometria com 4 voltas e menor espaçamento entre as espiras obteve o valor máximo de temperatura, ligeiramente maior que a geometria de 4 voltas, com espaçamento

padrão. Os maiores valores de temperatura na parede para os três casos concentraram-se na região da bobina, como pode ser visto na figura 42. Aqui, mais uma vez, devido à natureza do processo de transferência de energia eletromagnética para o gás de trabalho, proveniente da potência RF aplicada na bobina, as maiores temperaturas se concentram em regiões próximas à parede e em alturas referentes à posição das espiras da bobina.

Figura 42 – Temperatura nas paredes do tubo externo da tocha para as geometrias propostas



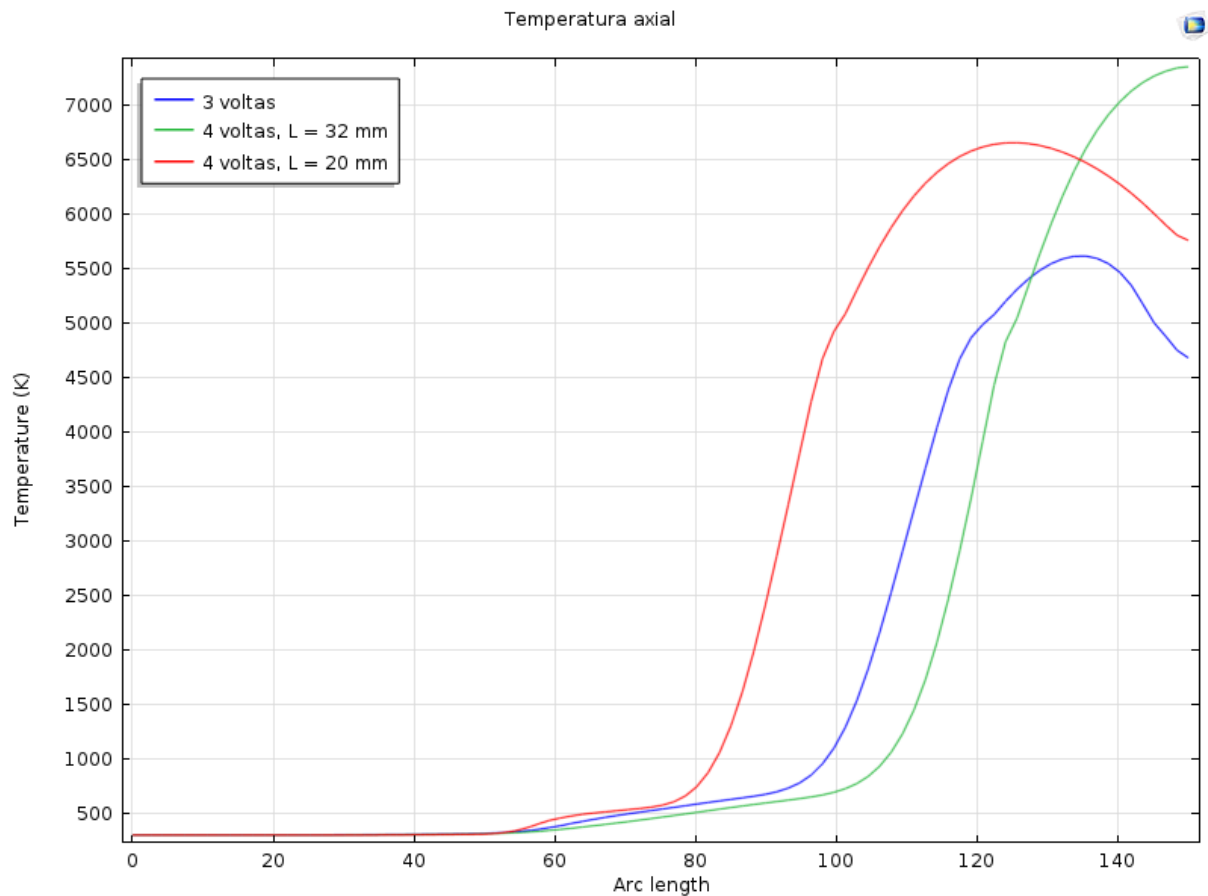
Fonte: Elaboração própria, 2017.

Em relação à distribuição axial de temperatura, demonstrada na figura 43, observa-se que há uma tendência no aumento da temperatura quando incrementa-se o número de espiras. Por conta da distribuição espacial das espiras, a concentração de maiores temperaturas na região axial se desloca espacialmente para próximo à saída da tocha para a geometria com 4 espiras e espaçamento padrão de 32 mm, apresentando valores ligeiramente maiores que a geometria com 4 espiras e menor espaçamento, no caso, 20 mm.

Já em se tratando da distribuição de temperatura na região em que as simulações acusaram as maiores concentrações de temperatura, que são na altura da terceira espira,

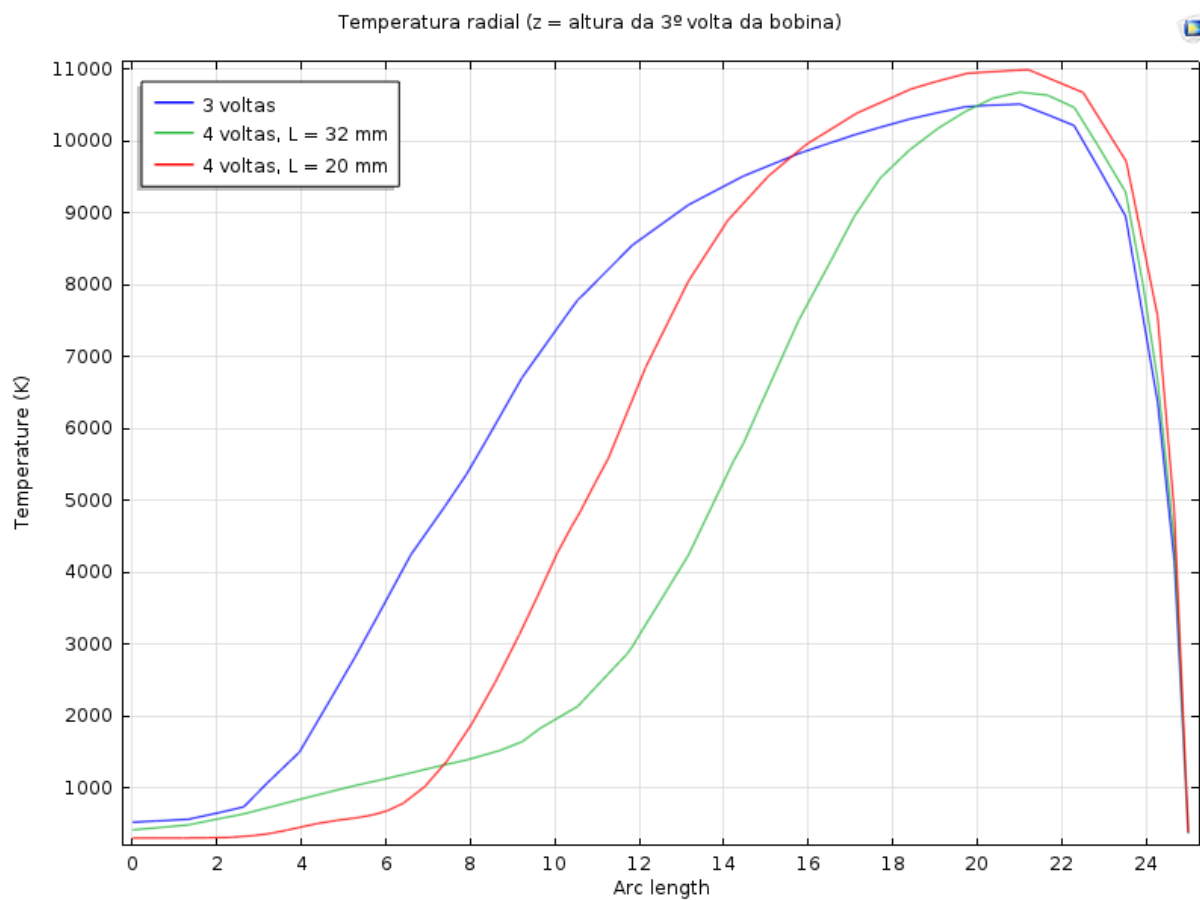
mostradas no gráfico da figura 44, observa-se que o aumento no número de espiras, seguido do decremento no espaçamento das mesmas ocasiona incremento na distribuição de temperaturas em função do arco aqui definido. Evidentemente, um maior número de espiras irá acarretar em uma maior tensão induzida e, conseqüentemente, corrente induzida, que é a fonte principal de transferência de energia ao plasma. Conseqüentemente, isto irá contribuir para que o plasma alcancem temperaturas ligeiramente maiores. A aproximação das espiras irá alterar a distribuição espacial do campo magnético, o que também contribui para tal distribuição, como evidenciado nas simulações. Tais resultados podem ser apreciados à seguir.

Figura 43 – Temperatura central na tocha para as geometrias propostas



Fonte: Elaboração própria, 2017.

Figura 44 – Distribuição radial de temperatura na altura da terceira espira de cada geometria



Fonte: Elaboração própria, 2017.

No próximo capítulo, apresentaremos as conclusões acerca dos resultados das simulações obtidas, bem como sugestões para trabalhos futuros.

7 Conclusão e trabalhos futuros

O presente trabalho se propôs a adaptar um modelo de tocha de plasma de acoplamento indutivo e resolvê-lo, utilizando as equações MHD e submetendo-o à certas condições iniciais e de contorno, bem como a algumas simplificações. Tais resultados preliminares demonstraram as possíveis influências na formação do plasma, quando se modifica o gás de trabalho ou alguns parâmetros na geometria da tocha, mais especificamente na composição da bobina.

Primeiramente, em se tratando da utilização do COMSOL como ferramenta computacional, constatou-se que o mesmo proporciona ganho de tempo e de recursos humanos, bem como uma otimização geral no processo de modelamento matemático e multifísico. Devido à sua interface amigável e ao fato de não haver um pré-requisito quanto à programação de computadores avançada, esta ferramenta otimiza o trabalho. Além disso, a apresentação de uma interface para modelamento de tochas de plasma de acoplamento indutivo proporciona um acoplamento entre as equações, eliminando possíveis esforços desnecessários por parte do usuário. No entanto, apesar de apresentar as vantagens acima citadas, pelo fato de o mesmo ser de código fechado, existe uma grande limitação em se tratando da escolha do método numérico a ser programado para resolver um problema em específico. Até a presente data de realização deste trabalho, o COMSOL não dispõe de uma ferramenta que possibilite o usuário de escolher e programar o método numérico para a resolução do modelo. Quando é o caso, a utilização de ferramentas de código aberto acaba por se tornar mais vantajoso neste sentido, a exemplo do código computacional OpenFoam, que dá margem ao usuário de alterar o seu código fonte. Portanto, a escolha de qual ferramenta computacional será utilizada depende desta prévia análise por parte do pesquisador.

Quanto à validação do modelo, observou-se que as propriedades de transportes dadas pelo COMSOL apresentaram uma boa aproximação, comparando-se com os resultados experimentais e calculados por [Murphy e Arundelli \(1994\)](#) e [Murphy \(2000\)](#). Tais resultados evidenciam o quão bem estas propriedades dadas pelo software representam as propriedades de transporte reais dos gases utilizados, fator este bastante impactante para a confiabilidade dos resultados das simulações apresentados.

Quanto aos resultados obtidos, verificou-se que os mesmos são consistentes com as equações apresentadas no referencial teórico desta dissertação, principalmente em se tratando das equações para MHD, devido ao fato de que as mesmas são equações que dependem fortemente da temperatura, e tais simulações demonstraram como a dependência destas equações com a temperatura influenciaram nos resultados obtidos. Para modificações no gás de trabalho, observou-se que para todos os casos o argônio

apresentou maiores temperaturas, tanto axialmente quanto radialmente (na altura da terceira espira), bem como nas paredes da tocha. Em todos os casos as maiores temperaturas se concentraram em regiões próximas à parede, e não no centro da tocha. Isto era de se esperar, por se tratar de uma tocha de acoplamento indutivo, ou seja, esperava-se que as regiões de maiores temperaturas se concentrassem em regiões da tocha mais próximas à bobina. Observou-se também que as distribuições de temperatura no interior da tocha se mostraram mais uniformes para o oxigênio e nitrogênio. Por conta da mobilidade da espécie, gases mais leves têm uma maior condutividade térmica. Como pode ser observado em (MURPHY; ARUNDELLI, 1994) ou (MURPHY, 2000), o oxigênio e nitrogênio apresentam maiores condutividades térmicas para as faixas de temperatura calculadas em comparação com os dados apresentados para o argônio, que podem ser também consultados em (LANCASTER, 1986), também mostrado pela figura 3. Outro fator de interesse foi a observação da temperatura nas paredes da tocha. Como alcançam altas temperaturas, é importante observar a temperatura de fusão do material da parede. O quartzo tem ponto de fusão na ordem de $973K$, e a maior temperatura registrada na parede foi para o argônio, de $750K$. As mais altas temperaturas na parede se concentram na região da bobina, o que era de se esperar, devido à ação do campo magnético.

Em se tratando das modificações na bobina da tocha, mostrou-se que o aumento no número de espiras aumenta as temperaturas central, radial na altura da terceira espira - que é onde se encontra a máxima temperatura - e na saída da tocha. Já a diminuição do espaçamento entre as espiras ocasionou um aumento na temperatura máxima alcançada pela tocha. Tais resultados preeliminares demonstram que é possível controlar alguns parâmetros do plasma modificando simples parâmetros na geometria da bobina. Tais resultados eram esperados devido ao comportamento do plasma ser semelhante a um transformador, sendo que em um transformador os parâmetros relacionados à espiras modificam parâmetros como a indutância mútua, que no plasma dependem de propriedades físicas do mesmo, como é demonstrado em (SALAZAR et al., 2012). Tais modificações propostas podem ser desejáveis quando se desenha uma tocha para uma aplicação específica, e os resultados sugerem como essas modificações propostas irão interferir nos parâmetros do plasma, principalmente na distribuição de temperaturas.

Em relação aos resultados obtidos e às hipóteses levantadas relacionadas aos objetivos deste estudo, conclui-se que, realmente, a modificação nos gases de trabalho acarretam grandes mudanças, principalmente no perfil de temperaturas, justamente pela hipótese levantada, que menciona a dependência das equações deste modelo com as propriedades de transporte dos gases escolhidos, que por sua vez são função da temperatura atingida. A validação de tais propriedades configuradas no COMSOL foram feitas comparando-se os resultados presentes no modelo com os resultados de (MURPHY; ARUNDELLI, 1994), que por sua vez apresentaram boa aproximação com

resultados experimentais da literatura. O mesmo é válido para as modificações na geometria, pelo fato citado do comportamento da tocha de plasma semelhante a um transformador, sendo o número de espiras função de propriedades físicas do plasma, e, conseqüentemente, o próprio campo magnético gerado pelas espiras dependem da geometria da bobina, como número de espiras e distribuição espacial da mesma.

Em trabalhos futuros, pode-se acrescentar nos resultados das simulações um gráfico demonstrando o teor de ionização em cada região da tocha, verificando assim os resultados fornecidos pela equação de Saha. Podem também ser levados em conta misturas de gases de trabalho ou outras alterações na geometria, como no formato e distribuição dos tubos, por exemplo. Modificações nos materiais empregados na construção da tocha também são propostos, levando a análise a um patamar de aplicação mais prática, como por exemplo uma análise dos custos dos materiais envolvidos, bem como dos gases. Ainda em se tratando dos materiais empregados, uma análise do desgaste de material na parede da tocha pode ser também empregada. Finalmente, são propostas simulações em três dimensões, que irão acrescentar ao modelo contribuições mais realísticas, em se tratando da influência da geometria, por exemplo, e até mesmo simulações em código PIC (*Particle in Cel*) eletromagnético.

Referências

- AVILA, J. A. J. **Introdução ao método dos elementos finitos**. [S.l.]: Departamento de matemática e estatística - DEMAT (UFSJ), 2010.
- BAHOUH, H.; REBLAI, S.; ROCHETTE, D.; VACHER, D.; DUDECK, M. Modelling of an inductively coupled plasma torch with argon at atmospheric pressure. **Physica Scripta**, IOP Publishing, v. 2014, n. T161, p. 014008, 2014.
- BERNARDI, D.; COLOMBO, V.; GHEDINI, E.; MENTRELLI, A. Three-dimensional modelling of inductively coupled plasma torches. **The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics**, Springer, v. 22, n. 1, p. 119–125, 2003.
- BITTENCOURT, J. A. **Fundamentals of plasma physics**. National Institute for Space Research: Springer, 2004.
- BREZMES, A. O.; BREITKOPF, C. Fast and reliable simulations of argon inductively coupled plasma using comsol. **Vacuum**, Elsevier, v. 116, p. 65–72, 2015.
- CHEN, X.; SUGASAWA, M.; KIKUKAWA, N. Modelling of the heat transfer and fluid flow in a radio-frequency plasma torch with argon-hydrogen as the working gas. **Journal of Physics D: Applied Physics**, IOP Publishing, v. 31, n. 10, p. 1187, 1998.
- COLOMBO, V.; GHEDINI, E. 3-d modeling of icp torches. **High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes**, Begel House Inc., v. 11, n. 2, 2007.
- COMSOL MULTYPHISICS. 2017. Disponível em: <www.comsol.com>.
- DOLBEC, R.; BOULOS, M.; BOUCHARD, E.; KUPPUSWAMY, N. Nanopowders synthesis at industrial-scale production using the inductively-coupled plasma technology. In: IEEE. **Advanced Nanomaterials and Emerging Engineering Technologies (ICAN-MEET), 2013 International Conference on**. [S.l.], 2013. p. 21–24.
- FORTUNA, A. de O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2102.
- IKHLEF, N.; LEROY, O.; MEKIDECHE, M. Computational model of thermal-fluid flow in a radio-frequency plasma torch. **Contributions to Plasma Physics**, Wiley Online Library, v. 54, n. 8, p. 735–745, 2014.
- ISOLDI, M. **Construção de uma tocha indutiva para obtenção de plasma térmico à pressão atmosférica**. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2012.
- JIA, C.; LINHONG, J.; YU, Z.; YIXIANG, X. Fluid model of inductively coupled plasma etcher based on comsol. **Journal of semiconductors**, n. 3, p. 19–24, 2010.
- LANCASTER, J. F. **The physics of welding**. [S.l.]: Pergamon press, 1986.
- LERMEN, R. T. Desenvolvimento de uma tocha de plasma híbrida para o processamento de materiais. 2011.

- LIEBERMAN, A. J. L. M. A. **Principles of plasma discharges and materials processing**. New Jersey: Wiley, 2005.
- MERKHOUF, A.; BOULOS, M. Distributed energy analysis for an integrated radio frequency induction plasma system. **Journal of Physics D: Applied Physics**, IOP Publishing, v. 33, n. 13, p. 1581, 2000.
- MIYAO, Y. et al. Desenvolvimento de um gerador de plasma de microondas para uso em cvd e sua aplicação na síntese de filmes de carbono amorfo hidrogenado. [sn], 2004.
- MOSTAGHIMI, J.; BOULOS, M. I. Effect of frequency on local thermodynamic equilibrium conditions in an inductively coupled argon plasma at atmospheric pressure. **Journal of Applied Physics**, AIP, v. 68, n. 6, p. 2643–2648, 1990.
- MOSTAGHIMI, J.; PROULX, P.; BOULOS, M. I. A two-temperature model of the inductively coupled rf plasma. **Journal of applied physics**, AIP, v. 61, n. 5, p. 1753–1760, 1987.
- MURPHY, A. Transport coefficients of hydrogen and argon–hydrogen plasmas. **Plasma Chemistry and Plasma Processing**, Springer, v. 20, n. 3, p. 279–297, 2000.
- MURPHY, A.; ARUNDELLI, C. Transport coefficients of argon, nitrogen, oxygen, argon–nitrogen, and argon–oxygen plasmas. **Plasma Chemistry and Plasma Processing**, Springer, v. 14, n. 4, p. 451–490, 1994.
- OLTHOFF, J. K.; GREENBERG, K. The gaseous electronics conference rf reference cell—an introduction. **Journal of research of the National Institute of Standards and Technology**, US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, v. 100, n. 4, p. 327, 1995.
- ROTH, J. R. **Industrial Plasma Engineering**. London: IOP Publishing Ltd, 1995.
- SADIKU, M. N. O. **Elementos de eletromagnetismo**. Porto Alegre: Bookman, 2012.
- SALAZAR, A. O.; MANIÇOBA, G. G.; AMADO, J. A. D.; OLIVEIRA, J. A. B. de; DUBUT, J. P.; LOCK, A. S.; QUINTAES, F. de O. Estudo e simulação de uma tocha de plasma térmico com acoplamento indutivo. **VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica - CONEM**, ABCM, 2012.
- SOUZA, R. M. de. **O método dos elementos finitos aplicado ao problema de condução de calor**. [S.l.]: Núcleo de instrumentação e computação aplicada à engenharia, 2003.
- TECNOLOGIA de Plasma. [S.l.]: UERJ - Universidade Estadual do Rio de Janeiro, 2011.
- VERSTEEG, W. M. H. K. **An introduction to computational fluid dynamics**. Harlow: Pearson Prentice Hall, 2007.
- VORONOV, M.; HOFFMANN, V.; BUSCHER, W.; ENGELHARD, C. Computational model of inductively coupled plasma sources in comparison to experimental data for different torch designs and plasma conditions. part ii: theoretical model. **Journal of Analytical Atomic Spectrometry**, Royal Society of Chemistry, v. 32, n. 1, p. 181–192, 2017.

VORONOV, M.; HOFFMANN, V.; BUSCHER, W.; ENGELHARD, C. Computational model of inductively coupled plasma sources in comparison to experimental data for different torch designs and plasma conditions. part ii: theoretical model. **Journal of Analytical Atomic Spectrometry**, Royal Society of Chemistry, v. 32, n. 1, p. 181–192, 2017.

XUE, S.; PROULX, P.; BOULOS, M. I. Extended-field electromagnetic model for inductively coupled plasma. **Journal of Physics D: Applied Physics**, IOP Publishing, v. 34, n. 12, p. 1897, 2001.