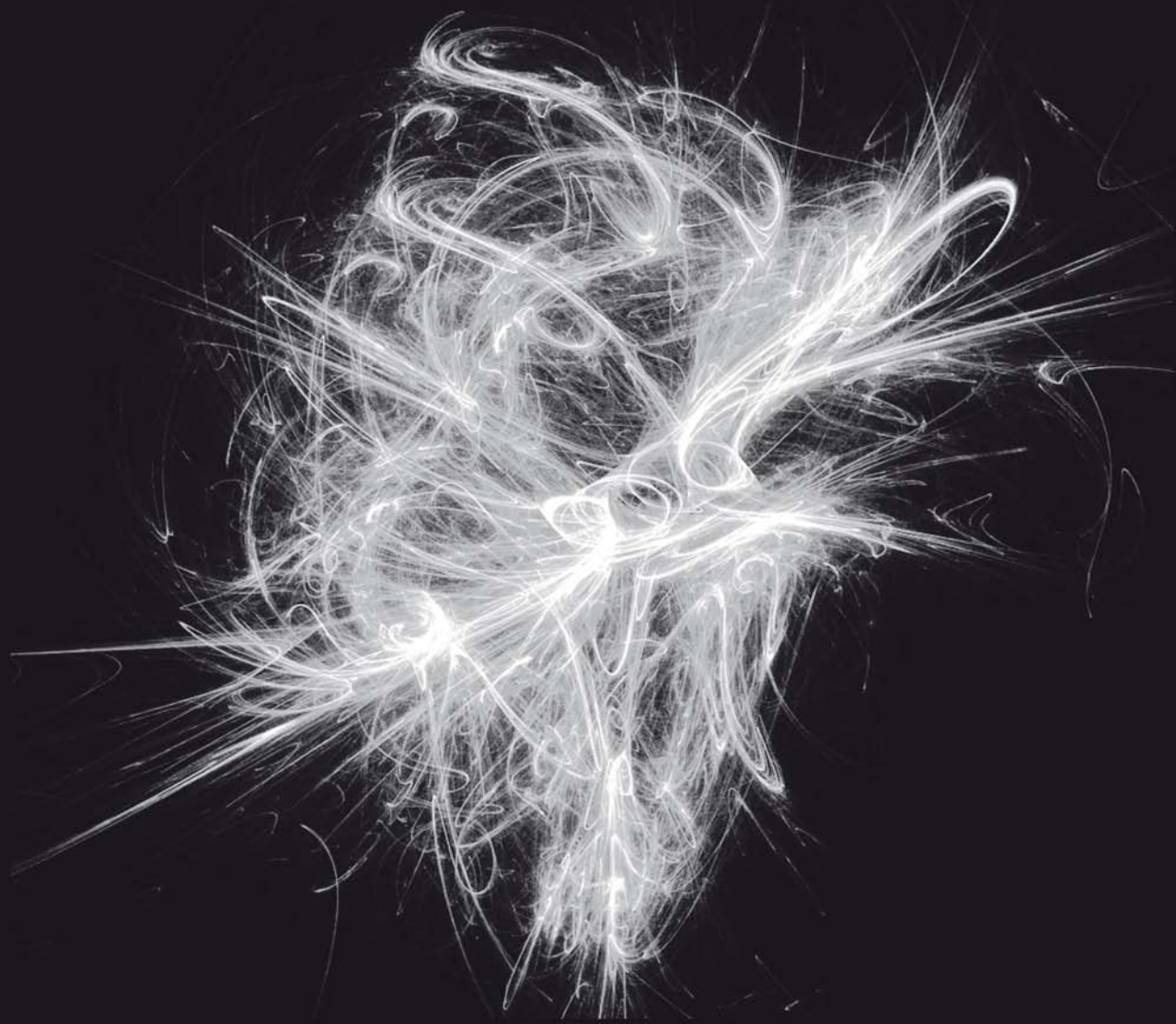


Simulación de una descarga eléctrica a través de software libre

Mario Ibañez Olvera
José Luis Tapia Fabela
Juan Alfonso Salazar Torres



Simulación de una descarga eléctrica a través de software libre



Simulación de una descarga eléctrica a través de software libre

Mario Ibañez Olvera
José Luis Tapia Fabela
Juan Alfonso Salazar Torres



UAEM | Universidad Autónoma
del Estado de México

Dr. en D. Jorge Olvera García
Rector

Dra. en Est. Lat. Ángeles Ma. del Rosario Pérez Bernal
Secretaria de Investigación y Estudios Avanzados

M. en P.E.E.S. Javier Margarito Serrano García
Coordinador de la UAP Tlanguistengo

Mtra. en Hum. Blanca Aurora Mondragón Espinoza
*Directora de Difusión y Promoción de la Investigación
y los Estudios Avanzados*

Diseño y producción editorial: Ediciones Eón

ISBN: 978-607-9426-03-3

Primera edición: enero de 2015

© Universidad Autónoma del Estado de México
Instituto Literario núm. 100 ote.
C.P. 50000, Toluca, México
<<http://www.uaemex.mx>>

© Ediciones y Gráficos Eón, S.A. de C.V.
Av. México-Coyoacán No. 421
Col. Xoco, Deleg. Benito Juárez
México, D.F., C.P. 03330
Tels.: 5604-1204 / 5688-9112
administracion@edicioneon.com.mx
www.edicioneon.com.mx

Este libro fue sometido a revisión por pares ciegos con un resultado positivo conforme a los criterios editoriales de la Secretaría de Investigación y Estudios Avanzados. El contenido total de la obra es responsabilidad de los autores.

Se prohíbe la reproducción total o parcial de esta obra –incluyendo el diseño tipográfico y de portada– sea cual fuere el medio, electrónico o mecánico, sin el consentimiento por escrito del titular de los derechos patrimoniales.

Impreso y hecho en México / *Printed and made in Mexico*

Índice

Capítulo 1. PRESENTACIÓN	
1.1 Contexto	11
Capítulo 2. COMSOL MULTIPHYSICS	
2.1 Análisis de elementos finitos	15
2.2 Método de los elementos finitos	15
2.3 Modelado con software COMSOL Multiphysics	17
2.4 Modelado de una descarga de arco eléctrico	17
2.5 Geometría	18
2.6 Distribución de temperatura en el volumen	19
2.7 Arco eléctrico en 2D axial	20
Capítulo 3. CODE SATURNE 2.0.4	
3.1 Modelo de un arco eléctrico con Code Saturne 2.0.4	23
3.2 Características termodinámicas y coeficientes de transporte	23
3.3 Geometría y generación de la malla	24
3.4 Condiciones de frontera	25
3.5 Condiciones de frontera dentro de la geometría	27
3.6 Arco eléctrico en 3D	29
Capítulo 4. APLICACIÓN DEL ARCO ELÉCTRICO	
4.1 Arco eléctrico para la síntesis de nanoestructuras	31
4.2 Geometría del reactor	32
4.3 Malla y tipo de células para la geometría del reactor	35
4.4 Condiciones de frontera con el método de término fuente	38
4.5 Arco eléctrico con el método de término fuente	40
4.6 Condiciones de frontera utilizando las ecuaciones	41
4.7 Modelo del reactor para síntesis de NEC	44

Capítulo 5. MODELOS ADICIONALES DEL REACTOR	
5.1 Temperatura en las paredes del reactor	47
5.2 Condiciones de frontera	48
5.3 Malla y tipo de células para la geometría del volumen	51
5.4 Condiciones de frontera de la geometría	51
5.5 Espectroscopia de Emisión Óptica	52
5.6 Paredes interiores del reactor	53
Capítulo 6. ARCO ELÉCTRICO ENTRE DOS ELECTRODOS	
6.1 Geometría del modelo de dos electrodos paralelos	57
6.2 Malla de la geometría	58
6.3 Condiciones de frontera aplicadas a la geometría	59
6.4 Arco eléctrico entre dos electrodos	62
Capítulo 7. MOVIMIENTOS DEL ARCO ELÉCTRICO	
7.1 Condiciones de frontera	63
7.2 Movimiento del arco eléctrico	66
Capítulo 8. ARCO ELÉCTRICO EN TRES ELECTRODOS	
8.1 Arco eléctrico en tres electrodos	69
8.2 Geometría del modelo del reactor de arco eléctrico	69
8.3 Malla de la geometría	70
8.4 Condiciones de frontera aplicadas a la geometría	71
8.5 Modelo del arco eléctrico en tres electrodos	74
Apéndice A. Algunas recomendaciones	77
Apéndice B. Fuentes consultadas	79

Capítulo 1

Presentación

En la actualidad, diversos grupos de investigadores enfocan su atención en la generación del plasma debido a las múltiples aplicaciones a las que se le puede orientar [Mo-2008]. Dicha generación no está limitada solamente a ionizar un gas en alguna atmósfera controlada dentro de algún reactor, sino también a identificar y estudiar diversos parámetros que gobiernan el óptimo funcionamiento del sistema y el aprovechamiento de la energía [Va-2003].

En la literatura se encuentran diversas aplicaciones del plasma y éstas dependen de la morfología y características de los reactores, así como de las propiedades físicas y químicas del plasma [Va-2003]. Para controlar la energía necesaria para generar el plasma y asignarle alguna aplicación óptima de acuerdo con las expectativas planteadas, se debe realizar un diseño y un análisis de un generador eléctrico, que se empleará como fuente de ionización. Además, una vez generado el plasma, es importante estudiar los parámetros principales del plasma, como su temperatura, la densidad de especies y su conductividad, esto con el objetivo de establecer los puntos óptimos de operación y las características que mejor favorecen a las aplicaciones que se le darán al sistema [Ro-1995].

Una de las principales aplicaciones de los reactores de plasma es degradar gases tóxicos, como CO_2 o H_2S [Mo-2008]; para lograr estas degradaciones se emplean reactores con diferentes configuraciones en los electrodos. En el caso que nos ocupa, se modelaron diferentes prototipos de reactores con distintas configuraciones, mismos que fueron diseñados a partir de reactores ya existentes en el Laboratorio de Aplicación de Plasma (LAP) del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) y en donde se han hecho pruebas para verificar la funcionalidad de los reactores y han degradado hasta 90%, por eso es de gran importancia modelar los reactores de plasma, con el fin de que exista un soporte físico matemático que



ayude al mejoramiento del diseño tanto en la geometría como en su eficiencia eléctrica.

Esto es posible gracias a que en el modelo se pueden modificar parámetros sin afectar el diseño real del reactor. Una vez generado el modelo y obtenidos los resultados, se pueden sugerir mejoras al reactor original del laboratorio, aunque para llegar a ese punto, donde el modelo pueda proporcionar datos que puedan ayudar al desempeño eficiente del reactor, es necesario empezar con elementos básicos de éste, que, en este caso, sería crear un arco eléctrico en configuración paralela de dos electrodos para posteriormente llegar a una configuración de tres electrodos, con un arco eléctrico en movimiento.

Por otro lado, la fascinación por el dominio de la miniaturización de las nuevas tecnologías ha llevado a la nanociencia y la nanotecnología a convertirse en las fronteras científicas más importantes, en donde confluyen diferentes áreas. La gran evolución de la nanoera nos ha llevado a sintetizar elementos, teniendo como resultado materiales con cualidades físicas y químicas extraordinarias.

Las nanoestructuras de carbono (NEC) constituyen una clase de materiales con propiedades sobresalientes, entre las que destacan una alta conductividad térmica y eléctrica [Pa-2003], una buena estabilidad a altas temperaturas, propiedades de resistencia mecánica y alta flexibilidad; también presenta alta dureza similar a la de los diamantes. La síntesis de las NEC a gran escala se hace necesaria debido a la cantidad de propiedades asombrosas que éstas ofrecen [Pa-2003].

Los métodos más aplicados para la síntesis de NEC son por medio de ablación láser, deposición química de vapor y arco eléctrico, entre otros, donde el arco eléctrico destaca por los tiempos cortos de síntesis y poca formación de carbón amorfo; además, promete ser un método por el que se obtienen NEC de alta pureza y una cantidad aceptable [Ju-2004].

La síntesis de las NEC se puede realizar mediante diferentes métodos; por ejemplo, en el LAP del ININ se usa el arco eléctrico generado por dos electrodos de carbono. Este reactor se modeló para obtener diferentes resultados y poder verificar y soportar matemáticamente su funcionamiento [Ju-2004].

Asimismo, existen morfologías diseñadas para generar descargas de plasma de mayor volumen, tal es el caso de una descarga de arco eléctrico deslizante en configuración de tres electrodos divergentes [Ga-2012] [Sa-2010] [Sa-2011], la cual evoluciona un arco eléctrico desde un punto inicial donde los electrodos son más cercanos, hasta el punto más distante entre ellos.

En este trabajo se sientan las bases para modelar dicha descarga de plasma, partiendo inicialmente con un modelo de arco deslizante en dos electrodos.



1.1 Contexto

La primera descarga en estado estable fue generada por el científico inglés Humphry Davy a principios del siglo XIX, para la cual utilizó una fuente de corriente directa (CD) a alto voltaje [Ne-2004]. Hoy existe una serie de sistemas que se han venido diseñando para mejorar y optimizar la generación de plasma. Un ejemplo muy significativo es el sistema de alimentación de lámpara fluorescente, cotidianamente llamado balastro, el cual en un principio era una fuente puramente electromagnética. Hoy, en su mayoría, está basado en dispositivos electrónicos (convertidores con base en semiconductores).

El cambio de componentes en los balastros electromagnéticos a balastros electrónicos tiene que ver con el perfeccionamiento de la eficiencia eléctrica, en principio, ya que la eficiencia de balastros electrónicos es mayor en un rango de 20 a 25 por ciento para los mismos niveles de luz generada [Ki-2005]]. Para estos sistemas existen dos factores primordiales por su importancia en el progreso de la eficiencia:

- 1) El tubo fluorescente: permite tener un mejor rendimiento lumínico.
- 2) El sistema de alimentación, conocido como balastro.

La trascendencia de una descarga eléctrica para fuentes luminosas es la importancia que tiene la misma dentro del sistema, ya que este elemento prácticamente rige el ahorro de energía y tiene como meta principal el diseño de un balastro eficiente y de bajo costo.

Para el diseño de fuentes que suministren la energía suficiente para la generación y sostenimiento de descargas de plasma, se consideran algunos aspectos importantes: potencia a suministrar, valor aproximado de la descarga eléctrica que será suministrada, tipo de material de fabricación de los electrodos, configuración de electrodos, tipo de gas a utilizar, número de fases a proporcionar y frecuencia de trabajo.

Al inicio de la generación de fuentes para descargas eléctricas, éstas eran muy simples y con una eficacia muy pobre. Con el transcurrir del tiempo tales fuentes han ido mejorando tanto en el diseño como en la aplicación de la electrónica. Actualmente, con distintos apoyos, como software para computadoras, se facilita el diseño y desarrollo de fuentes de alto rendimiento energético.

El plasma, de manera general, puede definirse como un medio gaseoso que tiene un número considerable de cargas libres, las cuales dan lugar a elevados valores



de conductividad eléctrica y a la conducción de corrientes eléctricas que pueden interactuar con campos magnéticos aplicados o generados por tales corrientes.

El plasma puede encontrarse en la naturaleza: estrellas, sol, auroras boreales, espacio interestelar; también de forma experimental en laboratorios: lámparas de gas fluorescente, una chispa de un corto circuito, arcos eléctricos, entre otros. Para determinar o clasificar los plasmas se pueden utilizar distintos enfoques, uno de ellos, considerado el más importante, es la termodinámica. Existen plasmas en equilibrio térmico local (ETL), en los que todas las temperaturas coinciden, a excepción de la temperatura de radiación, por lo que también se conocen como plasmas térmicos. Los plasmas térmicos se presentan en antorchas de plasma, arcos eléctricos y en los reactores experimentales a altas temperaturas ($T > 10,000$ K). Por otra parte, se tienen los plasmas en los que no existe equilibrio térmico local y el gas, sobre todo, se mantiene a temperatura ambiente, mientras que los electrones libres son los que adquieren energías y temperaturas elevadas ($T > 1$ eV). Este tipo de plasmas se denominan *plasmas fríos* y se presentan comúnmente en descargas de barrera dieléctrica (DBD), tanto a presión atmosférica como a presión reducida, descargas luminiscentes y descargas corona, por citar algunas.

Para generar plasma en el laboratorio hay una diversidad de métodos, técnicas y sistemas con un principio básico muy importante: proporcionar un nivel de energía suficiente para arrancar uno o varios electrones a los átomos y moléculas de un gas. Esta energía proporcionada puede tener orígenes tanto térmicos (termo ionización), eléctricos (descargas eléctricas) o luminosos (foto ionización).

Una descarga eléctrica, por definición, es el flujo de una corriente eléctrica entre dos electrodos, y para que esto ocurra se necesita tener una diferencia de potencial entre ambos electrodos y un medio conductor. Tratándose de electrodos separados por un medio gaseoso, si la energía suministrada logra ionizar algunos átomos del gas entre ellos, se provoca la movilidad de cargas y, por tanto, la conducción de corriente eléctrica de un electrodo a otro.

Al igual que en la producción de plasma hay diferentes formas de provocar descargas eléctricas, aplicando una diferencia de potencial (voltaje) o suministrando un flujo de corriente (c.c. o c.a.), también se pueden emplear fuentes de RF (radiofrecuencia asignada para uso industrial 13,56 MHz) o microondas (frecuencia asignada 2,45 GHz).

Como apoyo y soporte para poder diseñar fuentes con una eficiencia elevada y que proporcionen la energía suficiente para descargas de plasma aplicadas existen programas de cómputo como Or-cad o Multisim, en los cuales es fácil programar y simular circuitos electrónicos, auxiliando el diseño e implementación de fuentes de descarga de plasma.



Otros programas esenciales de apoyo del diseño de fuentes eléctricas para descargas de plasma son COMSOL Multiphysics o Code Saturne 2.0.4, que permiten simular descargas de plasmas tomando en cuenta diversos parámetros físico-químicos (coeficientes de transporte, temperatura, densidad de especies, energía, volumen, principalmente) mediante elementos finitos, obteniendo resultados muy próximos a los fenómenos reales, por lo que se podrán simular condiciones ideales para generar la descarga de plasma y tener un punto de partida para el diseño de la fuente, al mismo tiempo que permiten conocer y cuantificar algunos fenómenos que ocurren dentro del proceso de generación de plasma.



Capítulo 2

COMSOL Multiphysics

2.1 Análisis de elementos finitos

El análisis por elementos finitos para simulación por computadora utiliza una técnica numérica llamada métodos de elementos finitos (FEM por sus siglas en inglés: *Finite Element Method*). Su desarrollo, esencialmente, se basa en análisis energéticos como el principio de los trabajos virtuales.

El análisis de elementos finitos fue ejecutado en 1940 por Richard Courant, quien usó el método de Ritz del análisis numérico y el cálculo variacional para obtener soluciones aproximadas para sistemas oscilatorios [Co-1943].

El análisis de elementos finitos se origina como el método de análisis estructural de matrices de desplazamiento y surgió luego de varias décadas de investigación en la industria aeroespacial inglesa, como una variante apropiada para computadoras [Fe-2001]. A finales de la década de 1950, los conceptos clave de matriz de rigidez y ensamble de elementos existen en las formas como se conocen actualmente [Tu-1956]. La NASA desarrolló uno de los software de elementos finitos llamada NAS-TRAN, en 1965.

2.2 Método de los elementos finitos

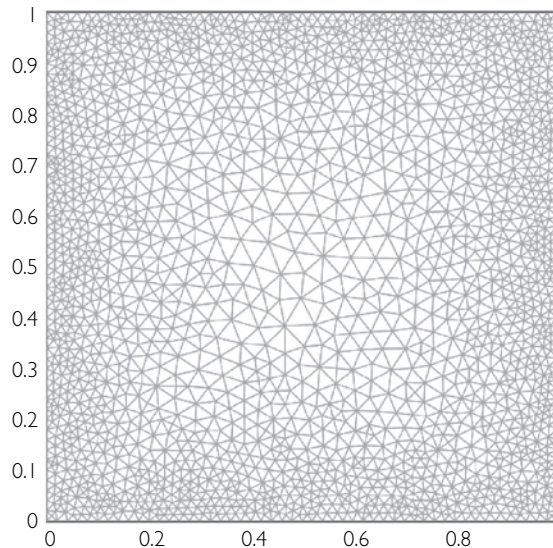
Es un método numérico para la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales parciales y se usa en diversos problemas de ingeniería y física. El FEM fue diseñado para emplearse en computadoras. Permite resolver ecuaciones diferenciales asociadas con un problema físico sobre geometrías complicadas. La variedad de problemas a los que puede aplicarse ha crecido y la principal condición es que las ecuaciones constitutivas y ecuaciones de evolución temporal del problema a considerar sean conocidas.



El FEM obtiene una solución numérica aproximada sobre un cuerpo, estructura o medio continuo, sobre la que están definidas ciertas ecuaciones diferenciales o integrales que caracterizan el comportamiento físico del problema, dividiéndolo en un número elevado de subdominios no-intersectantes entre sí, denominados *elementos finitos*. El conjunto de elementos finitos forma una partición del dominio, también denominada desratización. Dentro de cada elemento se distingue una serie de puntos representativos llamados nodos. Dos nodos son adyacentes si pertenecen al mismo elemento finito; además, un nodo sobre la frontera de un elemento finito puede pertenecer a varios elementos. El conjunto de nodos, considerando sus relaciones de adyacencia, se denomina malla.

En la Figura 2.1 se presenta un ejemplo de una geometría dividida en diversos elementos finitos, donde cada vértice forma un nodo y la red de todos los nodos generados constituye la malla de la geometría a modelar.

Figura 2.1
Malla de elemento finito usada para las simulaciones
[We-2002]



Los cálculos se realizan sobre una malla de nodos, que sirven para discretizar el dominio en elementos finitos. La malla se crea usualmente con programas especiales llamados generadores de mallas, en una etapa previa a los cálculos (preproceso). De acuerdo con estas relaciones de adyacencia o conectividad, se relaciona el valor



de un conjunto de variables incógnitas definidas en cada nodo y denominadas grados de libertad.

El conjunto de relaciones entre el valor de una determinada variable y los nodos se puede escribir en forma de sistemas de ecuaciones lineales. La matriz del sistema de ecuaciones se conoce como matriz de rigidez. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos.

El método de los elementos finitos se programa computacionalmente para calcular el campo de desplazamientos y, posteriormente, a través de relaciones cinemáticas y constitutivas, las deformaciones y tensiones, respectivamente, cuando se trata de un problema de mecánica de sólidos deformables o un problema de mecánica de medios continuos.

El método de los elementos finitos es muy usado, debido a su generalidad y facilidad de introducir dominios de cálculo complejos unidimensionales, o bien, en dos o tres dimensiones. Además, el método es fácil de adaptar a problemas de transmisión, de mecánica de fluidos para calcular campos de velocidades y presiones de campo electromagnético. Este método ha sido usado también para la simulación de descargas de plasma, como se presenta en el siguiente punto.

2.3 Modelado con software COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics [Ro-2011], anteriormente conocido como FEMLAB, es un software de análisis y resolución por elementos finitos para diversas aplicaciones físicas y de ingeniería. Este programa también ofrece una amplia interfaz a MATLAB [Mo-2002], sus *toolboxes* (herramientas) proporcionan una amplia variedad de posibilidades de programación, preprocesado y posprocesado. Además de las interfaces de usuario convencionales basadas en físicas, COMSOL Multiphysics también permite introducir sistemas acoplados de ecuaciones en derivadas parciales (PDE). Las PDE se pueden introducir directamente a la llamada forma débil (método de los elementos finitos) para una descripción de la formulación débil [Bh-2006].

2.4 Modelado de una descarga de arco eléctrico

La distribución de temperatura de un arco eléctrico con base en la potencia suministrada se calcula mediante la aplicación de tres ecuaciones básicas:

- “Difusión”, para el cálculo del potencial electroestático.
- “Convección y conducción”, para el cálculo de transferencia de calor.



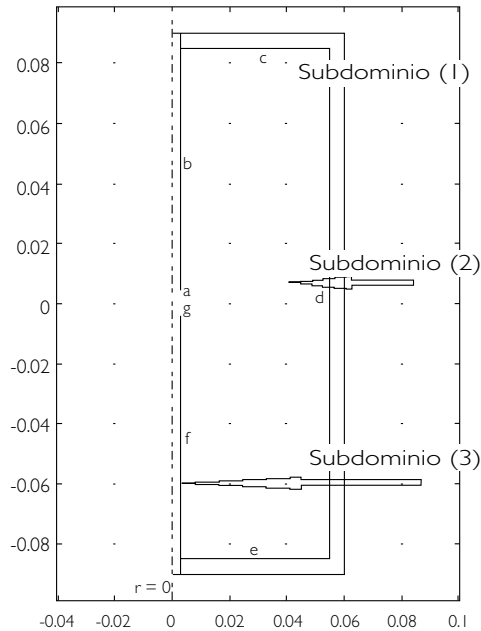
- “Incompressible Navier-Stokes”, para el cálculo del movimiento del fluido respecto a la temperatura.

La geometría planteada es una aproximación a un reactor para generar la evolución de una descarga luminiscente a una descarga de arco eléctrico [Va-2003] [Va-2007].

2.5 Geometría

El reactor consiste de un tubo de vidrio y, concéntricamente, dos electrodos de grafito alineados de forma vertical, los cuales tienen una separación de 5 mm. El modelo se implementó en una geometría 2D axial, dada la forma cilíndrica del reactor y con la estimación de una distribución aximutal homogénea. Existen tres subdominios en esta geometría: el material de las paredes del reactor (en este caso de vidrio), el material de los electrodos (grafito) y el gas dentro del reactor (helio). Las dimensiones y la geometría son como se presentan en la Figura 2.2.

Figura 2.2
Geometría del reactor 2D axial (medidas en metros)



2.6 Distribución de temperatura en el volumen

Las tres ecuaciones físicas involucradas en el cálculo de la distribución de temperatura en el volumen del reactor se describen a continuación.

A) Difusión

Esta ecuación realiza el cálculo para la distribución del potencial electrostático (campo eléctrico) aplicado en el subdominio (2)

$$\vec{\nabla} \cdot (-\sigma \vec{\nabla} V) = 0 \quad (2.1)$$

Donde:

V es el potencial electrostático, $\text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-3} \cdot \text{A}^{-1}$

σ Es la conductividad eléctrica del gas y depende de la presión y de la temperatura, $\text{A} / (\text{V} \cdot \text{m})$

Las condiciones de frontera para esta ecuación son:

- Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra "a" dentro de la geometría.
- Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra "b" dentro de la geometría.
- Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra "f" dentro de la geometría.
- Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra "g" dentro de la geometría.

B) Convección y conducción

Con base en la distribución del campo eléctrico, se determina el término fuente para el cálculo de temperatura mediante la siguiente ecuación:

$$\vec{\nabla} \cdot (-\kappa \vec{\nabla} T) = Q - \rho C_p \vec{U} \cdot \vec{\nabla} T \quad (2.2)$$

Donde:

κ Es la conductividad térmica, $\text{W} / (\text{m} \cdot \text{K})$

T Es la temperatura, K



- ρ Es la densidad de masa, kg/m^3
 U Es el vector de velocidad, m/s
 C_p Es la capacidad calorífica, J/K
 Q^p Es el término fuente, W/m^3

El modo no-conservativo es seleccionado con el fin de asegurar que la divergencia de velocidad sea 0.

Las condiciones de frontera para esta ecuación son:

- a. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “a” dentro de la geometría.
- b. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “b” dentro de la geometría.
- f. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “f” dentro de la geometría.
- g. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “g” dentro de la geometría.

C) *Incompressible Navier-Stokes*

En esta ecuación se calculan los vectores de velocidad del flujo y la ecuación es:

$$\rho(\vec{U} \cdot \vec{\nabla})\vec{U} = \vec{\nabla} \cdot \left[-p\vec{I} + \eta(\vec{\nabla}\vec{U} + (\vec{\nabla}\vec{U})^T) \right] + \vec{F} \quad (2.3)$$

Donde:

- η Es la viscosidad del fluido, m^2/s
 F Es la fuerza en el volumen, y los componentes son F_r y F_z , N
 I Es el operador identidad
 p Es la presión del gas, bars

Las condiciones de frontera para esta ecuación son:

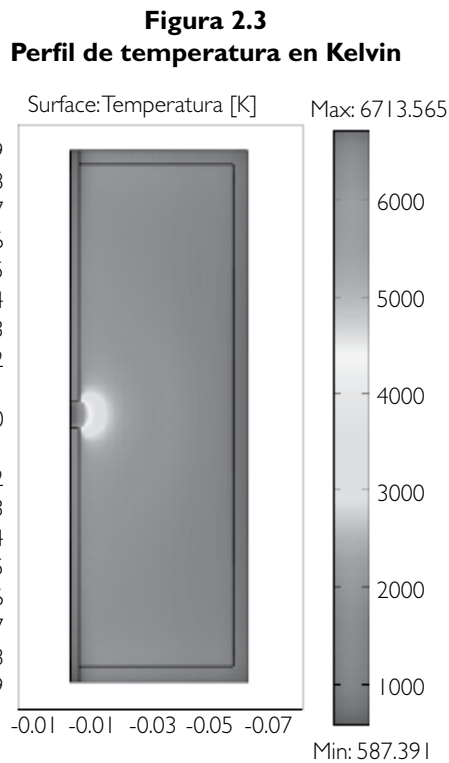
- b. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “b” dentro de la geometría.
- c. Área correspondiente al cristal de cuarzo demarcado con la letra “c” dentro de la geometría.



- d. Área correspondiente al cristal de cuarzo demarcado con la letra “d” dentro de la geometría.
- e. Área correspondiente al cristal de cuarzo demarcado con la letra “e” dentro de la geometría.
- f. Área correspondiente al electrodo demarcado con la letra “f” dentro de la geometría.

2.7 Arco eléctrico en 2D axial

Con el modelo 2D axial implementado en el software COMSOL Multiphysics 3.5 se obtuvo el perfil de temperatura, proponiendo una corriente que fluye entre los electrodos en estado estable de $I = 1.2 \text{ A}$ [Jo-2000]. El resultado de modelo de simulación del arco eléctrico se muestra en la Figura 2.3.



22 • Simulación de una descarga eléctrica...

En este modelo de simulación de descarga de plasma de arco eléctrico en 2D axial, asumiendo equilibrio térmico local, se puede observar que la máxima temperatura que alcanza el arco eléctrico es de 6,700 K, esto indica que la temperatura alcanzada es la suficiente para evaporar y erosionar los electrodos en caso de que la aplicación de este reactor sea la síntesis de NEC [Pa-2003].



Capítulo 3

Code Saturne 2.0.4

3.1 Modelo de un arco eléctrico con Code Saturne 2.0.4

Para la generación de un modelo de arco eléctrico es necesario conocer la mayoría o, en el mejor de los casos, todos los elementos físicos, químicos y eléctricos que interactúan en el sistema, esto con la finalidad de integrarlos matemáticamente en el modelo para que el resultado sea lo más verídico posible.

Los elementos que interactúan principalmente en un reactor de descarga de plasma de arco eléctrico son: voltaje, corriente, potencia, conductividad térmica, conductividad eléctrica, temperatura y entalpía.

3.2 Características termodinámicas y coeficientes de transporte

Code Saturne 2.0.4 [Ar-2004] hace uso de las características termodinámicas y coeficientes de transporte para el cálculo de diferentes ecuaciones implementadas en el modelo. Para dichos datos, el programa hace uso de una carpeta interna, la cual contiene un archivo llamado `dp_ELE`, en el cual se encuentra toda la información del gas que deberá aplicarse para la descarga eléctrica.

Tabla 3.1
Propiedades y unidades utilizadas en `dp_ELE`

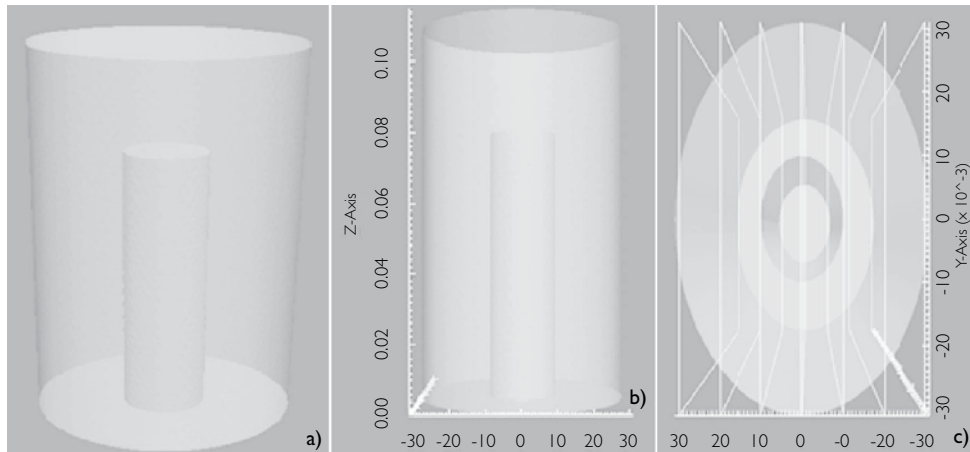
<i>Propiedad</i>	<i>Unidades</i>
Densidad	Kg / m ³
Entalpía	J / kg
Capacidad calorífica	J / (kg * K)
Viscosidad	Kg / (m*s)
Conductividad térmica	W / (m*K)
Conductividad eléctrica	A / (V*m)



3.3 Geometría y generación de la malla

Una vez identificados todos los elementos físicos, químicos y eléctricos que interactúan en el modelo, el siguiente punto es la creación de la geometría. En este caso se recurrió a Salome Meca v 6.6.0 un programa computacional de libre licencia que trabaja con el sistema operativo Linux, que además de poder generar las geometrías tiene la capacidad de generar diferentes tipos de malla en la geometría; los diferentes tipos de mallas que maneja el programa son: tetraedro, cubo y hexaedro. En el caso que nos ocupa se utilizará la malla tipo tetraedro, ya que es la mejor y se acopla a nuestros requerimientos, esto debido a las diferentes pruebas realizadas con diferentes mallas (cubo y hexaedro).

Figura 3.1
Geometría final del reactor desarrollada en Salome Meca

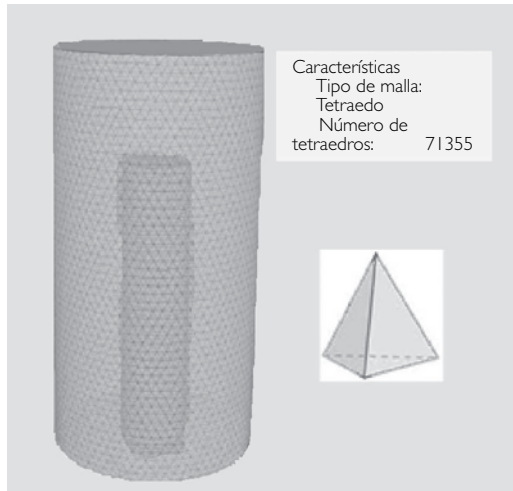


La geometría está basada en el prototipo de un reactor para la generación de un arco eléctrico, éste se encuentra formado por dos electrodos (ánodo y cátodo), y en el espacio de los electrodos es donde se ubica el medio en el que se generará el arco eléctrico, a través de gas argón que, con sus propiedades de gas noble, permitirá su fácil ionización y, por ende, la formación del arco eléctrico. En la Figura 3.1b se presentan las dimensiones de la geometría dadas en metros.



Una vez generada la geometría, el segundo punto es crear la malla en la geometría. Para esto, como ya se mencionó, el programa Salome Meca v 6.6.0 tiene la opción de formar la malla en la geometría; en la Figura 3.2 se muestra el resultado.

Figura 3.2
Malla de la geometría y componentes



Como puede distinguirse en la Figura 3.2, la geometría está compuesta por 71,355 tetraedros. Estos son los datos importantes dentro de la malla: el tipo de célula que compone la malla y el número de células que contiene la geometría.

3.4 Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera son la parte más importante del modelo porque contienen y describen la matemática dentro del sistema. Las ecuaciones se implementan dentro de las fronteras de la geometría; es decir, si hay un evento o fenómeno que ocurre dentro del sistema y que podemos ubicar al interior de la geometría, se implementa en esa superficie la matemática que describe el evento. Por ejemplo, si en dos puntos de la geometría existe una diferencia de potencial, el Code Saturne 2.0.4 se programa sobre las coordenadas de la geometría donde se encuentra esa diferencia de potencial para implementar la condición de frontera e indicar que en ese punto existe una diferencia de potencial, a partir de la ecuación matemática.



Para el modelo de arco eléctrico se utilizan cinco ecuaciones matemáticas dentro de la geometría para generar un arco eléctrico. A continuación se describe cada una y su relación con el modelo de arco eléctrico.

A) *Ecuación de la masa*

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.4)$$

En esta ecuación se representa la masa dentro del sistema y, en este caso, no hay creación o formación de masa, por lo que la masa que entra es la misma que sale.

B) *Ecuación de la cantidad de movimiento*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}) + TS + J \times B \quad (2.5)$$

La ecuación de la cantidad de movimiento describe las fuerzas de movimiento que interactúan en el sistema; Code Saturne 2.0.4 realiza la discretización de la ecuación para implementarla por coordenadas dentro la geometría donde se implementará dicha ecuación, que está conformada por la divergencia de la conductividad eléctrica, término fuente, y por la componente de la fuerza de Laplace. Code Saturne 2.0.4 tiene dos formas de implementar el término fuente en las condiciones de frontera aplicadas a la geometría. La primera es por una librería externa que nos permite aplicar el término fuente dentro de la geometría dando las coordenadas del volumen donde se desea que se encuentre el término fuente y el valor de potencia (Watts) de éste, ya que, si recordamos, se trata de una energía en un volumen. La segunda es por medio de la discretización de la ecuación de la masa, en las coordenadas de la geometría, mediante programación.

C) *Ecuación de la energía*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v} h) = \phi - \operatorname{div}\left(\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma}\right) \operatorname{grad} h\right) + j \cdot E \quad (2.6)$$

Esta ecuación describe la energía que se encuentra en el sistema como la entalpía y el efecto Joule. Automáticamente, Code Saturne 2.0.4 toma un valor aleatorio para todo el sistema de entalpía, por lo que es necesario utilizar la discretización de la ecuación para implementarla en las condiciones de la entalpía dentro de la geometría, para que Code Saturne no tome el valor inercial para toda la geometría.



D) Ecuación del potencial eléctrico

$$\text{div} (\sigma \text{grad} P_R) = 0 \quad (2.7)$$

La ecuación del potencial eléctrico es un valor escalar que determina la cantidad de potencial eléctrico utilizada en la generación del arco eléctrico dentro del sistema. El valor del potencial eléctrico es realizado en las condiciones de frontera por medio de la discretización de la ecuación y por las coordenadas del lugar geométrico donde se desea crear el potencial eléctrico.

E) Ecuación del vector potencial

$$\text{div} (\text{grad} A) = -\mu_0 j \quad (2.8)$$

El vector potencial es una solución de la ecuación de Poisson y es un valor vectorial o campo vectorial tridimensional donde, conociendo este valor, se permite conocer el campo magnético.

3.5 Condiciones de frontera dentro de la geometría

En la Figura 3.3 y en la Tabla 3.2 se muestran las condiciones de frontera que se establecieron dentro de la geometría para poder generar el arco eléctrico.

Figura 3.3
Condiciones de frontera en la geometría

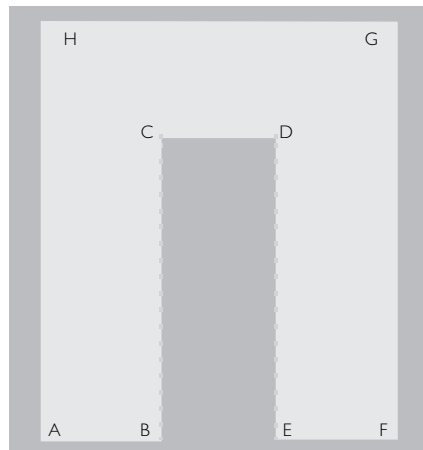


Tabla 3.2
Condiciones de frontera aplicadas en el reactor

Long.	Temp. (K)	Vel. (m/s)	Volt. (V)	V. Pot. (Vm)
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	-10	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \vec{n}}$
D-E	1000 K	0	-10	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	$\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{n}}$	0
G-H	$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \vec{n}}$
H-A	300	0	$\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{n}}$	0

En la Tabla 3.2 se describen las ecuaciones en las condiciones de frontera aplicadas al modelo de arco eléctrico, donde las longitudes A-B y E-F conforman la longitud donde se encuentra el cristal de cuarzo que envuelve al reactor; en ese caso se maneja una temperatura de 300 K, que es la temperatura ambiente. Los puntos H-A y F-G también pertenecen al contorno del reactor, pero en estas longitudes se toma en cuenta un aspecto que en la anterior no se consideró, se trata de la ecuación del vector potencial, la cual se ocupará para obtener el vector potencial. Este ejemplo es un campo vectorial tridimensional que permite la obtención del campo magnético.

Las longitudes B-C y D-E son las partes laterales del cátodo, por esa razón, en las condiciones de frontera, se le asigna el valor de -10V, con este valor de voltaje se pretende generar el arco eléctrico; en el rubro de temperatura en las condiciones de frontera en estas longitudes se propone asignar una temperatura con un valor de 1,000 K, cuya finalidad es ayudar a la formación de arco eléctrico dentro del reactor. La longitud C-D es parte del cátodo y es el lugar donde se generará el arco eléctrico, por lo que en esta longitud no se coloca ningún valor, ya que las cinco ecuaciones discretizadas dentro del programa se encargarán de calcular y obtener el resultado del arco eléctrico. G-H es la longitud donde se localiza el ánodo

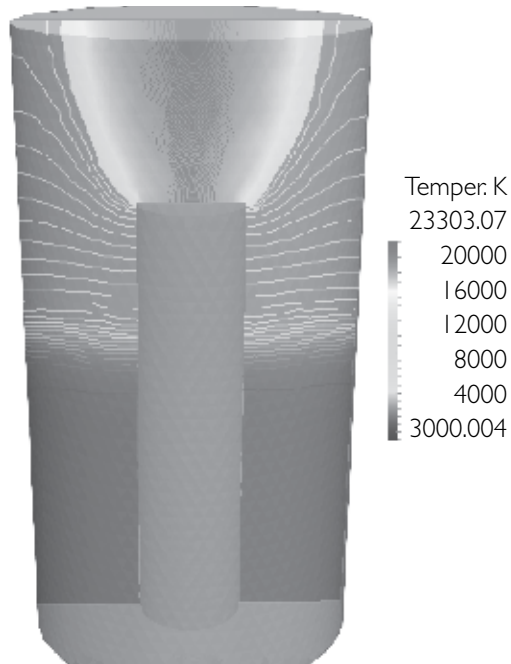


y las condiciones de frontera que, al igual que el cátodo, no proporciona un valor; el programa se encargará de calcular los valores.

3.6 Arco eléctrico en 3D

El análisis de perfil de temperatura es el resultado del modelo del arco eléctrico, con las condiciones descritas con anterioridad. En la Figura 3.4 se muestra el resultado del perfil de temperatura con la geometría en 3D.

Figura 3.4
Perfil de temperatura en el arco eléctrico



Como puede observarse en la figura anterior, se tiene como resultado la formación del arco eléctrico entre el ánodo y cátodo del reactor. Se obtiene una temperatura máxima aproximada de 23,300 K y ésta disminuye conforme se aleja

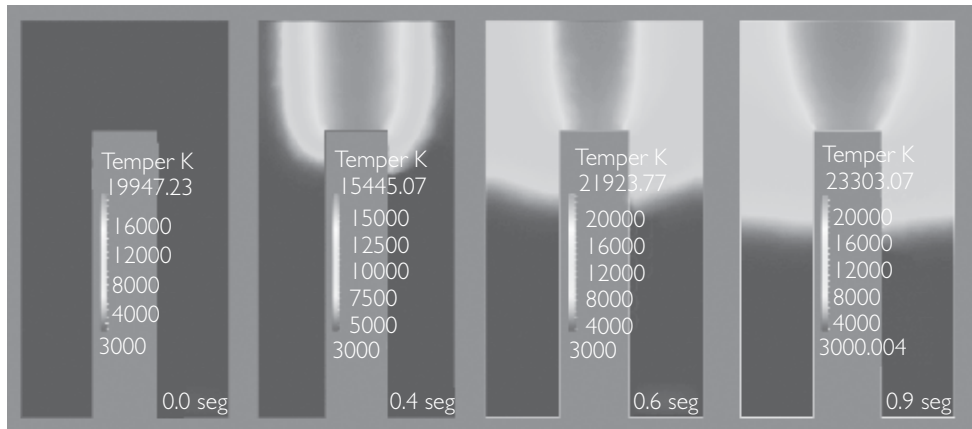


del eje del arco eléctrico, obteniendo una temperatura mínima de 3,000 K en el resto del reactor:

Se puede percibir que la mayor temperatura alcanzada se localiza justamente en el centro tanto del ánodo como del cátodo.

En la Figura 3.5 se muestra la evolución del perfil de temperatura que genera el arco eléctrico en un tiempo de .9 segundos.

Figura 3.5
Desarrollo del arco eléctrico en un tiempo de 1 segundo



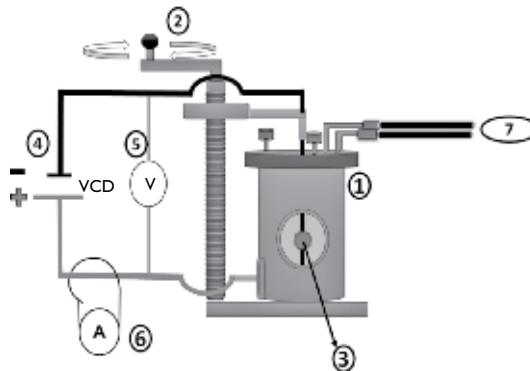
Capítulo 4

Aplicación del arco eléctrico

4.1 Arco eléctrico para la síntesis de nanoestructuras

Para llevar a cabo la síntesis de NEC [Va-2012] existen diferentes técnicas, una de las cuales sucede por medio del arco eléctrico. Esta descarga es generada con un reactor que consta de dos electrodos de grafito (ánodo y cátodo), una fuente de corriente continua para polarizar los electrodos dentro del reactor; un sistema de refrigeración que mantiene las paredes del reactor a temperatura ambiente (por las altas temperaturas generadas por el arco eléctrico) y una atmósfera de gas helio a presión reducida (0.5 atm). Para generar el arco eléctrico entre los dos electrodos se aplica un voltaje CD en los electrodos; al unirlos físicamente se genera un flujo de corriente y de inmediato se separan a una distancia de 2 mm y el arco eléctrico se mantiene, dando inicio a la erosión del ánodo y, por tanto, a la síntesis de NEC. En la Figura 4.1 se representan las partes que componen el reactor del LAP.

Figura 4.1
Reactor para generar la NEC

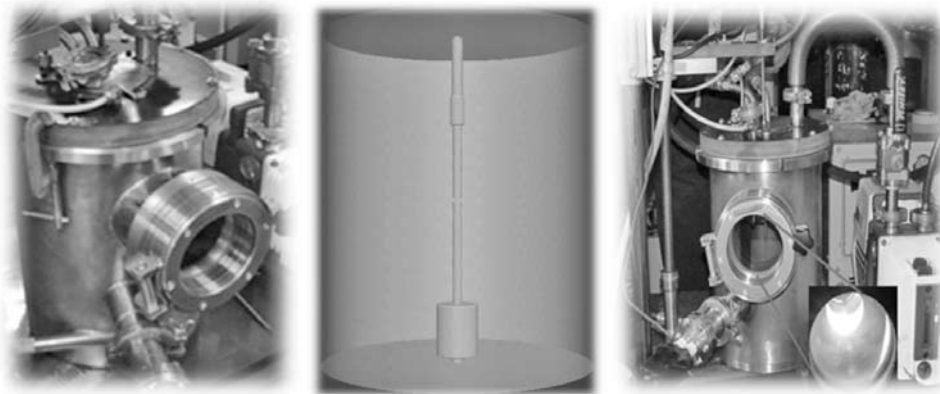


El punto 1 es el reactor; donde internamente se encuentran los electrodos y se almacena el gas helio. El punto 2 es la manivela con la que se controla el movimiento de los electrodos. El 3 es el arco eléctrico generado. El 4 es la fuente de alimentación de corriente directa y se alimenta con un voltaje de 50 V. El 5 representa el voltímetro, donde se mide el voltaje aplicado. El 6 representa el amperímetro, donde se midió la corriente que circula en el circuito. Finalmente, el 7 indica el sistema de refrigeración a base de agua para el reactor.

4.2 Geometría del reactor

Para la geometría del reactor, al igual que para todas las geometrías aplicadas en los distintos modelos para este ejemplo, se utilizó el programa Salome Meca, cuya funcionalidad se explicó en el capítulo anterior. La geometría del reactor se muestra en la Figura 4.2, además de las imágenes del reactor real que fue modelado.

Figura 4.2
Geometría de reactor utilizada en el modelo de simulación,
basada en el reactor real

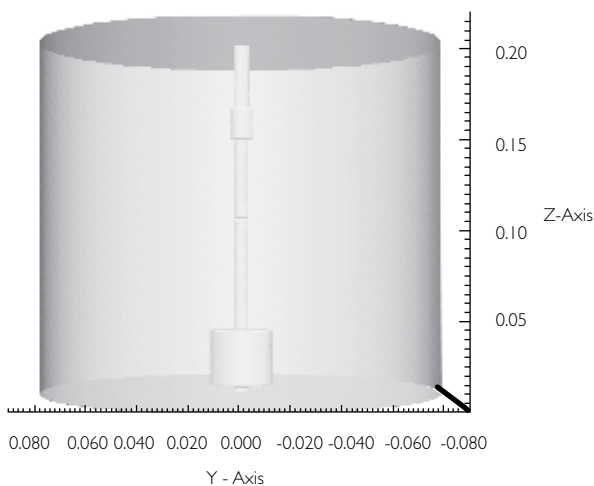


En la figura anterior es posible apreciar que la geometría del reactor está basada en el reactor original utilizado para la síntesis de NEC, para la cual se consideraron todos los elementos claves de la geometría del reactor original, como el tamaño interno de la cavidad del reactor y los tamaños y formas de los porta electrodos y los electrodos. Esto con la finalidad de que tuviera, en su totalidad, las mismas



dimensiones de la geometría que se utilizaría en el modelo del reactor y así evitar interferencias en el desarrollo del arco eléctrico. Las unidades de la geometría del reactor están dadas en metros, tal como se muestra en la Figura 4.3

Figura 4.3
Geometría del reactor, unidades en metros



Las siguientes figuras muestran las diferentes geometrías que componen el reactor internamente y que fueron creadas para el modelo del reactor:

Figura 4.4
Porta electrodo del ánodo

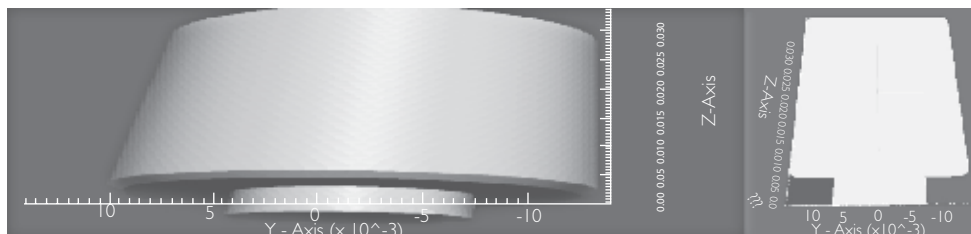


Figura 4.5
Ánodo compuesto de grafito

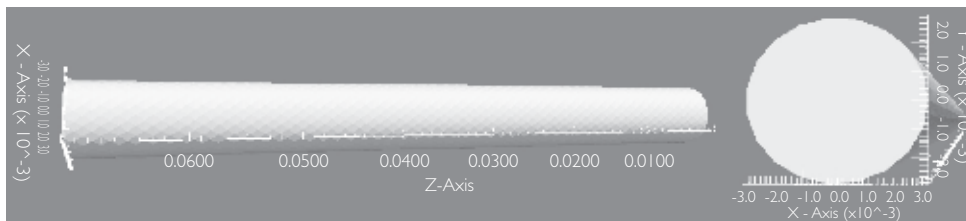


Figura 4.6
Porta electrodo del cátodo

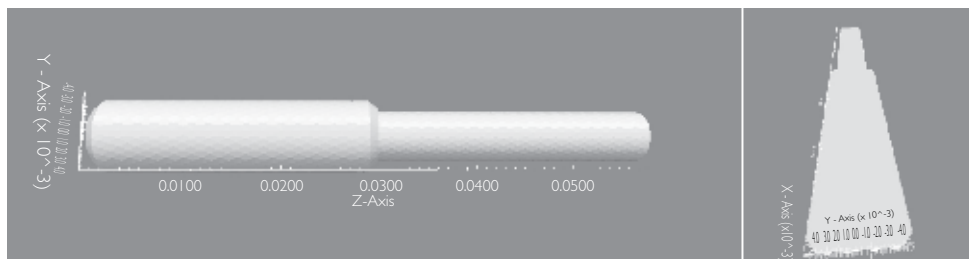


Figura 4.7
Cátodo compuesto de grafito

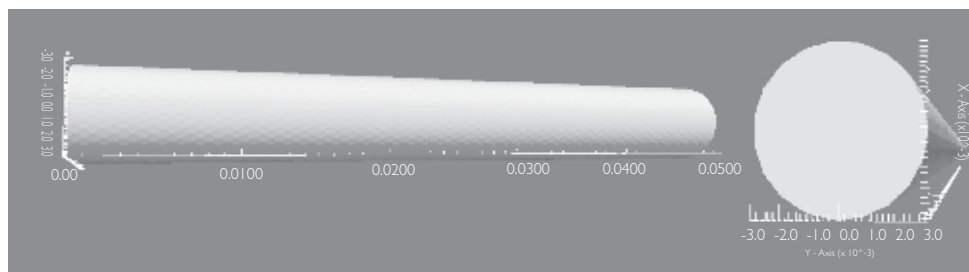
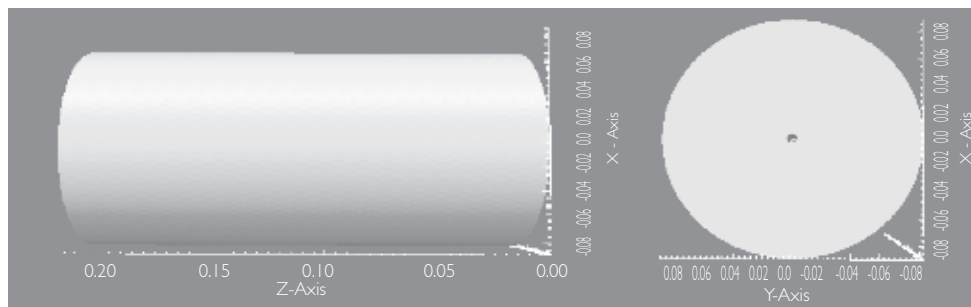


Figura 4.8
Cavidad total del reactor



Las figuras anteriores conjuntan la geometría completa del reactor. Ambos electrodos tienen el mismo diámetro de 0.007 m. Lo que diferencia el ánodo del cátodo es la medida de longitud: el ánodo cuenta con una longitud de 0.07 m, mientras que el cátodo tiene una longitud de 0.05 m. Los porta electrodos también tienen diferencias de longitud y amplitud; el radio del porta electrodo del ánodo es más amplio que el del porta electrodo del cátodo, esto se debe a la construcción del reactor y a la conexión interna que se hace del ánodo a la fuente de alimentación, y esta conexión se efectúa por medio del porta electrodo del ánodo, el cual se atornilla a la base del reactor. Mientras tanto, el porta electrodo del cátodo prácticamente sostiene el electrodo y se va directo a la conexión de la fuente de alimentación. La cavidad total o volumen total que contiene tanto los porta electrodos como los electrodos y el gas para la ionización tiene una longitud de 0.22 m y un diámetro de 0.18 m. La separación de un electrodo con respecto al otro es de 2 mm, esta distancia es considerada con base en las experiencias de modelos anteriores y también en la distancia del reactor original. En el volumen del reactor no se consideró ninguna entrada ni salida de gas, debido a que el procedimiento de la síntesis de NEC trabaja con una atmósfera de helio a presión reducida (0.5 atm).

4.3 Malla y tipo de células para la geometría del reactor

Code Saturne 2.0.4 contiene la librería `cs_preprocess` que permite realizar un pre proceso en la geometría con la malla, con la finalidad de verificar que la malla sea funcional dentro del programa Code Saturne 2.0.4. En ocasiones, se cree que hay mallas bien distribuidas dentro de la geometría que pueden tener una funcionalidad correcta, pero no es así, pues al momento de correr el programa surgen diferentes

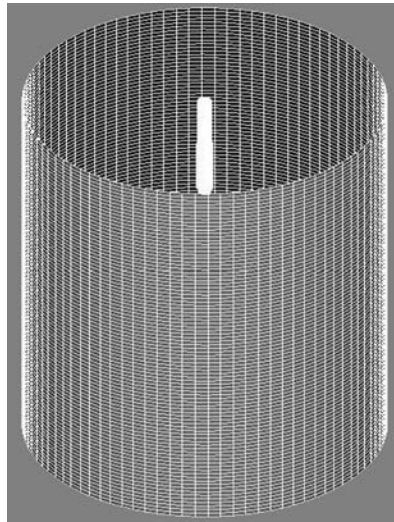


problemas, como la no convergencia, la saturación de memoria por desbordamiento de pila, la lectura incorrecta de las condiciones de frontera, por mencionar algunas.

Para la obtención de la malla dentro de la geometría, se experimentó con diferentes tipos de mallas, hasta encontrar las que mejor se distribuyeron y acoplaron a nuestra geometría.

En la Figura 4.9 se muestra la geometría con la malla tipo cubo, la cual, aunque tiene una buena distribución dentro de la geometría de los electrodos y porta electrodos, no funciona igual con el resto de la geometría, ya que no es capaz de dividir la base inferior y superior donde se sujetan los porta electrodos; el número de celdas que componen la malla es de 24,300.

Figura 4.9
Distribución de la malla en la geometría



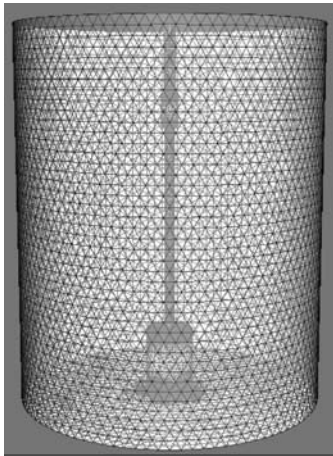
El siguiente tipo de malla con el que se probó la geometría fue con el de hexaedro, pero resultó ser uno de los más conflictivos porque no muestra una salida de imagen, sólo de datos, e inclusive éstos se podrían manejar en Code Saturne 2.0.4, pero desafortunadamente los datos que arroja el programa, con respecto a la malla, son incoherentes y no tienen relación con ella. Los datos proporcionados son de una malla compuesta por 35,000 células. Al introducir los datos a Code Saturne 2.0.4 y correrlos por la librería `cs_preprocess`, se generó una serie de mensajes en



apariencia correctos e incluso proporcionaron una carpeta de salida para ser leída por Paraview, software de licencia libre que permite visualizar gráficamente los resultados obtenidos de los modelos realizados en Code Saturne 2.0.4. Después se colocaron algunas condiciones de frontera, con el fin de verificar por última vez la geometría; al colocar las condiciones y correr el programa los resultados no convergían, error que no es propiciado por las condiciones de frontera, sino por la malla que tiene nuestra geometría.

La última malla con la que se experimentó con resultados satisfactorios fue con aquella formada por células con forma de tetraedros, y se obtuvo la geometría de la Figura 4.10.

Figura 4.10
Malla final utilizada en el modelo de simulación



Características

Tipo de malla: Tetraedro

Número de tetraedros: 394,166

El conocimiento del número correcto de células o tetraedros que conforman la geometría fue adquirido por medio de la experiencia, ya que al corroborar los resultados, pudo comprobarse que ésta era la mejor opción; fue notorio que el resultado del modelo variaba conforme se disminuía o aumentaba el número de células, pero cuando se llegó al número de células seleccionadas (394166) se corroboró que a partir de ese valor ya no había variación alguna en el resultado, ello significaba que éste era estacionario y que no era necesario aumentar el número de celdas. Si bien el incremento no afecta en nada el resultado, recordemos que cada célula corresponde a un cálculo en nuestro procesador y sólo retardamos el



tiempo de uso de los procesadores y, en consecuencia, también el tiempo total de la obtención del resultado. Es importante considerar el número total de células que componen la malla, ya que este dato puede modificar el resultado por completo, además de que si excedemos, sin ser necesario, el número de células, el procesador estaría trabajando inútilmente, pero consumiendo hardware (memoria RAM, procesadores, disco duro).

4.4 Condiciones de frontera con el método de término fuente

Este método fue diseñado para implementar dentro de la geometría un término fuente. Para este tipo de modelo es necesaria una librería especial en Code Saturne 2.0.4, que pueda calcular el perfil de temperatura generado por el término fuente. La librería se llama `eltssc.f90` y es importante mencionar que no se encuentra en los módulos principales de Code Saturne 2.0.4, sino en la carpeta `installer` que se genera al instalar el programa. También es importante enfatizar que esta librería no sirve para realizar el cálculo de la densidad de corriente, campos magnéticos o entalpía.

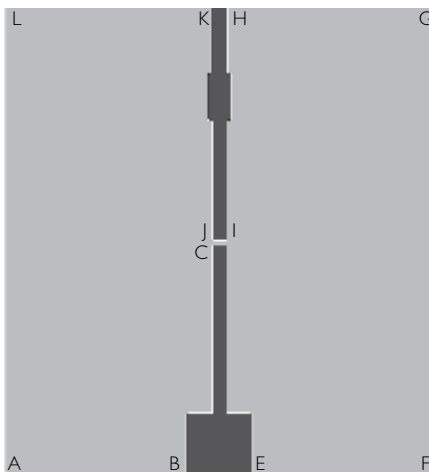
Las condiciones de frontera se muestran en la Figura 4.1 I, y en la Tabla 4.1 se describen las condiciones implementadas en la geometría.

Tabla 4.1
Condiciones de frontera aplicadas en la geometría

<i>Long.</i>	<i>T</i>	<i>V</i>	\vec{v}	<i>P/Vol.</i>
A-B	300	0	0	0
B-C	0	0	0	0
C-D	0	0	0	0
D-E	0	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	0	0
G-H	300 K	0	0	0
H-I	0	0	0	0
I-J	0	0	0	0
J-K	0	0	0	0
K-L	300 K	0	0	0
L-A	300 K	0	0	0



Figura 4.11
Condiciones de frontera en la geometría



Las condiciones de frontera mostradas en la Tabla 2.3 muestran que prácticamente no se está contemplando fenómeno alguno, llámese físico, químico o eléctrico, en los electrodos; sólo en las paredes del reactor se está considerando una temperatura ambiente de 300 K y sólo, por llamarlo así, en las puntas de los electrodos con longitudes C-D y I-J, donde se implementará el término fuente Q.

Para establecer el término fuente en la geometría, como ya se ha mencionado, es necesaria la librería `eltssc.f90`, que nos da la opción de programar en las condiciones de frontera y permite calcular los volúmenes necesarios donde se colocará el término fuente; como se sabe, el término fuente, expresado matemáticamente, no es más que una energía aplicada en un determinado volumen. El segmento del programa se describe a continuación.

$$\text{radio} = \text{sqrt}(\text{xyzcen}(1,\text{iel})^{**2} + \text{xyzcen}(2,\text{iel})^{**2})$$

Esta parte corresponde al cálculo de un radio para delimitar el área del término fuente y para usarse en el eje Z.

```
if (xyzcen(3,iel).lt.0.1155d0.and.radio.lt.0.003d0 &
.and.xyzcen(3,iel).gt.0.1090d-3) then
  grueso = grueso+volume(iel)
endif
enddo
```



Una vez calculado el radio, continúa la obtención del volumen, para lo cual es primordial delimitar los extremos o las puntas de los electrodos con longitudes C-D y I-J. Se asigna el valor numérico correspondiente en las coordenadas del plano Z, tanto del extremo inferior (C-D) como superior (I-J). Posteriormente se limitan a un radio ya calculado con el valor numérico del radio del electrodo, estos valores calculados se asignan a una variable con el nombre de *grueso*, involucrando a la variable universal llamada volumen (*iel*), que es la que se encarga de hacer el llamado de todas las células del volumen seleccionado con anterioridad. Al simplificar la descripción anterior, se obtuvo el volumen existente entre las separaciones de los electrodos.

```
do iel = 1, ncel
radio = sqrt (xyzcen (1,iel)**2 + xyzcen (2,iel)**2)
if (xyzcen(3,iel).lt.0.1155d0.and.radio.lt.0.003d0.and.xyzcen(3,iel).gt.0.1090d-3) then
```

Esta sección es igual a la anterior, pero es necesario repetirla, ya que en la sección anterior fue hecha para calcular el volumen, mientras que en esta sección se asignan las coordenadas volumétricas donde se colocará el término fuente.

```
wl(iel) = (1.8d3/grueso) *volume(iel)
endif
enddo
```

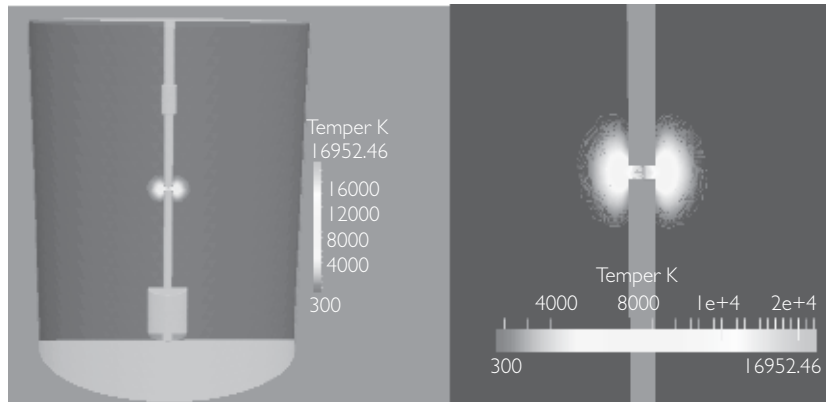
Esta instrucción es la más importante, ya que asigna una potencia eléctrica, en este caso de 1,800 watts, entre un valor de volumen almacenado en una variable llamada *grueso*, en una distribución volumétrica, previa asignación de coordenadas. El valor de 1,800 watts se obtiene de los datos reales medidos durante las pruebas realizadas al reactor para la síntesis de NEC. En cuanto al resto del reactor, se asigna una condición de frontera *iparoi*, que significa que las paredes del reactor son lisas, sólidas y que hay fricción.

4.5 Arco eléctrico con el método de término fuente

El resultado del perfil de temperatura obtenido utilizando el método de término fuente descrito con anterioridad se muestra en la Figura 4.12.



Figura 4.12
Término fuente entre los dos electrodos



En la figura anterior, el resultado del perfil de temperatura obtenido no rebasa los 17,000 K, la máxima temperatura se presenta justo donde se colocó el término fuente. Este resultado se obtiene de modelar el reactor de síntesis de NEC [PA-2003] con el método de término fuente, en el cual sólo se está colocando, en el volumen entre los electrodos, la energía que genera la descarga de arco eléctrico.

4.6 Condiciones de frontera utilizando las ecuaciones

En el presente método se utilizarán las cinco ecuaciones que rigen el arco eléctrico; por tanto, las condiciones de frontera cambian respecto al sistema anterior; en la Figura 4.11 se muestra la geometría y en la Tabla 4.2, las distintas condiciones aplicadas en dicha geometría.

Aquí las condiciones de frontera incluyen cuatro de las cinco ecuaciones, ya que la ecuación de la masa se considera cero, debido a que no hay generación ni pérdida de masa; por tanto, no es necesario incluirla.

Por otra parte, las ecuaciones se aplican directamente en los límites donde se generará el arco eléctrico. En este caso, las longitudes C-D y I-J serían las condiciones de frontera donde se calcularían los valores no conocidos y, por tanto, es el lugar donde se enfocarían los cálculos para conocer el resultado.



Tabla 4.2
Condiciones de frontera aplicada en la geometría

Long.	T	V	v	$P/Vol.$
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	0	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$	-50 V
D-E	1000 K	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$	0
G-H	300 K	0	0	0
H-I	1000 K	0	0	0
I-J	$\frac{\partial T}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$	-50 V
J-K	1000 K	0	0	0
K-L	300 K	0	0	0
L-A	300 K	0	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$	0

A continuación se presentan las líneas de programación en Code Saturne 2.0.4 para efectuar el cálculo de las cuatro ecuaciones que rigen el modelo de arco eléctrico aplicado en las condiciones de frontera de la geometría.

a) Temperatura

Esta sección del programa tiene la función de calcular la temperatura o colocar un valor determinado de temperatura en las condiciones de frontera. Para esto se consideran dos tipos de estructura de programa para las dos funciones distintas.

```

ii = ihm
icodcl(ifac,isca(ii)) = 1
mode = -1
coefe(1) = 1.d0
if ( ngazg .gt. 1 ) then
do iesp = 2, ngazg
coefe(iesp) = 0.d0
enddo
endif

```




```

call elthht(mode,ngazg,coefe,enth,1000.0D0)
rcodcl(ifac,isca(ii),1) = enth
endif

```

Esta es la estructura del programa para colocar la temperatura conocida en las condiciones de frontera y convertir la temperatura a entalpía, para algunos cálculos donde se requiera conocer este valor. En el antepenúltimo renglón del listado anterior se coloca el dato de temperatura que se conoce y se desea colocar en la condición de frontera, en este caso corresponde a un valor de 1,000 K.

```

ii = ihm
icodcl(ifac,isca(ii)) =3
rcodcl(ifac,isca(ii),1) = 0.d0

```

Estas tres líneas son utilizadas para determinar qué temperatura deberá ser calculada en las fronteras donde no se conoce.

b) Velocidad

La velocidad dentro del modelo se determina a partir de una programación que nos permita seleccionar el cálculo de la velocidad o colocar el valor de velocidad, dependiendo de lo que se necesite.

```

icodcl(ifac,iu(iphas)) = 3
rcodcl(ifac,iu(iphas),3) = 0.0d0
icodcl(ifac,iv(iphas)) = 3
rcodcl(ifac,iv(iphas),3) = 0.0d0
icodcl(ifac,iw(iphas)) = 3
rcodcl(ifac,iw(iphas),3) = 0.0d0

```

El valor numérico 3 indica que el programa debe calcular el valor de velocidad; si se requiere colocar el valor de velocidad, tendría que cambiar el valor numérico tres en todos los renglones a uno, y con eso el programa tendría el valor de velocidad requerido en la condición de frontera. El valor de la velocidad está dado en metros sobre segundo y se aplica en el renglón donde se encuentra el comando rcodcl; la dirección de la velocidad está definida por u, v y w, que corresponde al plano x y z.



c) Vector potencial

En cuanto al vector potencial, al igual que en los demás segmentos de programas, existe la opción de que el programa calcule el vector potencial o que se agregue el vector potencial.

```
do idim= 1,ndimve
  ii = ipotva(idim)
  icodcl(ifac,isca(ii)) = 3
  rcodcl(ifac,isca(ii),3) = 0.d0
endd
```

Normalmente, el segmento del programa es utilizado para calcular el vector potencial, ya que cuando se ha utilizado para colocar el valor del vector en las condiciones de frontera, el programa no responde con eficiencia y, en ocasiones, genera error en el resultado.

d) Potencial eléctrico

El potencial eléctrico se puede calcular por estas tres líneas de programación y también existe la oportunidad de colocar el valor numérico del potencial eléctrico en caso de que se conozca o de que el programa calcule el potencial eléctrico.

```
ii = ipotr
icodcl(ifac,isca(ii)) = 3
rcodcl(ifac,isca(ii),3) = 0.d0
```

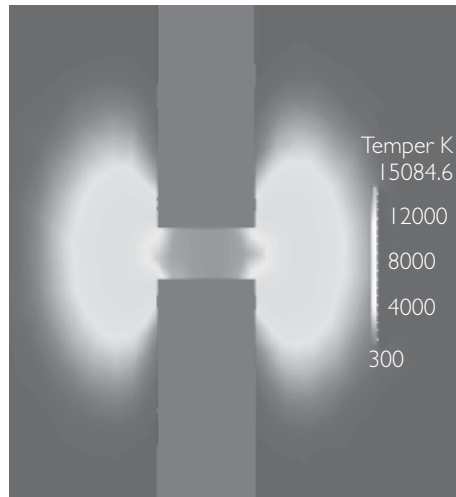
Si se desea colocar el valor numérico del potencial eléctrico en las condiciones de frontera donde se conozca el valor, se deberán cambiar los valores donde se encuentre el valor numérico tres a uno, y colocar en el renglón del comando rcodcl el valor numérico del potencial eléctrico.

4.7 Modelo del reactor para síntesis de NEC

El resultado del perfil de temperatura que genera el arco eléctrico en el modelo descrito anteriormente se observa en la Figura 4.13, durante un tiempo de un segundo.



Figura 4.13
Perfil de temperatura generado por el arco eléctrico, $t = 1s$



El resultado de la densidad de corriente se encuentra en el plano Z, donde el valor máximo tomado en toda la superficie es el que se muestra en la Figura 4.14.

Figura 4.14
Resultado de la densidad de corriente en el plano z



Para corroborar que los dos diferentes modelos de simulación de arco eléctrico tuvieron un resultado correcto, del modelo descrito con anterioridad, se utilizó el valor del resultado de la densidad de corriente realizando una integración de corriente, y con ese valor se realizó el siguiente criterio:

Se sabe que la densidad de corriente es igual a

$$J = \text{Corriente-Area. } J = \frac{I}{A} \quad (3.1)$$

Y de la integración del segundo del modelo antes descrito tenemos que

$$J = 1132418 \frac{A}{m^2}, \text{ como se muestra en la Figura 3.6}$$

Y que el área es igual

$$A = \pi r^2 \quad (3.2)$$

Donde

$r = 0.003 \text{ m}$ radio del electrodo.

Por tanto, el área es igual a

$$A = 0.000028274 \text{ m}^2$$

Despejando la corriente de la ecuación 3.1, tenemos:

$$\text{Corriente} = (J) (A) \quad (3.3)$$

$$\text{Corriente} = \left(1132418 \frac{A}{m^2}\right) (0.000028274 \text{ m}^2)$$

$$\text{Corriente} = 32.02 \text{ A}$$

El resultado de la corriente obtenida por los cálculos es de 32.02 A, mientras que el valor real de corriente, medido y aplicado al reactor de descarga de plasma para la síntesis de NEC es de 36 A; aunque haya una pequeña diferencia de 4 A, no es significativo para alterar la formación de las NEC [Va-2012].



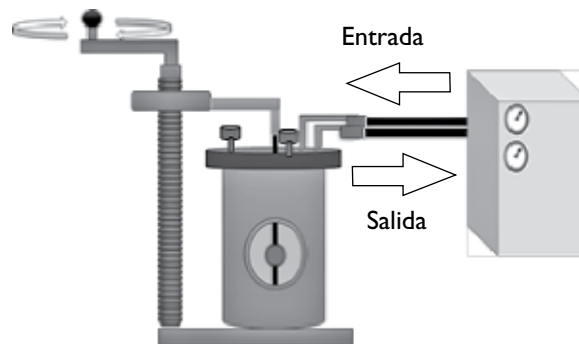
Capítulo 5

Modelos adicionales del reactor

5.1 Temperatura en las paredes del reactor

El efecto térmico que ocurre en las paredes internas del reactor durante la descarga de arco eléctrico es un dato importante y necesario que se requiere calcular. Una vez obtenido, se puede emplear como referencia en el uso de sistema de enfriamiento aplicado en el reactor: La función del sistema de enfriamiento es la de controlar la excesiva temperatura en el sistema y evitar el daño o deterioro en los componentes, tanto mecánicos como eléctricos del reactor, esto por el efecto de la alta temperatura generada por el arco eléctrico entre los dos electrodos. Este sistema de enfriamiento es un dispositivo que hace circular un flujo de un líquido con ciertas propiedades físicas que no permiten el congelamiento del líquido ni el calentamiento y vaporización. Este líquido sale del sistema de enfriamiento y se introduce, por medio de unas mangueras, a las paredes del reactor, para posteriormente retornar y, de este modo, mantener una temperatura correcta dentro del sistema.

Figura 5.1
Sistema de enfriamiento a base de agua



La Figura 5.1 representa la conexión del sistema de enfriamiento hacia el reactor. La manguera de entrada al reactor suministra un flujo de agua a temperatura ambiente, en tanto que la manguera de salida expulsa dicho líquido. Ésta tiene un valor de temperatura más elevada, debido a que ya circuló a través de las paredes internas del reactor y, por tanto, ya hubo un intercambio e incremento de la temperatura, la cual volverá a enfriarse internamente en el sistema de enfriamiento, para regresar al reactor; y así sucesivamente, manteniéndolo en una temperatura adecuada.

5.2 Condiciones de frontera

Para calcular el perfil de temperatura en las paredes del reactor, se utilizó el modelo explicado al inicio de este capítulo, donde se calculó el perfil de temperatura generado por el arco eléctrico. Con el valor del perfil de temperatura obtenido, y modificando algunas condiciones de frontera, se obtuvo el perfil de temperatura generado en la paredes del reactor:

Las condiciones de frontera que se modificaron se muestran en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1
Condiciones de frontera para obtener el perfil de temperatura en las paredes del reactor

Long.	T	V	v	$P/Vol.$
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	0	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$	-50 V
D-E	1000 K	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	$\frac{\partial T}{\partial n}$	0	$\frac{\partial A}{\partial n}$	0
G-H	300 K	0	0	0
H-I	1000 K	0	0	0
I-J	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$	-50 V
J-K	1000 K	0	0	0
K-L	300 K	0	0	0
L-A	$\frac{\partial T}{\partial n}$	0	$\frac{\partial A}{\partial n}$	0

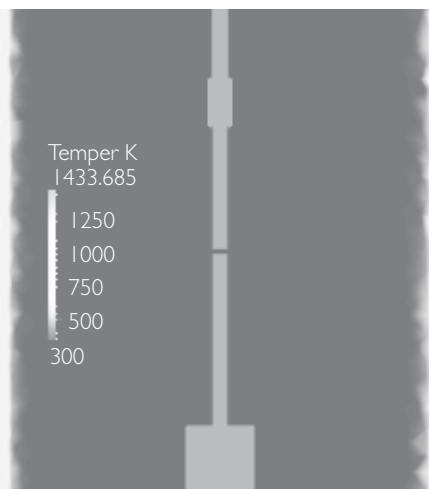
La diferencia de las condiciones de frontera de la Tabla 4.2 con respecto a la Tabla 5.1 se observa en las longitudes L-A y G-F, donde anteriormente, para calcular



el perfil de temperatura generado por el arco, se proponía un valor de temperatura de 300 K, a diferencia de la actual, donde no se propone valor alguno y es ahí donde se indica al programa Code Saturne 2.0.4 calcular el valor de acuerdo con el perfil de temperatura que se requiere.

El resultado del valor obtenido del perfil de temperatura en las paredes del reactor se muestra en la Figura 5.2.

Figura 5.2
Resultado del perfil de temperatura en las paredes del reactor



El modelo de simulación donde se aplicó el resultado del perfil de temperatura de las paredes internas del reactor es el volumen donde circula el líquido proveniente del sistema de enfriamiento, con el fin de analizar la evolución de la temperatura causada por el líquido.

Para generar la geometría interna del volumen del reactor por donde circula el líquido, se contó con los planos reales del reactor, en donde se presenta toda la información necesaria de las dimensiones internas y externas del reactor.

En la Figura 5.3 se pueden observar los planos utilizados para la generación de la geometría interna del volumen de las paredes donde circula el líquido proveniente del sistema de enfriamiento.

La geometría final se presenta en la Figura 5.4. Estos puertos corresponden a las mirillas que tiene físicamente el reactor y al puerto donde se realiza la conexión eléctrica del ánodo hacia la fuente de alimentación.



Figura 5.3
Planos base de diseño de las paredes internas del reactor
(unidades dadas en milímetros)

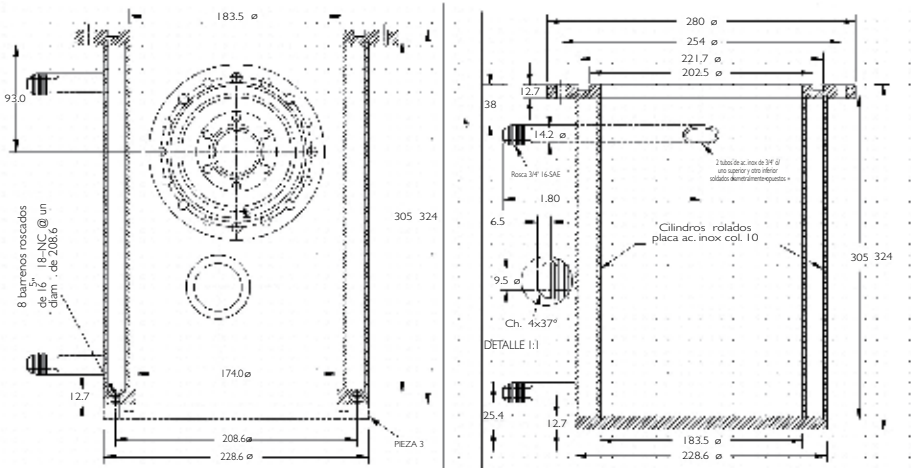
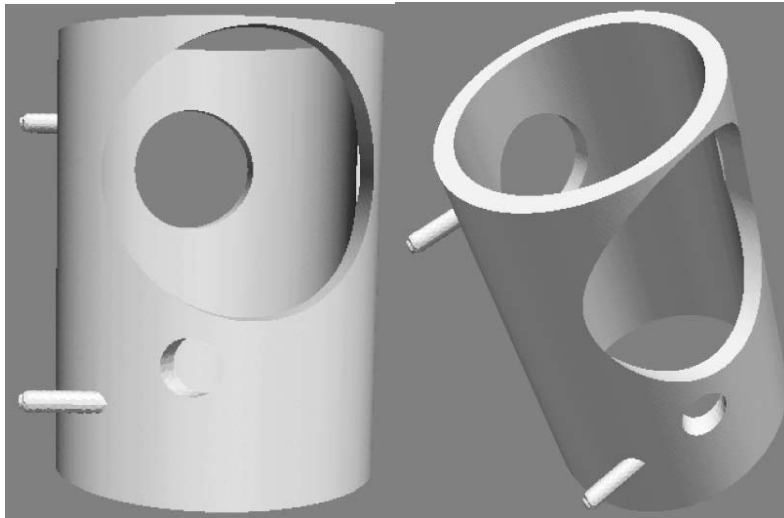


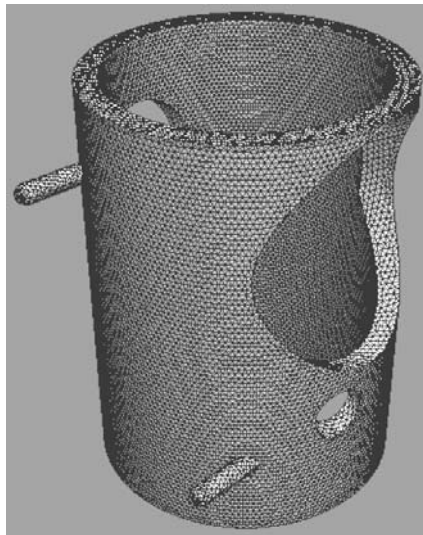
Figura 5.4
Geometría final del volumen interior de las paredes del reactor



5.3 Malla y tipo de células para la geometría del volumen

El tipo de células que conforman la malla son de tipo tetraedros, y la malla cuenta con 211,814 células, como se puede imaginar a partir de la Figura 5.5.

Figura 5.5
Malla de la geometría del volumen interior
de las paredes del reactor

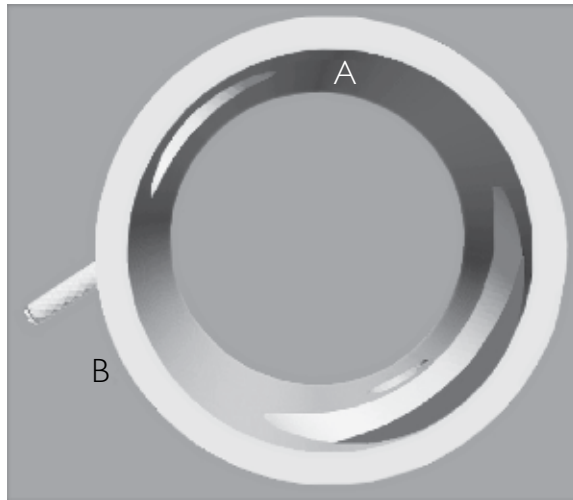


5.4 Condiciones de frontera de la geometría

Las condiciones de frontera para este modelo son simples, tal como se muestra en la Figura 5.6, esto debido a que sólo se utilizaron dos valores de temperatura. La primera condición fue establecer el valor del perfil de temperatura obtenido en la pared de 1,400 K en el radio A, y la segunda condición fue dejar que el programa Code Saturne 2.0.4 calculara el perfil de temperatura para el resto de la geometría, obteniendo así la evolución de la temperatura en el interior de las paredes del reactor.



Figura 5.6
Condiciones de frontera de la geometría
del volumen interior de las paredes



5.5 Espectroscopía de Emisión Óptica

El principio de funcionamiento de la Espectroscopía de Emisión Óptica (OES) se basa en la separación de una señal luminosa en sus diferentes componentes espectrales y el censado de éstos a través de un sistema optoelectrónico. La emisión óptica de un plasma ocurre mediante la excitación por impacto electrónico de un átomo o molécula, seguida por una desexcitación a un nivel de energía menor, emitiendo un fotón que contiene determinada energía (longitud de onda de la luz) igual a la diferencia que existe entre los dos estados de energía [Si-2013].

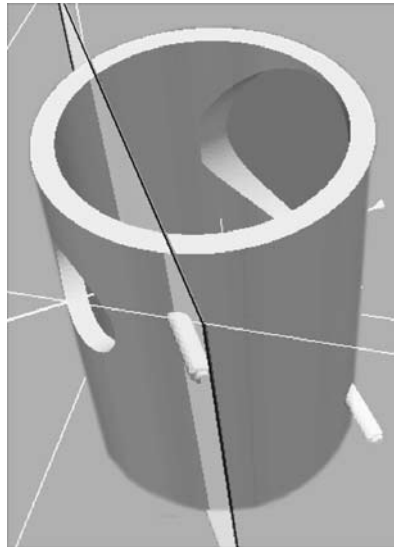
El método oes proporciona información esencial acerca de las especies involucradas, su intensidad y longitud de onda que emiten. Basándose en esta información es posible determinar variables tales como temperatura y densidad. Los resultados obtenidos en los espectros adquiridos experimentalmente presentan valores de temperatura: para $P1=1500\text{ W}$, $t1=5001.1\text{ K}$, para $P2=2000\text{ W}$, $t2=6661.3\text{ K}$ y, por último, para $P3=2625\text{ W}$, $t3=7367.2\text{ K}$ [Va-2013].



5.6 Paredes interiores del reactor

Es importante mencionar que para simular el perfil de temperatura modelo a través del tiempo fue necesario utilizar el aire como medio, en lugar del líquido que fluye en el interior del reactor; esto debido a que Code Saturne 2.0.4 sólo maneja gases. Para poder observar la evolución de la temperatura en el volumen fue necesario realizar un corte transversal, como se muestra en la Figura 5.7.

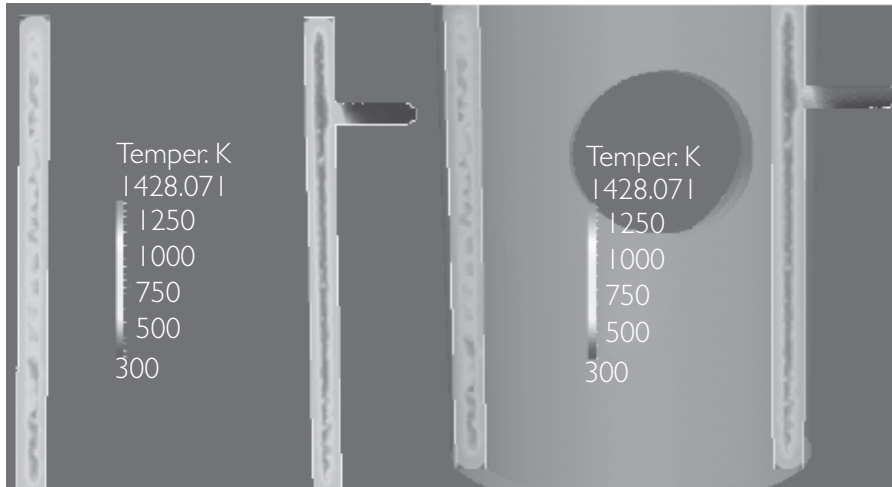
Figura 5.7
Corte transversal de la geometría
para poder apreciar el perfil de temperatura



Una vez realizado el corte transversal se puede apreciar el resultado del perfil de temperatura inicial, cuya evolución afecta en el interior del volumen de las paredes. El perfil de temperatura inicial colocado en la condición de frontera es el valor máximo de temperatura que se obtiene en el modelo de la Figura 5.7. Los valores iniciales de frontera se presentan en la Figura 5.8.



Figura 5.8
Perfil de temperatura inicial



La evolución de la temperatura en el volumen interior de las paredes del reactor a través del tiempo se muestra en la Figura 5.9, y se puede observar cómo la temperatura va disminuyendo conforme transcurre el tiempo, hasta llegar a un valor de temperatura ambiente.



Figura 5.9
Evolución del perfil de temperatura a través del tiempo



Como se mencionó, la simulación se realizó considerando el aire como fluido refrigerante, lo que demuestra que el sistema de refrigeración a base de agua puede ser reemplazado por uno de flujo de aire.



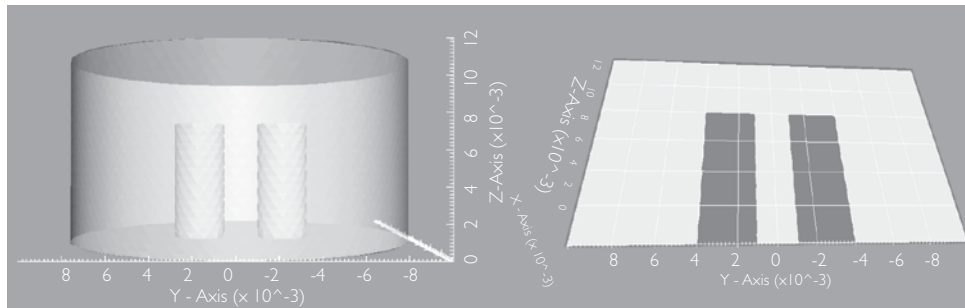
Capítulo 6

Arco eléctrico entre dos electrodos

6.1 Geometría del modelo de dos electrodos paralelos

Esta geometría se desarrolló con el propósito de simplificar el modelado de un reactor de tres electrodos divergentes para un arco deslizante trifásico [Ga-2012] [Sa-2010] [Sa-2011]. En la Figura 6.1 se muestra la geometría propuesta y las dimensiones del reactor dadas en metros.

Figura 6.1
Geometría del reactor en configuración de dos electrodos



Esta geometría representa inicialmente el punto más cercano de los electrodos, antes de la divergencia de los mismos de acuerdo con la geometría real de dicho reactor [Ga-2012] [Sa-2010] [Sa-2011]. Una vez obtenido en el modelo se podrá escalar a la geometría completa del reactor original.

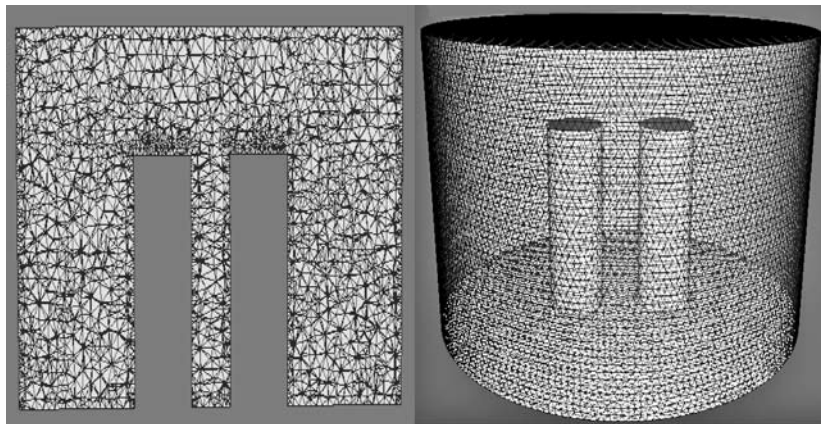


Los electrodos tienen un diámetro 0.003 m, con una longitud de .008 m; la cavidad donde se encierran los electrodos tiene un diámetro de .02 m, con una altura de .012 m, lo suficiente para generar el arco eléctrico entre los dos electrodos.

6.2 Malla de la geometría

Al igual que en el punto anterior, para la geometría se probaron distintos tipos de células que forman la malla, teniendo como mejor respuesta la célula tipo tetraedro. Con este tipo de célula se obtuvo una buena distribución de la malla en la geometría, no así para los demás tipos de células, en los que ni siquiera se puede generar una imagen del reactor. Esto se debe a que los electrodos son más pequeños y, como resultado de la pequeña dimensión de los electrodos, no hubo acoplamiento de las células tipo cubo y hexaedro. En la Figura 6.2 se muestra la distribución de la malla por tetraedros en la geometría.

Figura 6.2
Malla de la geometría de reactor en configuración de dos electrodos



La malla está formada por 266,860 tetraedros o células. Se realizó una comprobación del funcionamiento de la malla con la herramienta cs_preprocess, obteniendo un óptimo resultado.



6.3 Condiciones de frontera aplicadas a la geometría

Para este tipo de modelos no es posible utilizar la técnica de término fuente, ya que ésta no tiene movimiento ni se puede deslizar; además, es preponderante fijar un volumen por medio de la programación y no es posible moverlo; en consecuencia, sólo se aplican las cinco ecuaciones que rigen los modelos de arco eléctrico, aplicadas a las condiciones de frontera.

En la Figura 6.3 y la Tabla 6.1 se describen las condiciones de frontera utilizadas en este modelo de descarga de arco eléctrico.

Figura 6.3
Condiciones de frontera en la geometría del reactor

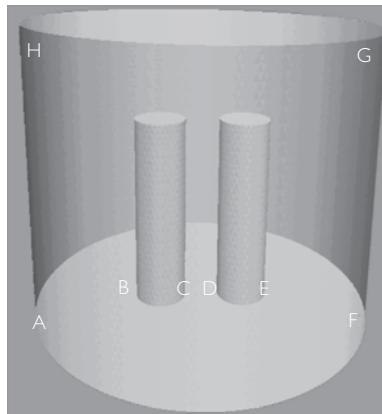


Tabla 6.1
Condiciones de frontera

Long.	Temp. (K)	Vel. (m/s)	Volt. (V)	V. Pot. (Trn)
A-B	300	0	0	0
B-C	1000	0	-5	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \vec{n}}$
D-E	1000	0	0	0
E-F	300	0	0	0
F-G	300	0	$\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$	0
G-H	$\frac{\partial T}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \vec{n}}$
H-A	300	0	$\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$	0



Se observa que en el espacio entre los dos electrodos con longitud C-D no se conoce valor alguno, por lo que el programa tendrá que calcularlos con la programación correspondiente a cada ecuación. Para ayudar a la formación del arco eléctrico, se le asigna un valor inicial de temperatura de 1,000 K a los dos electrodos, y al resto de las paredes se le asigna una temperatura ambiente de 300 K. El voltaje de alimentación propuesto para el reactor es directo de 5 V y éste es aplicado al cátodo por la distancia B-C, mientras que al ánodo se le asigna un valor de cero volts, definido por la distancia que hay en D-E.

En este caso específico se recurrió a la useliv.f90, librería de herramientas de Code Saturne 2.0.4 para manejar una temperatura inicial de volumetría en la geometría, y su principal función fue la de ignición para la formación de un arco eléctrico en el lugar seleccionado.

Esta librería se localiza dentro de los módulos contenidos en la carpeta SRC, en específico en el módulo eléctrico. La programación de esta temperatura inicial por medio de la librería citada se describe a continuación.

```

if ( ippmod(ielarc).ge.1 ) then
  mode = -1
  tinit = t0(iphas)
  coefe(1) = 1.d0
  if ( ngazg.gt. 1 ) then
    do iesz = 2, ngazg
      coefe(iesz) = 0.d0
    enddo
  endif
  call elthht(mode,ngazg,coefe,hinit,tinit)
  call elthht(mode,ngazg,coefe,hinitdos,9000.0d0)
else
  mode = -1
  tinit = t0(iphas)
  call usthht(mode,hinit,tinit)
endif

```

En la primera parte del programa se asigna el valor inicial de la temperatura t_0 y, conforme transcurre el tiempo, se asigna hasta un valor cero. En este caso el valor asignado es de 9,000 K.

```

do iel = 1, ncel
  rtp(iel,isca(ihm)) = hinit

```



```

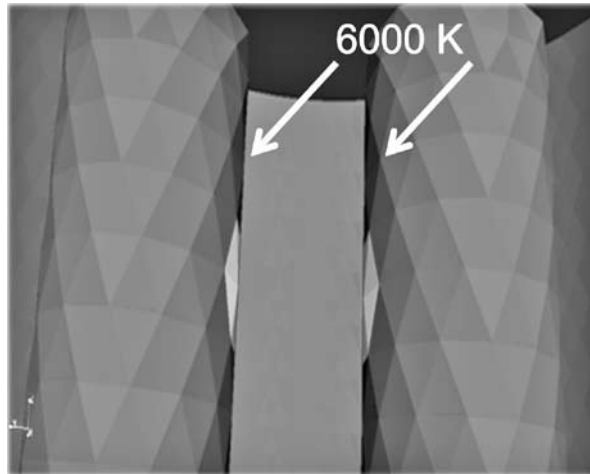
if (xyzcen(3,iel).lt.0.0015d0 .and. xyzcen(3,iel).gt.0.001d0.and.xyzcen(2,iel).
lt.0.0011d0.and.&
xyzcen(2,iel).gt.-0.0011d0.and.xyzcen(1,iel).lt.0.0003d0.and.xyzcen(1,iel).gt.-0-
.0003d0) then
rtp(iel,isca(ihm)) = hinitdos
endif
enddo

```

En esta última parte del programa se delimitó el volumen donde se transmitió la temperatura inicial t_0 ; en tal caso el volumen seleccionado se encuentra entre los dos electrodos en forma de cubo muy pequeño, de .0001 por cada lado; el volumen es trasversal, casi a la mitad de la longitud de los electrodos, tocando apenas tanto al ánodo como al cátodo, y ahí es donde comienza el arco eléctrico, debido a la temperatura inicial, generando así la densidad de corriente.

Para reafirmar que el arco se inició donde se colocó el volumen para t_0 , se implementaron dos condiciones de frontera especiales para esta ocasión, que consisten en dos puntos en los electrodos, justamente donde toca el volumen asignado a t_0 ; en estos puntos se condiciona una temperatura todavía mayor a 1,000 K que tienen asignados los electrodos; la temperatura colocada en esos puntos es de 6,000 K. En la Figura 6.4 se muestran dichas condiciones en los electrodos.

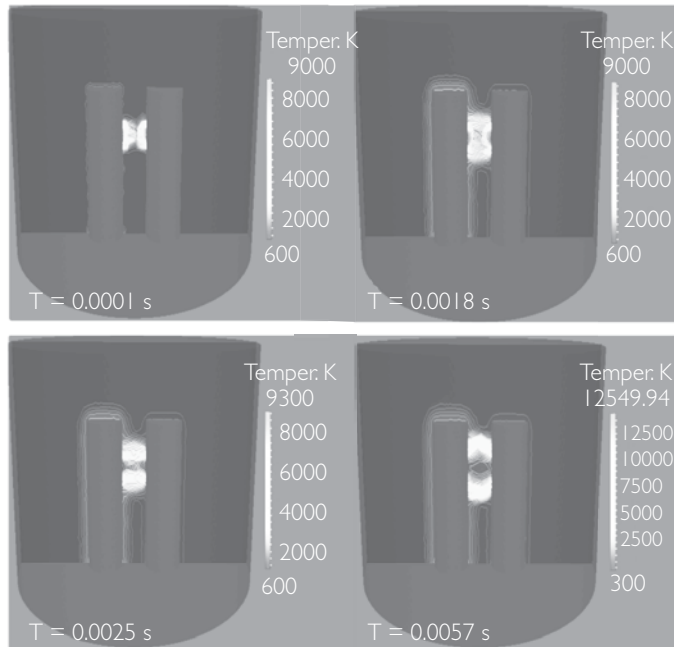
Figura 6.4
Segmentos dentro de los electrodos
con una alta temperatura



6.4 Arco eléctrico entre dos electrodos

El perfil de temperatura calculado para el modelo descrito con anterioridad tiene variaciones importantes conforme evoluciona el tiempo, lo que permite demostrar el efecto de deslizamiento (mínimo) a través de los electrodos. Por tal motivo, partiendo de este modelo se modifican las condiciones de frontera en los electrodos para lograr un desplazamiento más significativo. En la Figura 6.5 se puede ver el desarrollo del arco eléctrico entre los electrodos respecto al tiempo.

Figura 6.5
Evolución del arco eléctrico respecto al tiempo



Con las condiciones de frontera propuestas en la sección anterior, se consiguió que el arco eléctrico se forme entre los puntos seleccionados donde se aplicó una temperatura de 6,000K. Con lo anterior se tiene un control del punto de origen del arco eléctrico. Esto es importante porque a partir de ello se tiene una base para poder controlar el movimiento del arco eléctrico a través de los electrodos.



Capítulo 7

Movimiento del arco eléctrico

7.1 Condiciones de frontera

Para conseguir el deslizamiento del arco eléctrico en la longitud de los electrodos, prácticamente se aplican las mismas condiciones de frontera utilizadas anteriormente. Para lograr el movimiento se requiere involucrar la velocidad de gas; como se sabe, el movimiento del arco depende de dicha velocidad y en los modelos que se han mostrado prácticamente no se está tomando en cuenta la velocidad.

Para lograr el deslizamiento debemos considerar un factor muy importante, que es la conductividad eléctrica, la cual, como es sabido, depende de la temperatura. Esto significa que si hay un movimiento en la temperatura, habrá movimiento con la conductividad eléctrica y, por tanto, podemos mover el arco eléctrico.

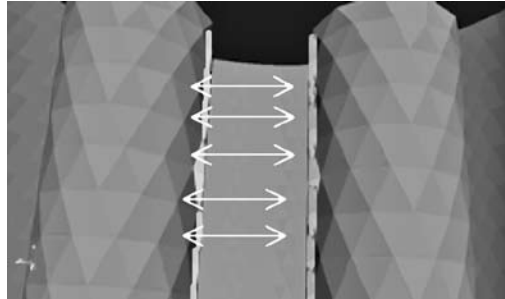
Para aplicar el concepto anterior a nuestro modelo de arco eléctrico deslizante, necesitamos crear un programa que pueda cambiar las condiciones de frontera, específicamente las de la temperatura, a través del tiempo. Por ello es necesario mover los puntos establecidos en las condiciones de frontera a lo largo de los electrodos, según se muestra en la Figura 7.1

Lo anterior es posible agregando unas líneas de programación diferentes a lo habitual, utilizadas para la selección de las condiciones de frontera. A continuación se muestra y se explica la programación que se realizó y con la que fue posible lograr el movimiento del arco eléctrico.

```
velocidad = 0.8d0 ! metros / seg  
E = ((ntcabs-80d0)*dtref*velocidad)  
if(E.lt.0) then  
  p1=.001d0
```



Figura 7.1
Segmentos dentro de los electrodos con una alta temperatura



```
p2=.0015d0
endif
if(E.gt.0) then
p1=E+0.001d0
p2=E+0.0015d0
endif
```

Esta parte del programa involucra la velocidad del arco eléctrico. Para esto es necesario el uso de una variable llamada velocidad, a la cual se le asigna el valor de 8 metros sobre segundo. Es necesario recordar que la velocidad está dada por una distancia sobre tiempo y, en este caso, la distancia que recorrerá el arco eléctrico, que es la del electrodo con una longitud de .008 m y un tiempo de simulación total de .001 segundos. Al variar el tiempo de simulación se cambia el valor a la variable de velocidad. La variable E es utilizada para realizar el movimiento en la condición de frontera de los electrodos; esta variable está compuesta por ntcabs, dtref y por la variable velocidad; ntcabs es global, propia del programa Code Saturne 2.0.4, y se recurre a ella para asignar el número de iteraciones que tendrá el programa; dtref es el tiempo que dura cada iteración, normalmente toma un valor muy pequeño de tiempo. Se puede observar que a ntcabs se le está restando una constante con valor de 80, debido a que se le da un retardo para dar un tiempo a la formación del arco eléctrico y después deslizarlo. Este retardo de 80 es el número de iteraciones que necesita el programa para generar el arco eléctrico. Los puntos p1 y p2 delimitan la condición de frontera de la temperatura donde se moverá a través del electrodo; su punto inicial depende de la variable E. Cuando E tenga el valor de cero, no se van a mover los puntos; por tanto, el arco eléctrico se formará donde se encuentren ubicados los puntos p1 y p2, que en este caso es el inicio del electrodo; posteriormente, cuando E tenga un valor mayor a cero, los puntos p1 y



p2 toman un valor diferente al del inicio y, por tanto, comienza a aumentar el valor de p1 y p2, y la condición de frontera de la temperatura, delimitada por p1 y p2, comienza a moverse.

```

if (cdgfb0(3,ifac).lt.p2.and.cdgfb0(3,ifac) &
.gt.p1.and.cdgfb0(2,ifac).gt.-0.001 d0.and.cdgfb0(2,ifac).lt.-0.001 d0 ) then
ii = ihm
icodcl(ifac,isca(ii)) = 1
mode = -1
coefe(1) = 1.d0
if ( ngazg .gt. 1 ) then
do iesp = 2, ngazg
coefe(iesp) = 0.d0
enddo
endif
call elthht(mode,ngazg,coefe,enth, 6000.0D0)
rcodcl(ifac,isca(ii),1) = enth

```

Esta sección del programa corresponde al cátodo y se encarga de colocar la condición de frontera de temperatura en el cátodo; tal condición se desplaza en la longitud del cátodo. Se puede observar que involucran el punto p1 y p2 en las condiciones límites seleccionadas para el cátodo, también contienen las coordenadas numéricas donde se localiza el cátodo. En el penúltimo renglón se localiza el valor de la temperatura que será colocada en esas condiciones de frontera, que para este caso tiene un valor de 6,000 K.

```

if (cdgfb0(3,ifac).lt.p2.and.cdgfb0(3,ifac) &
.gt.p1.and.cdgfb0(2,ifac).gt.+0.001 d0.and.cdgfb0(2,ifac).lt.+0.001 d0 ) then
ii = ihm
icodcl(ifac,isca(ii)) = 1
mode = -1
coefe(1) = 1.d0
if ( ngazg .gt. 1 ) then
do iesp = 2, ngazg
coefe(iesp) = 0.d0
enddo
endif
call elthht(mode,ngazg,coefe,enth, 6000.0D0)
rcodcl(ifac,isca(ii),1) = enth

```

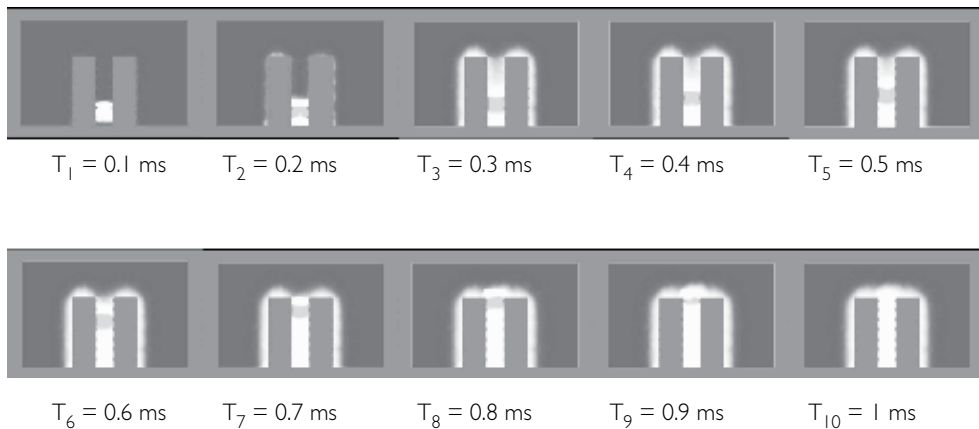


Esta sección del programa corresponde al ánodo y se encarga de colocar la condición de frontera de temperatura en el ánodo y tiene la misma función que la del cátodo, lo único que las diferencia es el valor de las coordenadas donde se encuentra localizado el ánodo.

7.2 Movimiento del arco eléctrico

Aplicando una velocidad de entrada, se obtiene el deslizamiento del arco, mismo que se presenta en la Figura 7.2, donde se observa el movimiento del arco eléctrico a través de la longitud de los electrodos respecto al tiempo.

Figura 7.2
Desplazamiento del arco eléctrico
a través de los electrodos respecto al tiempo



Es posible lograr el resultado del deslizamiento del arco eléctrico a partir de las condiciones de frontera de temperatura en el ánodo y cátodo. Es importante mencionar que para conocer el resultado de la corriente eléctrica fue imperativo desarrollar otra programación adicional a lo establecido, ya que con la geometría y condiciones del modelo no es posible obtener el valor de la densidad de corriente eléctrica, esto debido al deslizamiento del arco eléctrico. Para resolver el problema es necesario hacer uso de la librería `uselrc.f90`, que permite calcular la potencia del modelo, como se muestra a continuación.



```

ipcefj = ipproc(iefjou)
somje = 0.d0
do iel = 1, ncel
  somje = somje+propce(iel,ipcefj)*volume(iel)
enddo
if(irangp.ge.0) then
  call parsom (somje)
endif

```

Este código fuente se utiliza para calcular el valor de la potencia, pero no es necesario colocar valor alguno para indicar al programa el cálculo ya que automáticamente lo realiza al activar la librería. Este valor de potencia es utilizado para obtener la corriente que circula en el circuito, pues se conoce el voltaje aplicado al sistema.

Los valores de los resultados del modelo de simulación de arco eléctrico deslizante se almacenan en una carpeta llamada RESU, esta carpeta es generada por Code Saturne 2.0.4 al iniciar un nuevo programa. La carpeta RESU contiene el archivo listing, donde se registran los valores de los resultados del modelo como los de la temperatura, la entalpía, entre otros. Para poder ocupar el valor de la potencia, y obtener la corriente es necesario acceder al dato, y para lograrlo se requiere escribir en el archivo listing, utilizando la librería eclris.f90. A continuación se muestran las instrucciones de programación para escribir en el archivo listing.

```

vmario = max(abs(varmin(7)),abs(varmax(7)))
intensidad = (fmario / vmario)

```

En esta parte del programa código fuente se obtiene el valor de la corriente que circula entre los electrodos. La variable *vmario* es el voltaje que se aplica en el modelo para generar la descarga. La variable de nombre *fmario* es una variable global utilizada para almacenar los resultados de la intensidad de corriente obtenidos de la librería *uselrc.f90*.

```

write(nfecra, I325)
write(nfecra, I326)
write(nfecra,*)'Fuerza', fmario
write(nfecra,*)'Intensidad', intensidad
write(nfecra,*)'Vmario', vmario
write(nfecra, I327)
I325 format (/ ,3X,'** MARIO IBÁÑEZ OLVERA',/, &

```




```
3X; -----)
I326 format (' Variable Valor')
I327 format ('-----', &
'-----')
```

En esta sección se observa el código fuente donde están las instrucciones para mandar a escribir a listing; como es notorio en las cinco primeras líneas, la orden es imprimir los valores de las variables fmario, así como las variables intensidad y vmario. El resultado de escribir esto en la librería antes mencionada se muestra en la Figura 7.3.

Figura 7.3
Valores de voltaje, corriente
y potencia, impresos en el archivo listing

```

** INFORMATION ON THE TIME STEP
-----|
Criterion      Value      at      xc      yc      zc
-----|-----
Courant min    0.00000E+00 -0.12822E-02 -0.20422E-03 0.23289E-02
Courant max    0.00000E+00 -0.12822E-02 -0.20422E-03 0.23289E-02
Fourier min    0.34258E-01 -0.66046E-02 -0.17258E-03 0.37655E-02
Fourier max    0.24934E+02 0.14688E-03 -0.50316E-03 0.10483E-02
Cou_Fou min    0.34258E-01 -0.66046E-02 -0.17258E-03 0.37655E-02
Cou_Fou max    0.24934E+02 0.14688E-03 -0.50316E-03 0.10483E-02
-----|-----

** MARIO IBAÑEZ OLVERA
-----
Variable      Valor
Fuerza        0.0000000000000000
Intensidad    0.0000000000000000
Vmario        23.733779227411709
-----

CPU TIME FOR THE TIME STEP          1:          0.81388E+00
=====
```

Con estos datos impresos en listing se tiene una referencia de comportamiento de los valores de corriente, potencia y voltaje durante la descarga de arco eléctrico deslizante. Estos valores son muy importantes ya que se puede tener una idea del comportamiento experimental de la descarga basándose en los valores obtenidos en el modelo de simulación.



Capítulo 8

Arco eléctrico en tres electrodos

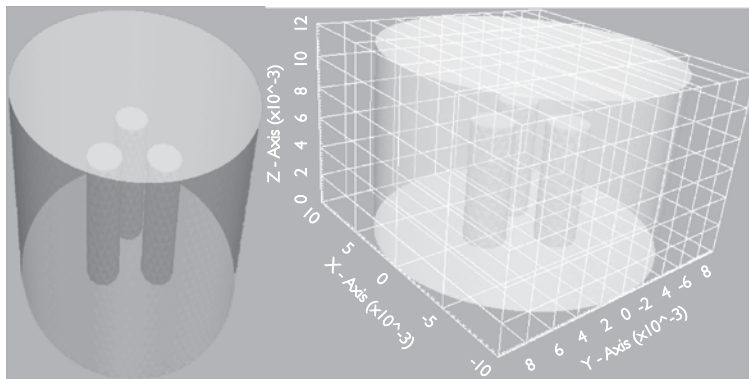
8.1 Arco eléctrico en tres electrodos

La configuración de la geometría para este modelo obedece a la estructura del reactor trifásico deslizante [Ga-2012] [Sa-2010] [Sa-2011] y sienta las bases para la generación del arco eléctrico en tres fases, deslizándose a lo largo de los electrodos.

8.2 Geometría del modelo del reactor de arco eléctrico

En la Figura 8.1 se muestra la geometría propuesta y las dimensiones del reactor dadas en metros.

Figura 8.1
Geometría del reactor de arco eléctrico
en configuración de tres electrodos (unidades en milímetros)



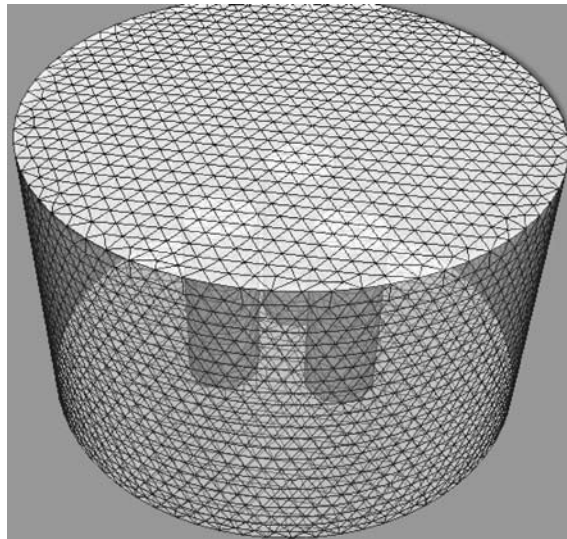
Se presenta justamente la parte donde se inicia el arco eléctrico del reactor original; el motivo es que, una vez obtenido en el modelo, se pudiera escalar a la geometría completa del reactor original.

Los electrodos tienen un diámetro de .003 m, con una longitud de .008 m; la cavidad donde se encierran los electrodos tiene un diámetro de .02 m, con una altura de .012 m, lo suficiente para generar el arco eléctrico entre los electrodos.

8.3 Malla de la geometría

La geometría fue probada con distintos tipos de células que forman la malla, teniendo como mejor respuesta la célula tipo tetraedro. Con este tipo de célula se obtuvo una buena distribución de la malla en la geometría, no así para los demás tipos de células, en los que incluso no se puede generar una imagen del reactor. Esto se debe a que los electrodos son más pequeños y, como resultado de la pequeña dimensión de los electrodos, no hubo acoplamiento de las células tipo cubo o hexaedro. En la Figura 8.2 se muestra cómo se conformó la distribución de la malla por tetraedros en la geometría.

Figura 8.2
Malla de la geometría compuesta de tetraedros



La malla está formada por 42,752 tetraedros o células, y se le realizó una prueba de funcionalidad con la herramienta `cs_preprocess`. Esta comprobación se refiere a que corre un programa Code Saturne 2.0.4 con la librería `cs_preprocess`, y se corroboró que el funcionamiento es correcto.

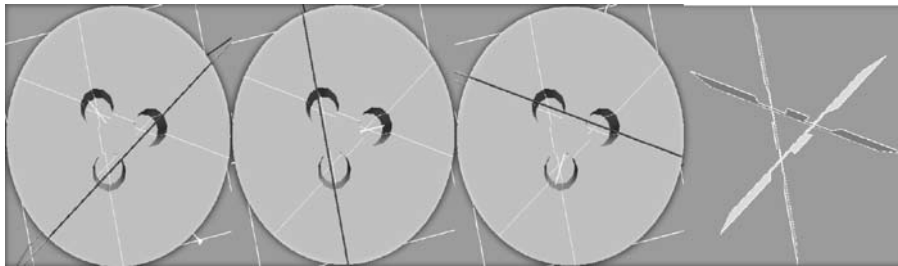
8.4 Condiciones de frontera aplicadas a la geometría

Para este modelo de simulación de arco eléctrico en configuración de tres electrodos se manejaron tres condiciones de frontera diferentes. Para el análisis de las condiciones de frontera, se le asignó un número a los electrodos para poder identificar a los diferentes electrodos dentro de la geometría y así poder colocar adecuadamente las condiciones de frontera cuando se requieran.

Se utilizaron tres diferentes condiciones de frontera, las cuales se aplicaron a la geometría conforme evolucionaba el tiempo. Para poder mostrar todas las condiciones de frontera utilizadas y distinguirlas se les relaciona con el tiempo en el que se utilizan dentro del modelo de descarga de plasma en configuración de tres electrodos.

Las tres diferentes condiciones de frontera corresponden a las tres caras o lugares donde se desarrolla el arco eléctrico. En la Figura 8.3 se muestra dónde se localizan esos tres lugares en la geometría y los cortes que se realizaron para poder analizar y visualizar las condiciones las condiciones de frontera.

Figura 8.3
Secciones utilizadas en la geometría para observar las condiciones de frontera



En la Figura 8.4 y la Tabla 8.1 se describen las condiciones de fronteras utilizadas en este modelo de descarga de arco eléctrico deslizante en configuración de tres electrodos en un tiempo igual o menor a 0.23 seg.



Figura 8.4
Condiciones de frontera representadas en la geometría

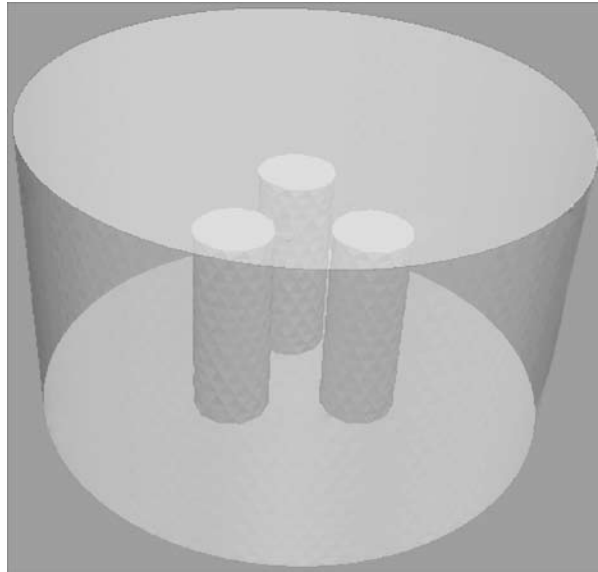


Tabla 8.1
Condiciones de frontera utilizando electrodos 1 y 2
($0 < t < 0.23$ s)

<i>Long.</i>	<i>Temp.</i> (K)	<i>Vel.</i> (m/s)	<i>Volt.</i> (V)	<i>V. Pot.</i> (Vm)
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	-5V	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$
D-E	1000 K	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	$\frac{\partial \varphi}{\partial n}$	0
G-H	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$
H-A	1000 K	0	0	0



Se observa en las condiciones de frontera que el valor del espacio entre los dos electrodos con longitud C-D no se conoce, por lo que el programa tendrá que calcularlo con la programación correspondiente a cada ecuación, ya antes descrita en el punto anterior. Para ayudar a la formación del arco eléctrico se le asigna una temperatura de 1,000 K a los dos electrodos y al resto de las paredes se le asigna una temperatura ambiente de 300 K. El voltaje de alimentación propuesto para el reactor es directo de 50 V y éste es aplicado al cátodo por la distancia B-C, mientras que al ánodo se le asigna un valor de cero volts descrito por la distancia que hay en D-E. Para el tercer electrodo son los mismos valores que se utilizaron en F-G y H-A, esto debido a que no hay actividad en esa zona.

En la Tabla 8.2 se describen las condiciones de fronteras utilizadas en este modelo de descarga de arco eléctrico en configuración de tres electrodos en un tiempo mayor a 0.23 segundos y menor o igual a 0.46 segundos.

Tabla 8.2
Condiciones de frontera utilizando electrodos
2 y 3 (0.23 s < t < 0.46 s)

Long.	Temp. (K)	Vel. (m/s)	Volt. (V)	V.Pot. (Tm)
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	5V	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial \phi}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$
D-E	1000 K	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	$\frac{\partial \phi}{\partial n}$	0
G-H	$\frac{\partial T}{\partial n}$	$\frac{\partial V}{\partial n}$	$\frac{\partial \phi}{\partial n}$	$\frac{\partial A}{\partial n}$
H-A	1000 K	0	0	0

En la Tabla 8.3 se describen las condiciones de frontera utilizadas en este modelo de descarga de arco eléctrico en configuración de tres electrodos en un tiempo mayor a 0.46 segundos y menor o igual a 0.69 segundos.



Tabla 8.3
Condiciones de frontera utilizando electrodos 3 y 1
(0.46 s < t < 0.69 s)

Long.	Temp. (K)	Vel. (m/s)	Volt. (V)	V. Pot. (Vm)
A-B	300 K	0	0	0
B-C	1000 K	0	-5V	0
C-D	$\frac{\partial T}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$
D-E	1000 K	0	0	0
E-F	300 K	0	0	0
F-G	300 K	0	$\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{n}}$	0
G-H	$\frac{\partial T}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial V}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial \varphi}{\partial \bar{n}}$	$\frac{\partial A}{\partial \bar{n}}$
H-A	1000 K	0	0	0

Como se puede observar en las tablas 8.1, 8.2 y 8.3, el voltaje aplicado entre los electrodos se va alternando de polaridad, de un valor negativo a un valor positivo. Esto con el fin de trabajar un voltaje alterno al aplicado a los electrodos.

Para conseguir el deslizamiento del arco eléctrico en la longitud de los electrodos, se utilizó la misma técnica explicada con anterioridad, donde con las condiciones propuestas se consiguió el recorrido del arco a través del electrodo. La diferencia con el anterior modelo de arco eléctrico en configuración de dos electrodos es que se va a rotar el arco eléctrico y el desplazamiento a través del tiempo en los tres electrodos.

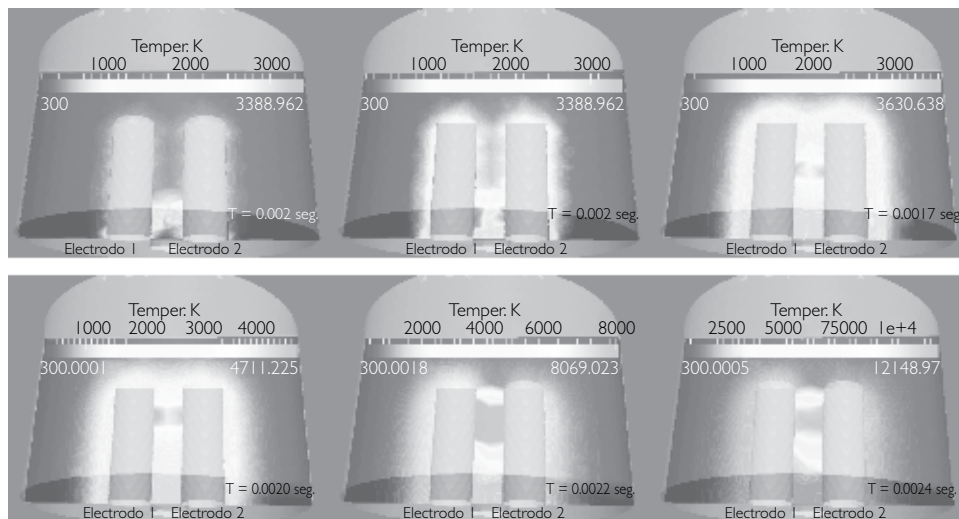
8.5 Modelo del arco eléctrico en tres electrodos

En esta sección se presentan los resultados del modelo. Los resultados del movimiento del arco eléctrico entre los electrodos 1 y 2 se muestran en la Figura 8.5.

La misma técnica aplicada en el modelo de simulación del arco eléctrico deslizante en configuración de dos electrodos fue utilizada con éxito en esta configuración de tres electrodos. El resultado mostrado en la Figura 8.5 presenta la evolución del arco eléctrico entre los electrodos 1 y 2; el resultado del arco entre los electrodos 2 y 3, por último, 3 y 1, es muy similar al mostrado con anterioridad.



Figura 8.5
Desplazamiento del arco eléctrico entre los electrodos
1 y 2, conforme avanza el tiempo



Apéndice A

Algunas recomendaciones

Se recomienda, para disminuir el tiempo utilizado en el desarrollo del modelo de simulación de arco eléctrico, primero realizar la geometría con muy pocos detalles, es decir, que la geometría tiene que construirse con lo más esencial que defina geoméricamente el modelo a simular. Una vez generada la geometría y obteniendo los primeros resultados, se puede mejorar la geometría. En segundo lugar se puede trabajar con una malla simple, es decir, número pequeño de elementos que estructuren la malla (tetraedros, cubos, hexaedros, etc.), esto con el fin de probar el funcionamiento correcto de la geometría con las condiciones de frontera aplicadas al modelo. Obteniendo los primeros resultados, se debe aumentar el número de elementos que componen la malla para poder obtener un mejor resultado.

Es importante considerar que para utilizar Code Saturne 2.0.4 se debe tener conocimientos avanzados de programación Fortran 90 y programación en Linux, ya que con éstos se puede simplificar considerablemente el tiempo de programación, así como disminuir el tiempo máquina al momento de ejecutar el programa.

Se recomienda desarrollar una técnica empleando la tecnología de Unidades de Procesamiento Gráficas (GPU). Esta técnica sería sólo para disminuir el problema del elevado consumo de tiempo al momento generar una malla con un número elevado de elementos que la componen, y probar la librería CUDA-Fortran, para verificar si es posible trabajar Code Saturne 2.0.4 con tecnología GPU.

Se recomienda desarrollar el modelo de simulación de los reactores en configuración de dos y tres electrodos con electrodos divergentes. Es necesario validar con OES de alta velocidad estos modelos.

La instalación de Code Saturne 2.0.4 se realiza en un sistema operativo Linux; por tanto, es necesario instalar un sistema operativo Linux de 64 bits o 32 bits.



Las distribuciones de Linux con las que se puede instalar y trabajar Code Saturne 2.0.4 sin ninguna complicación son:

Ubuntu
Link de descarga:
<http://www.ubuntu.com/download>

Fedora
Link de descarga:
<https://fedoraproject.org/es/>

Una vez seleccionado e instalado el sistema operativo, el siguiente paso es bajar de la página oficial Code Saturne 2.0.4.

Link de descarga:
<http://researchers.edf.com/software/code-saturne/download-code-saturne-80059.html>

Es importante mencionar que existen dos formas de instalar el software, la primera es automáticamente. Para instalar automáticamente es necesario bajar el archivo Installateur 2.0.4 y ejecutarlo. La segunda opción es descargar las librerías básicas Kernel 2.0.4 y Preprocessor 2.0.2, las librerías obligatorias auxiliares BFT 1.1.5, FVM 0.15.3, y MEI 1.0.3, e instalar, paso a paso, cada una de las librerías.

Para instalar el software Salome, utilizado para crear la geometría y la malla, se descarga de la página oficial de Salome y posteriormente se instala. En este trabajo se utilizó la versión Salome 6.6.0.

Link de descarga:
<http://www.salome-platform.org/downloads/current-version>

Por último, el programa visualizador de resultados Paraview se puede descargar de su página oficial, y no es necesario instalarlo, pues es un programa portable. En este trabajo se utilizó la versión Paraview 3.14.1.

Link de descarga:
<http://www.paraview.org/paraview/resources/software.php>



APÉNDICE B

FUENTES CONSULTADAS

- [Ar-2004] Archambeau F., Sakiz M., Namane, M., *IJFV International Journal On Finite Volumes* (2004), 1, 1-62.
- [Bh-2006] Bhosle S., G. Zissis, J.J. Damelin court, A. Capdevila, "A New Approach for Boundary Conditions in Dielectric Barrier Discharge Modeling", *XVI International Conference on Gas Discharges and their Applications*, 11 a 15 de septiembre de 2006, Xian (China).
- [Bo-1994] Boulous M. I., P. Fauchais, E. Pfender, "Thermal Plasma: Fundamentals and Applications", vol. I, Plenum Press, Nueva York, (1994).
- [Co-1943] Courant, R. y Herbert R., *¿Qué son las matemáticas? Conceptos y métodos fundamentales*, vol. I (1941), pp. 86-120.
- [De-1992] Dede E. J., F. Arenas, J. García, J. González, J. William, "Starter Unit Free of Interferences for Plasma Installations", *J. High Tem, Chem. Process* (1992).
- [Fe-1998] Ferreira J.A., J.A. Roux, "A Series Resonant Converter for Arc-Striking Applications", *IEEE Trans. Ind. Electron.*, 45, 585-592, (1998).
- [Fe-2001] Felippa Carlos A. "A Historical Outline of Matrix Structural Analysis: A Play in Three Acts", *Computers & Structures* (2001), 79, 14, 1313-1324. <<http://www.colorado.edu/engineering/CAS/Felippa.d/FelippaHome.d/Publications.d/Report.CU-CAS-00-13.pdf>>.
- [Ga-2012] Garduño M. "Plasma trifásico deslizante", Tesis de doctorado, Instituto Tecnológico de Toluca, México (2012).



- [Jo-2000] Hagelaar G. J. Maria, "Modeling of Microdischarges for Display Technology", Ph. D. Dissertation, Technische Universiteit Eindhoven, Holanda (2000).
- [Ju-2004] Juanico J. A., "Síntesis y caracterización de nanofibras de carbono para su aplicación en la absorción de gases tóxicos", Tesis de maestría, Universidad Autónoma Metropolitana, México (2004).
- [Ki-2005] Kinnares Vijit, "Circuit Analysis and Modeling of a Phase-Shifted PWM Full Bridge Inverter Fed Ozone Generator with Constant Applied Electrode Voltage", Thailand (2005).
- [Mo-2002] Mokhtari H., M. Hejri, "A New Three Phase-Domain Model Arc Furnaces Using Matlab"; IEEE, 2078-2083 (2002).
- [Mo-2008] Moreno Saavedra H., "Degradación de gases tóxicos (Nox y SOx) mediante la técnica DBD-Corona", Tesis de doctorado, Instituto Tecnológico de Toluca, México (2008).
- [Ne-2004] Nersisyan G., W. G. Graham, "Characterization of a Dielectric Barrier Discharge Operating in an Open Reactor with Flowing Helium", *Plasma Sources Science and Technology*, 13, 582-587, (2004).
- [Pa-2000] Pacheco-Sotelo J., R. Peña-Eguiluz, L. Peña-Eguiluz, A. Segovia de los Ríos, G. Cota-Sánchez, "Plasma Torch Ignition by a Half Bridge Resonant Converter", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 27, 1124-1130, (1999).
- [Pa-2003] Pacheco M., "Synthèse des Nanotubes de Carbone par Électrique", Tesis de doctorado, Université Paul Sabatier, Toulouse, Francia (2003).
- [Ra-2003] Radu I., R. Bartnikas, M. R. Wertheimer, "Frequency and Voltage Dependence of Glow and Pseudoglow Discharges in Helium under Atmospheric Pressure", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 31, 1363-1378 (2003).
- [Ro-2011] Roger W., "Multiphysics Modeling Using COMSOL®: A First Principle Approach", 23 de diciembre (2011).
- [Ro-1995] Roth J. R., "Industrial Plasma Engineering: Characteristics of Plasma", Institute of Physics Publishing, vol. I (1995).



- [Sa-2010] Salazar-Torres J. A., J. Pacheco Sotelo, M. Garduño Aparicio, N. Estrada Martínez, J. Silva Rosas, G. Soria Arguello, M. Ibáñez Olvera, R. Valdivia Barrientos, M. Pacheco Pacheco, "Decomposition of CO₂ by an AC, High Frequency Gliding Arc Discharge, *30 International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum*, 27 de septiembre a 1 de octubre de 2010, Playa del Carmen, Quintana Roo.
- [Sa-2011] Salazar J., J. Pacheco, E. Romero, L. Reyes, M. Ibáñez, M. Pacheco, R. Valdivia, C. Rivera, "H₂S and CO₂ Mixture Degradation By Gliding Arc Discharge", *XIV Latin American Workshop on Plasma Physics*, Mar Del Plata, Argentina, 20-25 de noviembre (2011).
- [Tu-1956] Turner, M. J., R.W. Clough, H. C. Martin y L. C. Topp, "Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures", *Journal of the Aeronautical Sciences*, 23, 805-824, (1956).
- [Va-2003] Valdivia Barrientos R., "Excitación de un plasma por altas frecuencias para propósitos de iluminación", Tesis de licenciatura, Instituto Tecnológico de Toluca, México (2003).
- [Va-2007] Valdivia Barrientos R., J. Pacheco Sotelo, M. Pacheco Pacheco, F. Ramos Flores, A. Cruz Azocar, M. L. Jiménez López, J. S. Benítez Read, R. López Callejas, "Optical and Electrical Diagnosis of a High-Frequency Glow-Arc Discharge and its Application to the Synthesis of Carbon Nanofibers", *IEEE Trans. Plas. Sci.*, 35, 1550-1558, (2007).
- [Va-2008] Valdivia Barrientos R., Sounil Bhosle, "Modeling of Acoustic Resonances in HID Lamps", octubre (2008).
- [Va-2008b] Valdivia Barrientos R., "Efecto de la frecuencia de excitación en la conductividad eléctrica de gases ionizados: estudio y desarrollo electrotécnico", Instituto Tecnológico de Toluca, 20-25 (2008).
- [Va-2012] Valdivia Barrientos R., J. Silva R., M. Ibáñez O., J. Pacheco S., M. Pacheco P., J. Salazar T., F. Ramos F., G. Soria A., M. Hidalgo P., M. Durán G., "Síntesis y caracterización de nanoestructuras de carbono por descarga de arco eléctrico", *XXII Congreso Técnico Científico ININ-SUTIN*, diciembre, Salazar, México (2012).
- [Va-2012b] Valdivia Barrientos R., M. Ibáñez O., J. Silva R., J. Pacheco S., M. Pacheco P., J. Salazar T., F. Ramos F., G. Soria A., M. Hidalgo P., M. Durán G., "Simulación de un arco eléctrico en 3D con el método de volúmenes finitos", *XXII Congreso Técnico Científico ININ-SUTIN*, diciembre, Salazar, México (2012).



- [Va-2011] Valdivia Barrientos R., M. Ibáñez Olvera, J. Pacheco-Sotelo, M. Pacheco Pacheco, J. Silva Rosas, C. Rivera Rodríguez, "Acid Gas Degradation by non-Thermal Plasma and Energy Estimation", *14th Latin American Workshop on Plasma Physics (LAWPP 2011)*, IOP Publishing, Journal of Physics: Conference Series 370 (2012) 012037
- [Va-2013] Valdivia R., J. Silva, M. Pacheco, J. Pacheco, E. Loza, F. Ramos, M. Ibáñez, G. Soria, J. Salazar, M. Durán y M. Hidalgo, "Temperature Diagnosis by Optical Emission Spectroscopy During Carbon Nanotubes Synthesis by Electric Arc", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, noviembre (2013).
- [We-2002] Weddemann A. y V. Thümmel, "Stability Analysis of ALE-Methods for Advection-Diffusion Problems", Bielefeld University, Alemania (2002).
- [Ya-2005] Yang Y., J. J. Shi, J. E. Harry, J. Proctor, C. P. Garner, M. G. Kong, "Multi-layer Plasma Patterns in Atmospheric Pressure Glow Discharges", *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 33, 302-303, (2005).



Simulación de una descarga eléctrica a través de software libre se terminó de imprimir el 6 de febrero de 2015, en los talleres de Ediciones Verbolibre, S.A. de C.V., I.o. de mayo núm. 161-A, Col. Santa Anita, Deleg. Iztacalco, México, D.F., C.P. 08300. Tel.: 3182-0035. <edicionesverbolibre@gmail.com>. La edición consta de 300 ejemplares.

Resulta común la carencia de recursos para adquirir software científico de precios exorbitantes para el desarrollo de investigaciones científicas. El software libre es una opción muy viable para académicos, alumnos o público en general que desarrollan exploraciones en diferentes áreas de la ciencia: matemáticas, física, química, electrónica, robótica, etcétera.

En este libro ofrecemos el ejemplo atento de una aplicación con software libre para simular un arco eléctrico, a partir de distintas librerías. Con esto se comprueba que no es necesario utilizar una licencia privada de alto costo; por el contrario, la mayoría de los sistemas libres son muy eficaces y cuentan con similar o mayor eficiencia que los privados.

