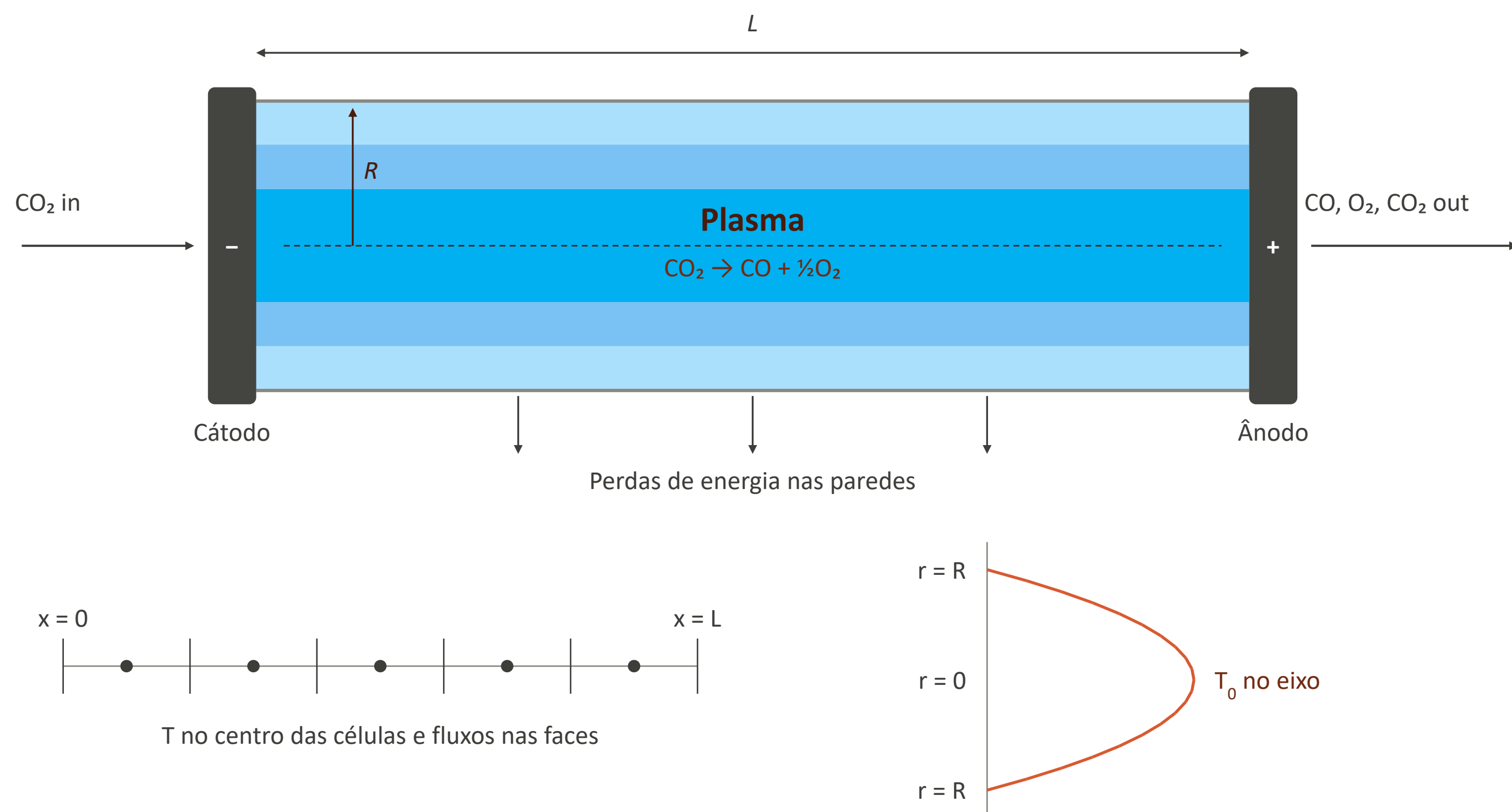


Introdução

Os plasmas de baixa temperatura (LTP) são uma via promissora para converter gases poluentes em produtos de valor acrescentado, como na dissociação do CO₂ em CO e O₂. A temperatura do gás é um parâmetro-chave neste processo, influenciando a densidade do gás, e controla as reações entre partículas pesadas — pelo que deve ser calculada de forma independente e não imposta.

Neste trabalho implementa-se a equação para a temperatura do gás no LoKI-1D, um modelo fluido 1D em desenvolvimento por André Filipe, Bianca Kolling e Diogo Franco, e aplica-se a um plasma de CO₂ para obter a evolução temporal da temperatura e, assim, verificar o modelo através da comparação com um benchmark publicado na literatura.

LoKI-1D



Equação para a temperatura do gás

$$NC_p \frac{\partial T_g}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T_g) - \frac{\lambda [T_g - T_{nw}]}{\Lambda^2} + Q_{in}$$

$$Q_{in} = \sum_{r=volume} R_i \Delta H_i + f_w \sum_{r=wall} R_i \Delta H_i + \frac{\Theta_{el}}{N} N n_e$$

T_g

Temperatura do gás.

$N C_p$

Capacidade térmica mássica.

$\nabla \cdot (\lambda \nabla T_g)$

Termo de condução axial.

Q_{in}

Termo fonte.

$\frac{\lambda [T_g - T_{nw}]}{\Lambda^2}$

Termo de perdas por condução radial até à parede.

Λ é o comprimento de difusão térmica que é aproximadamente $R/\sqrt{8}$ sendo R o raio do reator.

Q_{in}

$\sum_{r=volume} R_i \Delta H_i$

Energia transferida devido às reações químicas no reator, excetuando a parede.

$f_w \sum_{r=wall} R_i \Delta H_i$

Energia proveniente das reações na parede do reator.

O fator f_w representa a fração dessa energia que não é absorvida pela parede e vai contribuir para o aquecimento do gás.

$\frac{\Theta_{el}}{N} N n_e$

Transferência de energia cinética dos eletrões acelerados para as espécies pesadas através de colisões elásticas.

Simulação

Benchmark:

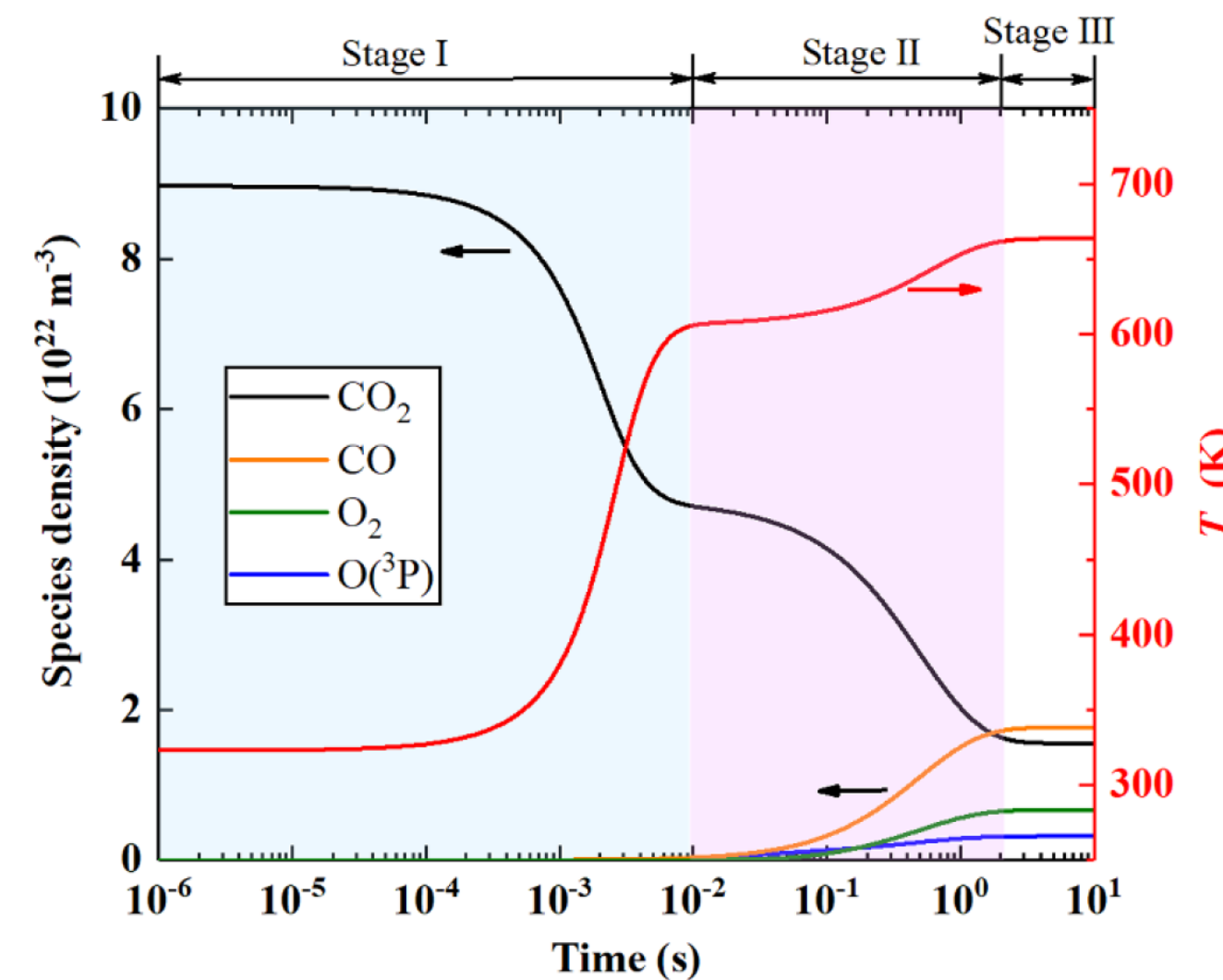


Figura 1: Resultado pretendido para a evolução temporal da temperatura do gás (linha a vermelho) e benchmark para a validação do código. Retirado de [1].

Devido ao elevado esforço computacional e à tendência para a simulação divergir com os parâmetros do autor do benchmark, apenas foi possível obter resultados até $10^{-5}s$

Além disso, nesta fase inicial, alterou-se os parâmetros de simulação para garantir maior estabilidade.

1. Condições de Fronteira

- Diferença de potencial: 400V
- Temperatura nas paredes: 323K

2. Condições Iniciais

- Pressão: 1000 Pa | 500 Pa
- Temperatura do gás: 323K

3. Geometria e Domínio

- Raio: 10 mm
- Comprimento: 4mm

3. Parâmetros da simulação

- Passo de tempo variável
- Discretização de 100 elementos

Resultados:

Foi aumentado, artificialmente, o calor expelido em reações como forma de acelerar as trocas de calor e observar variações temporais e espaciais de T_g em tempo útil.

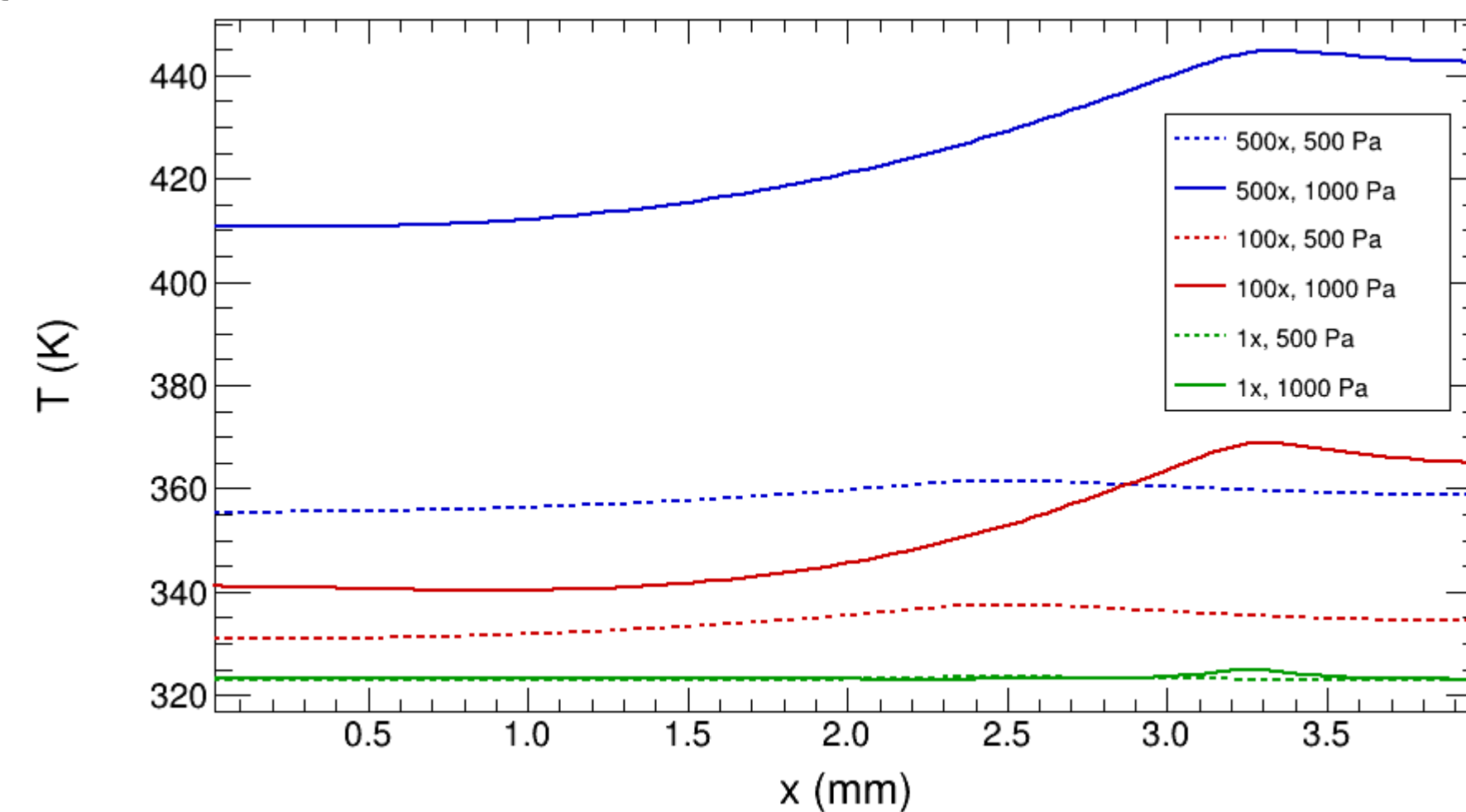


Figura 2: Evolução espacial da temperatura do gás, em $t=1e-5s$, para diferentes pressões (1000Pa e 500Pa) e com diferentes ampliações.

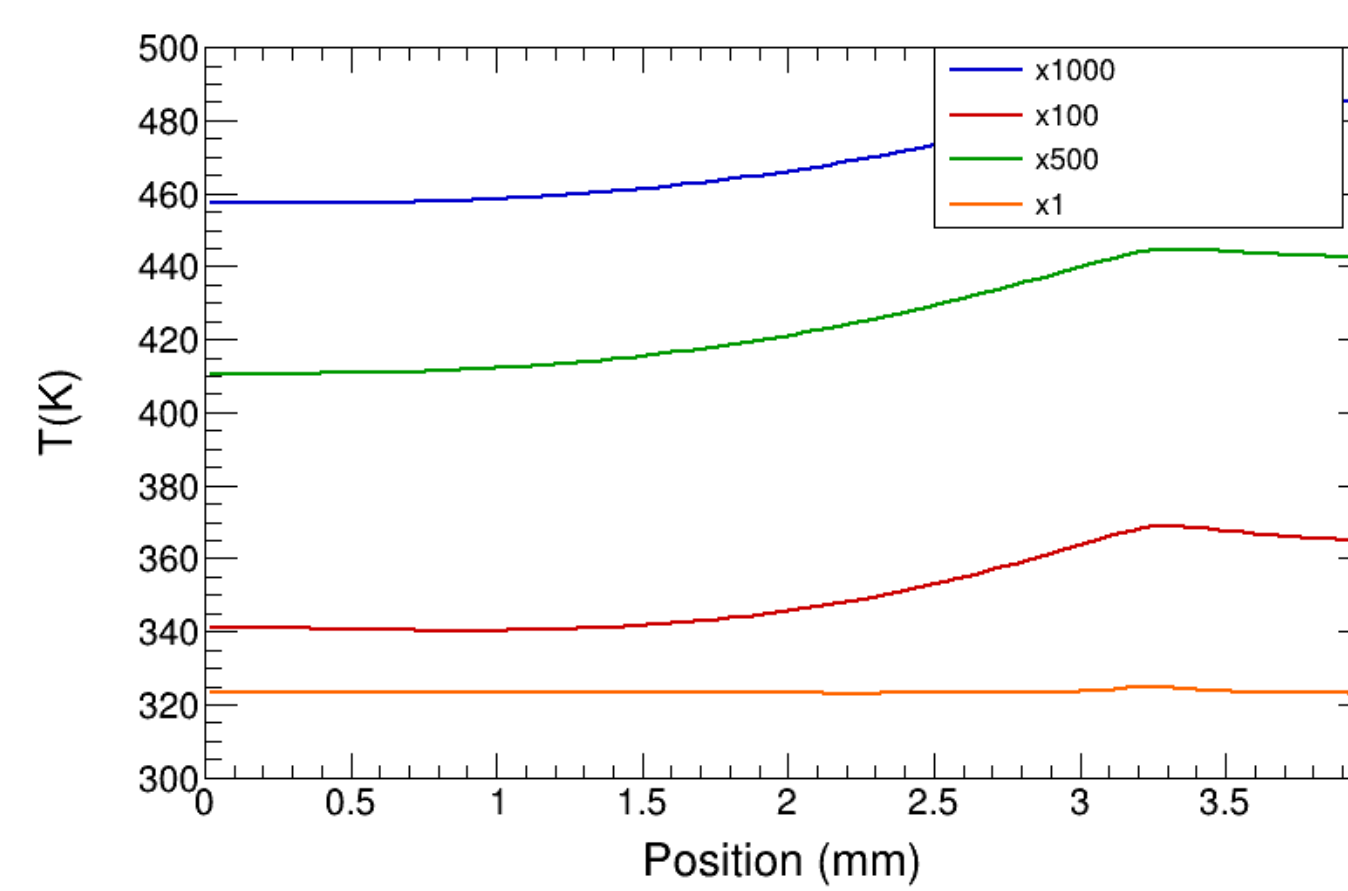


Figura 3(a): Evolução temporal da temperatura em três pontos do domínio.

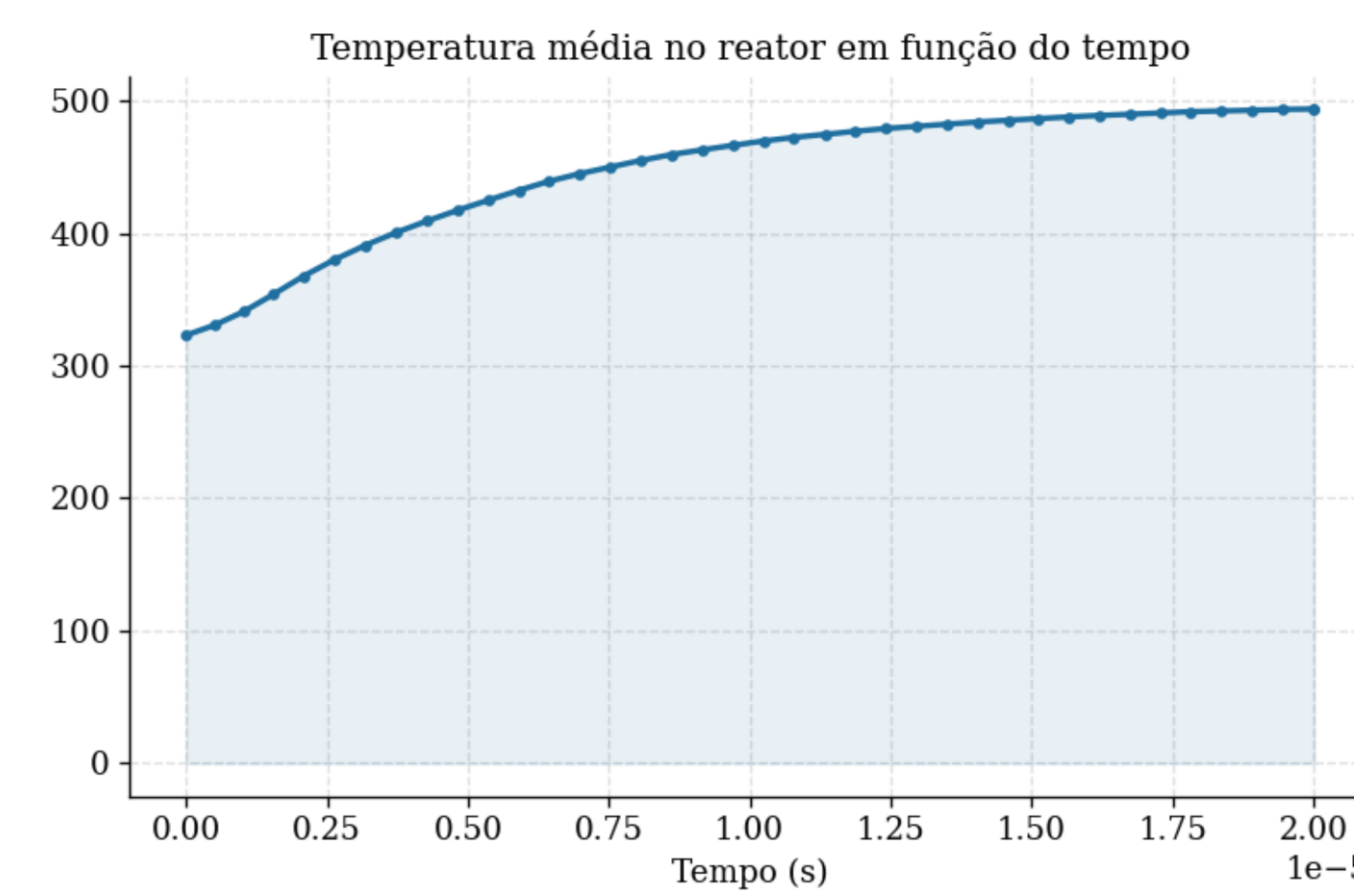


Figura 3(b): Temperatura média no reator ao longo do tempo para 1000 Pa

Conclusões:

- Foi implementada a equação para a temperatura do gás no modelo LoKI-1D: condução axial, perda radial e termo fonte, tendo-se obtido resultados promissores ainda que para tempos de simulação demasiado curtos para um benchmarking completo.

Trabalho Futuro:

- Estender o tempo de simulação para atingir o equilíbrio térmico.

Referências:

- [1] Liu, Y., Silva, T., Dias, T. C., Viegas, P., Zhao, X., Du, Y., He, J., & Guerra, V. (2025). Gas heating and plasma chemistry in low-pressure CO₂ plasmas. Journal of CO₂ Utilization, 97, 103128. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2025.103128>
- [2] Vialletto, L., Van De Steeg, A. W., Viegas, P., Longo, S., Van Rooij, G. J., Van De Sanden, M. C. M., Van Dijk, J., & Diomede, P. (2022). Charged particle kinetics and gas heating in CO₂ microwave plasma contraction: comparisons of simulations and experiments. Plasma Sources Science and Technology, 31(5), 055005. <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ac56c5>
- [3] Altin, M., Viegas, P., Vialletto, L., Van Rooij, G. J., & Diomede, P. (2024). Spatio-temporal analysis of power deposition and vibrational excitation in pulsed N₂ microwave discharges from 1D fluid modelling and experiments. Plasma Sources Science and Technology, 33(4), 045008. <https://doi.org/10.1088/1361-6595/ad3848>