

Induktiefgekoppelde plasmas: die rol van die skermgas in hoëdrywingstoerusting

NJM Grobler

CVD 800

2020-07-15

Induktiefgekoppelde plasmas: die rol van die skermgas in hoëdrywingstoerusting

NJM Grobler
13028759

Department van Chemiese Ingenieurswese
Universiteit van Pretoria

CVD 800

2020-07-15

Induktiefgekoppelde plasmas: die rol van die skermgas in hoëdrywingstoerusting

NJM Grobler (13 028 759), Universiteit van Pretoria

Ter voltooiing van die graad

Magister Ingenieurswese (Chemiese Ingenieurswese)

Promotor: Prof PL Crouse

Mede-promotor: Dr H Bissett

Induktiefgekoppelde-plasmareaktore (IGP's) het toepassings in verskeie industrieë, insluitend die voorbereiding van metaalpoeiers vir laagvervaardiging. Die skermgas (ook skutgas genoem) speel 'n belangrike rol in die termiese afskerming van die reaktorwand in 'n IGP. Die energie wat verloor word deur die wand van die reaktor kan verminder word deur die hitesone weg van die wand af te beweeg. Hierdie verplasing van die hitesone word bereik deur 'n skermgas te gebruik wat moeiliker ioniseer as die plasmagas. Die ioniseringsgraad van waterstof is laer as dié van argon weens die hoër elektriese geleidingsvermoë van argon by soortgelyke temperature. Waterstof word dus in klein hoeveelhede in die skutgas gebruik met argon as die hoof bestanddeel en hoofplasmagas. Die waterstof voorkom dus plasmavorming naby die wand. Die skutgas het ook 'n heelwat hoër vloeisnelheid en verminder sodoende die beskikbare tyd vir hitte-oordrag na die wand.

Die besondere hoë temperature wat in 'n IGP bereik word, belemmer egter die meting van eenvoudige lesings soos vloeisnelheid en temperatuur. Rekenaarmodelle voorsien ons van die geleentheid om die fisiese en chemiese eienskappe van 'n plasma te ondersoek asook die nodige gereedskap om die gedrag van die plasma te analiseer sonder eksperimentele lesings. Daar is verskeie numeriese modelle van IGP-sisteme in die literatuur alhoewel nie een van dié modelle die effek van die skutgassamestelling in ag neem nie. Die hoeveelheid waterstof in die skutgas kan groot newe-effekte hê op die plasmagas a.g.v. die hoër ionisasiepotensiaal van waterstof. 'n Oormaat waterstof in die skutgas is ook 'n verkwisting van voermateriaal. Albei die faktore het 'n invloed op die ekonomiese uitvoerbaarheid van die plasmaproces.

Hierdie navorsing het beoog om die optimale skutgassamestelling te vind vir die reaktor wat by Necsa gebruik word vir sferoëdisering. Die werk is uitgevoer met die kommersiële eindige-elementsagtewarepakket COMSOL Multiphysics[®]. Hierdie rekenaarmodel dui daarop dat die wand beskerm kan word van plasmavorming met 'n waterstof/argon skutgas wat sodoende ook die energieverliese deur die wand verminder. Waterstof verbeter die skutgas se hitte-oordragvermoë, maar verskuif die hitesone weg van die wand af. As

gevolg van hierdie twee kompeterende meganismes bestaan daar 'n optimale bedrywingspunt by 3 vol% H₂ in die skutgas. Die model is bevestig deur die energiebalans van die model te vergelyk met eksperimentele resultate.

Navorsingsuitsette

- Grobler NJM, Bissett H, Puts GJ en Crouse PL (2018) Die effek van die skutgas-samestelling in 'n induktiefgekoppelde plasma: 'n Eindige-elementanalise, SAAWK Studentesimposium, 26 Oktober, Engelenburg-huis, Arcadia, Pretoria.
- Grobler NJM, Bissett H, Puts GJ en Crouse PL (2018) Finite-element analysis of the effect of sheath-gas composition in an inductively-coupled plasma, Conference of the South African Advanced Materials Initiative, 23-26 Oktober, Riverside Sun, Vanderbijlpark, Suid Afrika.
- Grobler NJM, Bissett H, Puts GJ en Crouse PL (2018) Finite-element analysis of the effect of sheath-gas composition in an inductively-coupled plasma, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 430, pp. 1-7.
- Grobler NJM, Bissett H, Puts GJ en Crouse PL (2018) Die effek van die skutgas-samestelling in 'n induktiefgekoppelde plasma: 'n Eindige-elementanalise, Suid-Afrikaanse Tydskrif vir Natuurwetenskap en Tegnologie, Ingehandig vir oorweging.

Bedankings

- Dankie vir my pragtige vrou, Liezel, vir jou liefde, ondersteuning en geduld met my studies jy het alles soveel makliker gemaak.
- Dankie Prof Philip Crouse vir sy leiding en motivering gedurende die jare wat ons saam gewerk het. Dankie vir al jou wysheid en insiggewende raad oor die werk, asook al die res. Dankie Dr Gerard Puts vir al jou ure in die laboratorium om my te help en die goeie geselskap. Sonder julle sou dit nie moontlik gewees het nie.
- Baie dankie aan die AMI, SAAWK en BBD vir julle finansiële bydrae, sodat ek my droom kan bereik.
- Dankie aan my vriende, familie en ouers vir julle ondersteuning. Baie dankie my mede-Tuksstudente wat 'n fantastiese werksomgewing geskep het.

Inhoud

Opsomming	iii
Figure	vi
Tabelle	viii
Nomenklatuur	ix
1 Inleiding	1
2 Agtergrond en teorie	3
2.1 Additiewe vervaardiging (3D-druk)	3
2.2 Partikel-sferoïedisering	7
2.3 Plasmas: 'n Kort inleiding en agtergrond	10
2.4 Bestaande modelle	14
3 Model	17
3.1 Samestellende vergelykings	17
3.2 Rekenaarmodel	19
4 Eksperimenteel	21
4.1 Toerusting	21
4.2 Beplanning	22
5 Resultate	24
5.1 Optimering van rekenaarhardeware	24
5.2 Maasdigtheidstudie	25

5.3	Skermgas	26
5.4	Partikeltrajekte	35
5.5	Modelvalidasie	37
5.6	Opsomming	38
6	Gevolgtrekking	39
A	Bylae	A.1

Figure

1	Detail van 'n 3D gedrukte kasteel met 'n dubbele helix aan die binnekant.	4
2	SEM-foto van bo van 'n vlekvrystaalkubus gedruk deur Gebhardt & Hötter (2016: 479).	5
3	SEM-foto met syaansig van die kubus met 50 µm laaghoogte.	5
4	Die HP "Metal Jet"-drukproses.	6
5	SEM-foto van HP Metal Jet part en SLM part.	6
6	SEM-foto van arbitrêr gevormde wolframpartikels.	7
7	SEM-foto van sferoïediseerde wolframpartikels.	8
8	Stroomlyne vir die vloeï om 'n sferiese partikel.	9
9	SEM-foto van sferoïediseerde wolframpartikels.	10
10	Gas- en elektrontemperatuur van 'n plasma as 'n funksie van druk.	11
11	Vorming van 'n induktiefgekoppelde plasma.	12
12	Tipiese radiale temperatuurprofiel in 'n induktiefgekoppelde plasma.	13
13	Voorstelling van Lorentz kragte.	13
14	Koppeling tussen elektromagnetiese veld; hidrodinamika en hitte-oordrag.	14

15	Simulasiegeometrie wat die verkillende gebiede en inlate aandui.	20
16	Die Tekna Teksphero-15 IGP-sferoëdisingssisteem.	21
17	Tegniese diagram van 'n Tekna TEKSPHERO-15 IGP-reaktor.	22
18	Verwerkings tyd van verskillende gevalle op trosrekenaar.	25
19	Stralingsverliese van die plasma as 'n funksie van maasdigtheid	26
20	Elektriese geleidingsvermoë van argon en waterstof as 'n funksie van temperatuur.	27
21	Temperatuur in die plasmareaktorwand by die hoogte van die maksimum temperatuur vir 30 s bedryfstyd.	28
22	Temperatuur 1 mm weg van die binnewand vir verskillende konsentrasies H ₂ in die skermgas.	29
23	Totale hittevloed oor die buitewand by verskillende konsentrasies H ₂ gas.	29
24	Vloeierveld links en temperatuurprofiel regs vir 0 % H ₂ in die skermgas.	30
25	Vloeierveld links en temperatuurprofiel regs vir 3 % H ₂ in die skermgas.	30
26	Vloeierveld links en temperatuurprofiel regs vir 7.5 % H ₂ in die skermgas.	31
27	Radiale temperatuurprofiel by die maksimum temperatuur.	32
28	Stroomlyne in die vloeierveld links en die vortisiteit in Hz regs van die IGP met 3 % H ₂ in die skermgas.	32
29	Maksimumtemperatuur in 'n IGP by verskillende H ₂ -konsentrasies.	33
30	Wandtemperatuur vir 3 % waterstof in die skermgas.	33
31	Konduktiewehitte-oordragskoeffisient (W m ⁻² K ⁻¹) links en die warmtekapasiteit (J kg ⁻¹ K ⁻¹) regs.	34
32	Verhittingsdigtheid (W m ⁻³).	34
33	Vloeddigtheid (T) van die magnetiese veld by tyd 0 s (links) en na 8 s (regs).	35
34	Partikelsnelhede in m s ⁻¹	36

35	Partikeltrajekte met 'n vergroote beeld regs op die vloeiprofiel van die plasmagas in m s^{-1}	36
36	Eksperimentele en model-resultate van wamte verliese verloor deur die plasmareaktorwand.	37
A.1	Vloeiveld links, en temperatuurprofiel regs vir 1 % H_2 in die skermgas. . .	A.1
A.2	Vloeiveld links en temperatuurprofiel regs vir 2 % H_2 in die skermgas. . .	A.1
A.3	Vloeiveld links en temperatuurprofiel regs vir 2.5 % H_2 in die skermgas. . .	A.2
A.4	Vloeiveld links en temperatuurprofiel regs vir 5 % H_2 in die skermgas. . .	A.2

Tabelle

1	Vergelyking van bestaande IGP modelle met belangrikste aannames en parameters	15
2	Vergelyking van bestaande IGP modelle met belangrikste aannames en parameters	16
3	Eksperimente voltooi by die Suid-Afrikaanse Kernenergiekorporasie (Necsa). . .	23
4	Afhanklike en onafhanklike veranderlikes.	23
5	Lopiebeskrywings vir hardewaretoets, lopie 2 is 'n herhaling van lopie 1 . . .	24
6	Simulasieparameters	27
7	Energiebalans	31

Nomenklatuur

A	Magnetiese vektorpotensiaal	Wb m^{-1}
B	Magnetiese vloeddigtheid	T
D	Elektriese PLC verplasing	C m^{-2}
F	Liggaamskragvektor	N
H	Magneetveldintensiteit	A m^{-1}
I	Stroomdigtheid	A
J_e	Ekstern-gegenereerde stroomdigtheid	A m^{-2}
J	Stroomdigtheid	A m^{-2}
q	Konduktiewe hittevloed	W m^{-2}
u	Snelheid	m s^{-1}
v	Relatiewe versnelling	m s^{-1}
C_p	Spesifieke warmtekapasiteit	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_B	Boltzman konstante	J K^{-1}
k_{TH}	Termiesegeleidingsvermoë	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
Q	Plasmahittebron	W m^{-3}
Q_p	Drukarbeid	W m^{-3}
Q_{vd}	Viskose energieverlies	W m^{-3}
t	tyd	s
p	Druk	kPa
T	Temperatuur	K
k	Tubulentemodelparameter	-
Grieks		
α	Tubulentemodelparameter	-

β_0	Tubulentemodelparameter	-
β_0^*	Tubulentemodelparameter	-
μ	Viskositeit	Pas
μ_T	Turbulente Viskositeit	Pas
ω	Spesifieke dissipasietyempo	s ⁻¹
ω_e	Frekwensie	Hz
ρ	Digtheid	kg m ⁻³
σ	Elektriesegeleidingsvermoë	S m ⁻¹
σ_k^*	Tubulentemodelparameter	-
σ_w	Tubulentemodelparameter	-

1 Inleiding

Additiewe vervaardiging (3D drukking) is 'n groeiende veld met vele toepassings. Die veld is gewild aangesien komplekse geometrieë vinniger vervaardig kan word teen laer kostes. Tans is die gemiddelde 3D metaaldrukkers steeds duurder as 'n gemiddelde industriële CNC masjien. Die totale kostes hang van die materiaal en kompleksiteit van die produk af, dus is daar nie 'n duidelike goedkoper opsie nie en kostes verskil van produk tot produk, alhoewel 3D drukkers se pryse nou begin daal met nuwe tegnologie.

Additiewe vervaardiging gebruik 'n metaalpoeierbed en energiebron wat die poeiers laag-vir-laag smelt om komplekse geometrieë te vervaardig. Die energiebron kan 'n laser wees (die energie van die laser bepaal ook die tipe proses) of 'n elektronbundel. Daar is ook ander tegnieke soos die van HP wat 'n polimeer gebruik om die poeier in 'n bepaalde geometrie vas te gom en dan te sinter. Hierdie prosesse werk heelwat beter en gee beduidend beter resultate as die metaalpoeierpartikels sferies is. Die metaalpartikels word deur 'n induktiefgekoppelde hoëtemperatuur-termiese plasma gesferoïediseer. Die plasma smelt die partikels soos hulle deur die hittedone beweeg. Die gesmelte metaalpartikels kondenseer in 'n sferiese vorm a.g.v. oppervlakspanning wanneer dit die hittedone verlaat. Die sferiese partikels word onder die plasmareaktor gevang in die opgaarbak.

Induktiefgekoppelde plasmas bereik baie hoë temperature van 10 000 K plus. Dit maak eenvoudige lesings in die plasma baie moeilik en daarom is dit nodig om 'n model te ontwikkel. Die hoë temperature kan ook die reaktorwand beskadig. Die skermgas beskerm die reaktorwand deur 'n baie hoë vloeisnelheid te gebruik, wat die tyd vir hitte-oordrag na die wand verminder. Die skermgas kan ook 'n komponent bevat wat moeiliker ioniseer as die hoofplasmagas om plasmavorming by die wand te voorkom. Waterstof ioniseer moeiliker as argon en kan dus vir hierdie doel in 'n argon plasmagebruik word. Die regte verhouding moet fyn bepaal word aangesien waterstof duurder as argon is. 'n Oormaat waterstof kan ook die plasma blus en die korrekte gasverhouding word dus 'n optimeringsprobleem.

Necsa ("Nuclear Energy Corporation of South Africa") het 'n program gevestig vir die bevordering van sferoïediseringstegnologie met die einddoel om 'n kommersiële, plasma-gebaseerde metaalprosesseringsaanleg te bou. Die huidige navorsing fokus op die verstaan en verbetering van titaansferoïedisering deur, onder andere, die eindige-elementmetode te gebruik om die sisteem te modelleer en sodoenende die sferoïediseringproses te optimeer en ook algemene duidelikheid i.v.m. die proses te skep. Die navorsing word tans op 'n Tekna Teksphero-15 gedoen, in 'n kleinskaal-sferoïediseringssisteem met argon as die hoof plasmagas.

Die navorsing hier voorgelê fokus op die effek van die samestelling van die skermgas. Die modellering en simulasiwerk is m.b.v. COMSOL Multiphysics gedoen en verdere verwerking van die resultate is gedoen met Python. Die simulasieresultate word vergelyk met eksperimentele resultate om die model te bevestig. Die model is opgestel vir 'n 11 kW plasma by 85 kPa. Die wiskundige model sluit verskeie gekoppelde fisikanodes in *viz*: hitte oordrag, magneetveld, turbulente vloei ($k-\omega$) en plasma hittebron. Die model neem ook die volgende in ag: die totale die hitte-oordrag in die gas en die wand; die verliese na die verkoelingswater deur die wand; turbulente vloei; asook 'n ossilerende magneetveld met Lorentz-kragte. Die model gee insig in die verskeie prosesse wat in die reaktor plaasvind en het dit moontlik gemaak om die samestelling van die skermgas te optimeer.

Verskeie eksperimentele lopies is gedoen waar die energiebalans van die model en die eksperimentele opstelling vergelyk is.

2 Agtergrond en teorie

Daar is drie hooftipes vervaardiging: additief, destruktief, formatief. Tydens destruktiewe vervaardiging word die verlangde geometrie gevorm deur die verwydering van materiaal m.b.v. masjienering, bv. die gebruik van 'n draaibank. Formatiewe vervaardiging werk deur hitte en krag op 'n vorm toe te pas en sodoende 'n konstante volume na 'n gesogte geometrie toe te vervorm (Gebhardt & Hötter, 2016: 1-3).

Additiewe vervaardiging, meer algemeen bekend as 3D-drukking, is 'n opwindende konsep aangesien dit die vervaardigingsproses van komplekse geometrieë vergemaklik. 3D-druk van metale verkies dat metaalpoëier wat gebruik word, uit sferiese partikels bestaan. Nie-sferiese partikels kan gesferoïediseer word deur prosessering met 'n induktiefgekoppelde plasma, waar hulle smelt en die oppervlakspanning van die gesmelte metaal die partikel sferies vervorm.

Induktiefgekoppelde plasmas (IGP's) word bedryf teen baie hoë temperature en het dus verkoelingswater nodig om die wand van die reaktor te verkoel. Meeste van die energie in die plasma word deur stralingsverliese verloor, van die uiters hoë bedryfstemperatuur na die verkoelingswater in die wand van die reaktor.

2.1 Additiewe vervaardiging (3D-druk)

Daar is verskeie 3D-drukmetodes en verskillende materiale waarmee gedruk kan word. Additiewe vervaardiging kan gebruik word vir beide polimeer- en metaalprosessering. Die belangrike eienskappe van 3D-druk is: die geometrie van elke laag kom direk vanaf 'n CAD-lêer; daar is geen produkverwante gereedskap nodig nie, en dus geen herkonfigurasie nodig nie soos boorpunte wat geruil moet word op 'n CNC masjien nie; die materiaaleienskappe word gegenerer gedurende die druk proses; die produkte kan in enige oriëntasie gedruk word en daar is dus geen nodigheid vir 'n klamp of iets soortgelyk om die werkstuk vas te hou nie; alle additiewe vervaardigingsproseses gebruik dieselfde STL-datastruktuur wat foutiewe data-uitruiling met voorverwerkers uitskakel. 'n Ander groot voordeel van hierdie tegniek is dat enige voorwerp wat vervaardig word, vinnig digitaal geskaal kan word indien 'n groter of kleiner produk versoek word (Gebhardt & Hötter, 2016: 3-4).

GE ("General Electric") maak gebruik van die 3D-drukproses om die brandstofsputstuk vir hul LEAP-enjin te vervaardig. Die vereenvoudigde ontwerp het die spuitstuk van 'n komplekse 20-komponent-toestel na 'n enkelkomponentprodukt geneem. Die nuwe produk is 25 % ligter en vyf keer sterker en spaar tyd omdat daar nie verskeie komponente is wat saamgevoeg moet word nie, en is dus heelwat goedkoper (Ford & Despeisse, 2016).

Figuur 1 wys die binnekant van 'n kasteel (ongeveer 20 cm hoog) wat gedruk is met trappe en 'n dubbele helix aan die binnekant. Komplekse geometrieë soos die wat normaalweg baie tyd sou neem, kan nou in 'n paar uur vervaardig word deur slegs die druk van 'n knoppie. Vir eenvoudiger geometrieë is destruktiewe vervaardiging egter steeds beter; dit is bv. baie vinniger om 'n plaat van 'n groter stuk materiaal af te sny, as wat dit sal wees om te druk (Gebhardt & Hötter, 2016: 13).

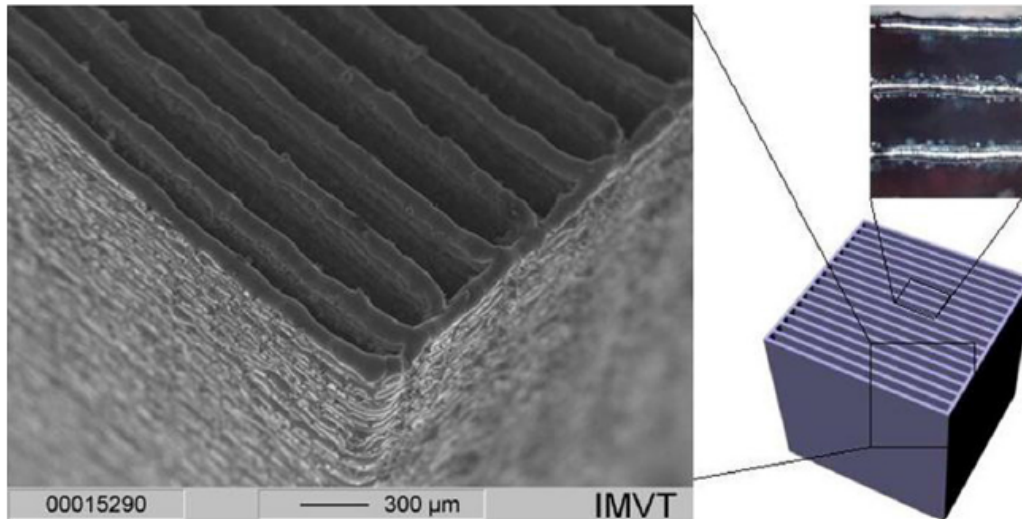


Figuur 1: Detail van 'n 3D gedrukte kasteel met 'n dubbele helix aan die binnekant, voorbeeld van 'n komplekse geometrie wat maklik vervaardig word op 'n 3D drukker (Gebhardt & Hötter, 2016: 6).

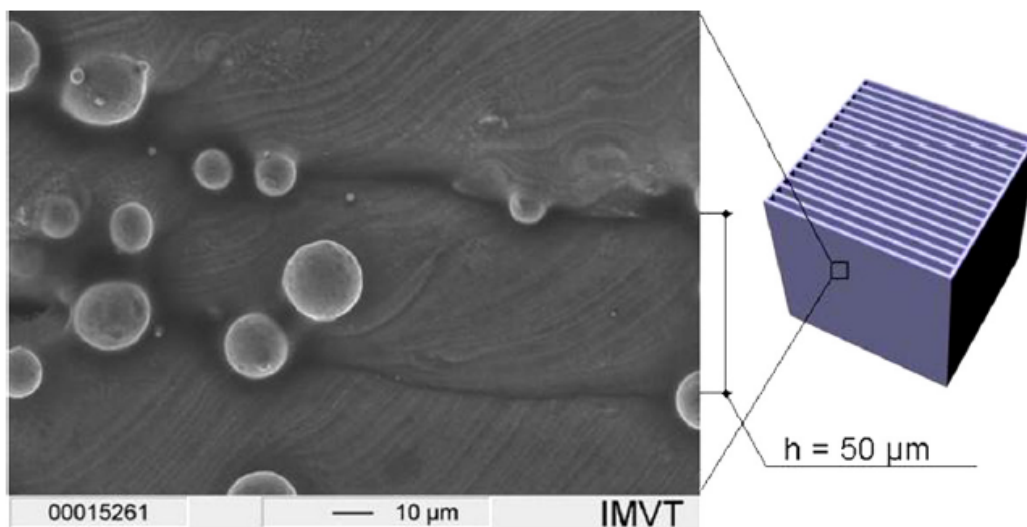
Petrovic *et al* (2011) verdeel 3D-metaalprosessering in twee: die wat lasers as energiebron gebruik, en die wat 'n elektronbundel gebruik. Albei werk op die beginsel van 'n poeierbed en 'n energiebron wat dan die vorm van die onderdeel laag-vir-laag termies te teken, en die poeierbed na elke laag op te vul.

SLM ("selective laser melting") is 'n lasergebaseerde tegniek. Hier is oksidasie 'n groot probleem wat die meganiese eienskappe van die vervaardigde komponente negatief kan beïnvloed. Die metode word dus uitgevoer in 'n inerte atmosfeer in die boukamer. Stikstof word oor die algemeen gebruik vir staalvervaardiging en 'n argon atmosfeer vir titaan en cobalt-chroomlegerings (Petrovic *et al*, 2011). GE besit tans die grootste 3D-drukker wat gebruik maak van die SLM metode (Concept Laser, 2017). 'n Soortgelyke tegniek is SLS ("selective laser sintering") waar die partikels gesinter (gedeeltelik gesmelt op die oppervlak) word. Hierdie tegniek is oor die algemeen vir plastieke bedoel, alhoewel dit in beginsel ook vir metale gebruik kan word (Gebhardt & Hötter, 2016: 148).

Figuur 2 wys 'n skandeerelektronmikroskopiese (SEM) beeld van die bokant van 'n vlek-vryestaalkubus vervaardig met 3D-drukker. Figuur 3 wys die kant van die kubus waar die verskillende lae gesien kan word, sowel as 'n paar onvolledig-gesmelte metaalpartikels.



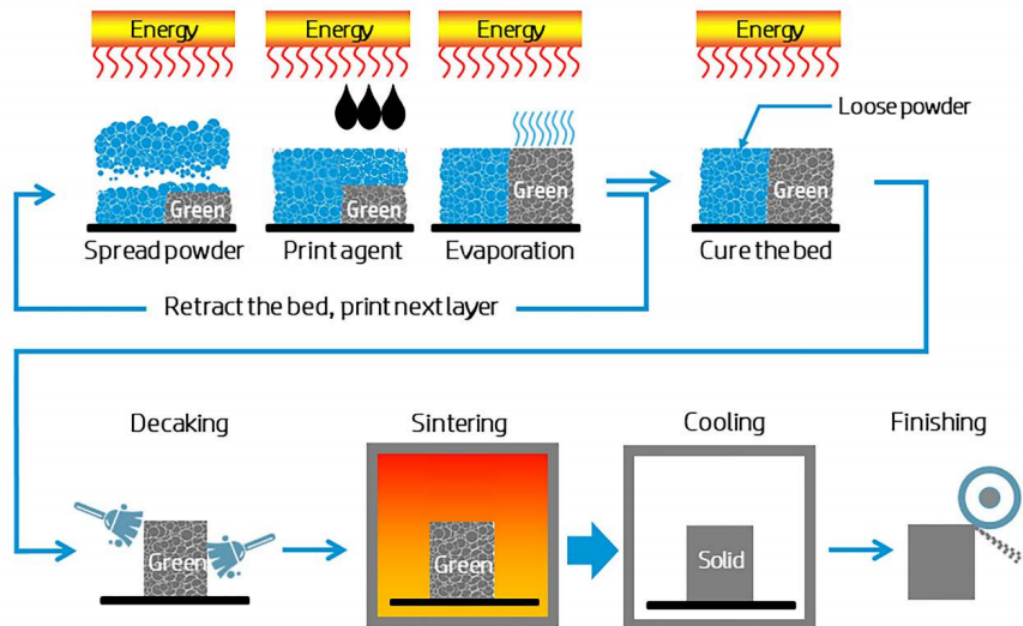
Figuur 2: SEM-foto van bo van 'n vlek-vryestaalkubus gedruk deur Gebhardt & Hötter (2016: 479).



Figuur 3: SEM foto met syaansig van die kubus met 50 μm laaghoogte (Gebhardt & Hötter, 2016: 480).

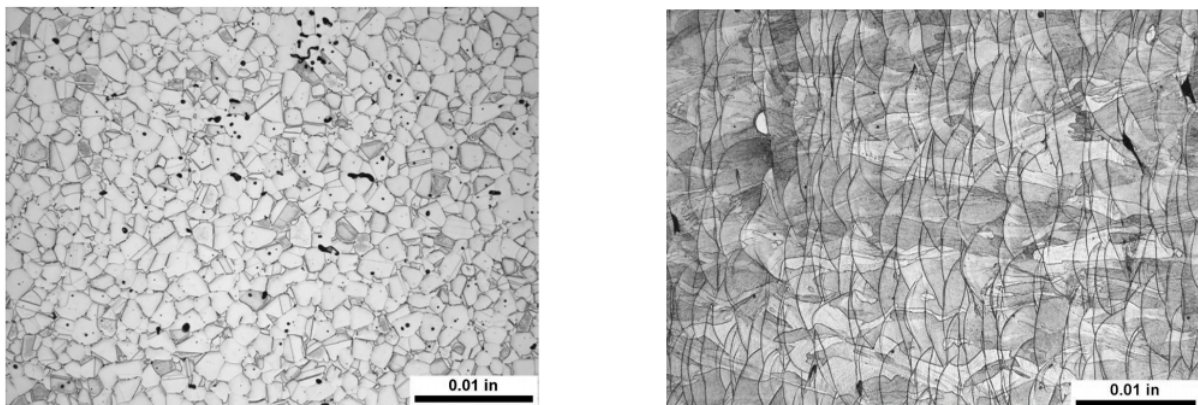
EBM ("Electron beam melting") maak van 'n elektronbundel gebruik om metaal te smelt. Die elektrone word deur 'n wolframfilament afgegee en word deur 'n reeks elektromagnetiese spoel gefokus. Die boukompartement word onder vakuüm gehou om te voorkom dat die straal deflekteer en hou die straal in fokus. EBM-tegnologie word ook vir hoë-suiwerheidsprodukte gebruik, is tans gepatenteer deur Arcam en is reeds kommersieël beskikbaar vanaf 2001 (Petrovic *et al*, 2011; Gebhardt & Hötter, 2016: 192).

HP het laat in 2018 hulle nuwe 3D-metaaldrukker (die "metaljet") onthul en belooft dat die komersieel beskikbaar in 2020 sal wees. Die drucker gebruik 'n poeierbed en drup 'n spesiale polimeer op die poeierbed in die vorm van die komponent wat gedruk word, laag vir laag. Die komponent part is dan aanmekeer "gegom", gebruikmakend van die polimeer en metaalpoeier. Dit word dan in 'n oond gesinter waar die polimeer ontbind en verdamp, en die metaal sinter (Hewlett Packard, 2018). Figuur 4 wys hoe hierdie proses werk.



Figuur 4: Die HP "Metal Jet"- drukproses (Hewlett Packard, 2018).

Die tegniek produseer komponente met isotropiese eienskappe, wat impliseer dat die komponent ewe sterk in alle rigtings is, anders as die standaard-SLM-metode wat baie sterk in een rigting is maar swak in ander rigtings (Hewlett Packard, 2018). Dit word aangedui in Figuur 5.



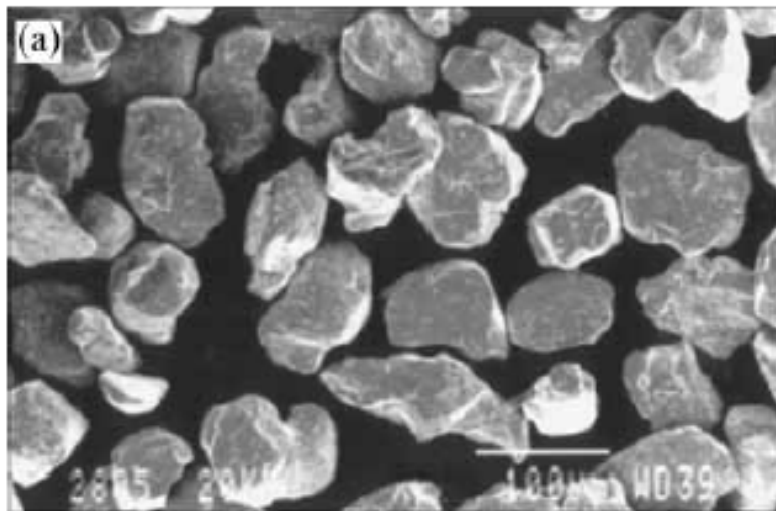
Figuur 5: SEM-foto van komponente gedruk deur HP "Metal Jet" (links) en deur die SLM-metode (regs) (Hewlett Packard, 2018).

2.2 Partikel-sferoïedisering

Die sferoïedisering van partikels is van belang vir verskeie gebruike in die industrie *viz.* 3D-druk, skuurmiddels, katalisators met beheerde porositeit, vryvloeiende poeiers, en meer.

Katalisators en produkte met beheerde porositeit verhoog die effektiwiteit van die produk. Sferiese partikels maak dit ook baie maklik om die produkte herhaaldelik met 'n konstant-beheerde porositeit te vervaardig. Hierdie poeiers het ook 'n hoër vloeibaarheid wat dit makliker maak om te pomp en verminder die hoeveelheid verstoppings (Károly & Szepvolgyi, 2005). Medikasie met gesferoïediseerde partikels kan vinniger opgeneem word in die liggaamselle (Geng *et al.*, 2007). Die lae termiese uitsetting en stres-konsentrasie maak gesferoïediseerde silika partikels voordelig vir die ruimte- en lugvaartindustrië (Ji *et al.*, 2015).

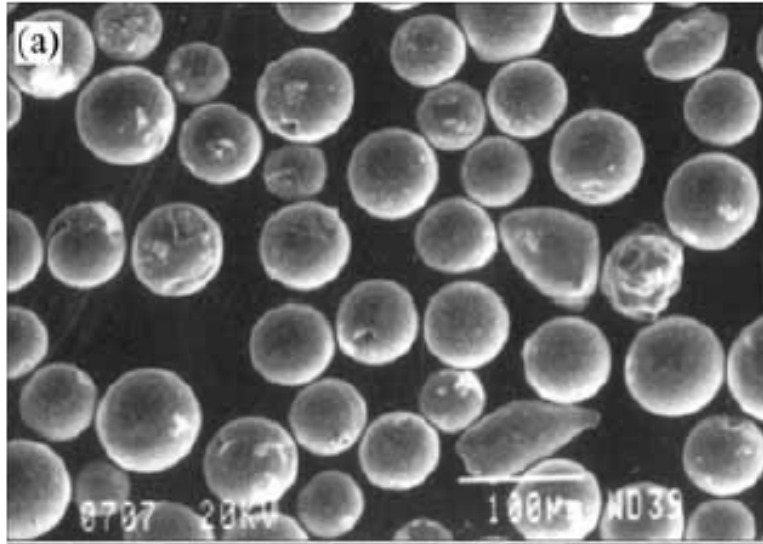
Die arbitrêr gevormde partikels, sien Figuur 6, word in die termiese plasma verhit wat veroorsaak dat die partikels smelt. Die opervlakspanning van die gesmelte metaal veroorsaak dat dit sfeervormige druppels vorm. Die sfeervormige druppels beweeg dan buite die hittedone en vries dan as sferiese partikels soos in Figuur 7 aangedui.



Figuur 6: SEM-foto van onbehandelde wolframpartikels (Jiang & Boulos, 2006).

In die termiese prosessering van poeiers onder plasmatoestande is die beheer van die trajekte en temperatuurprofiële van die partikels van kritieke belang. Afwyking van die optimale toestand in die plasma kan die produk drasties beïnvloed. Byvoorbeeld, as die partikel nie deur die hittedone beweeg nie, of as dit oorverhit en die partikel verdamp, verminder die effektiwiteit drasties (Feinman, 1987).

Die modellering van hierdie proses is van belang om die optimale en mees effektiewe bedryfstoeestande vir die proses te vind. Daar is verskeie sekondêre prosesse wat van

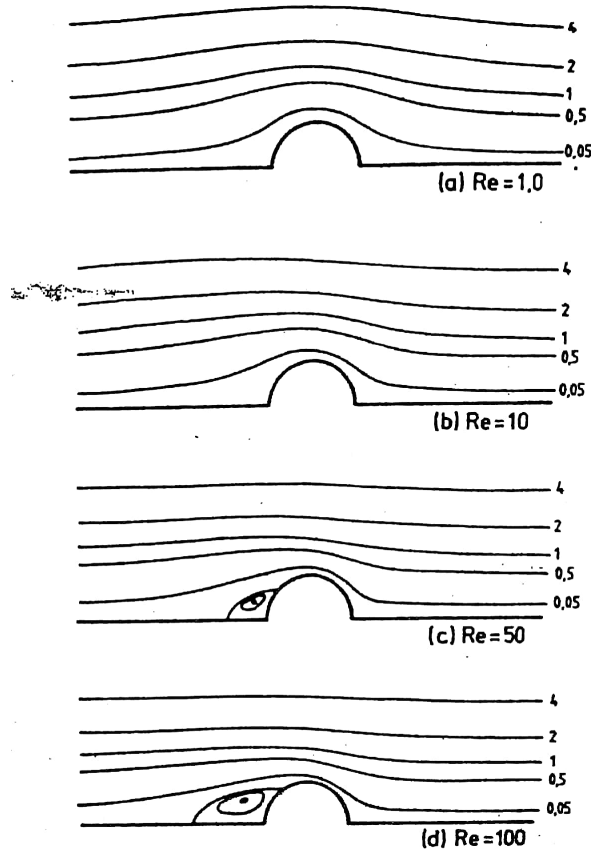


Figuur 7: SEM foto van gesferoïediseerde wolframpartikels (Jiang & Boulos, 2006).

belang is in die plasma, naamlik: die trajek van die partikel, die warmte-oordrag tussen die plasma en die partikel, die warmte-oordrag tussen die plasma en die draergas, en die warmte-oordrag binne die partikel. Hierdie sekondêre prosesse beïnvloed die oorhoofse proses en moet alles in ag geneem word in die model.

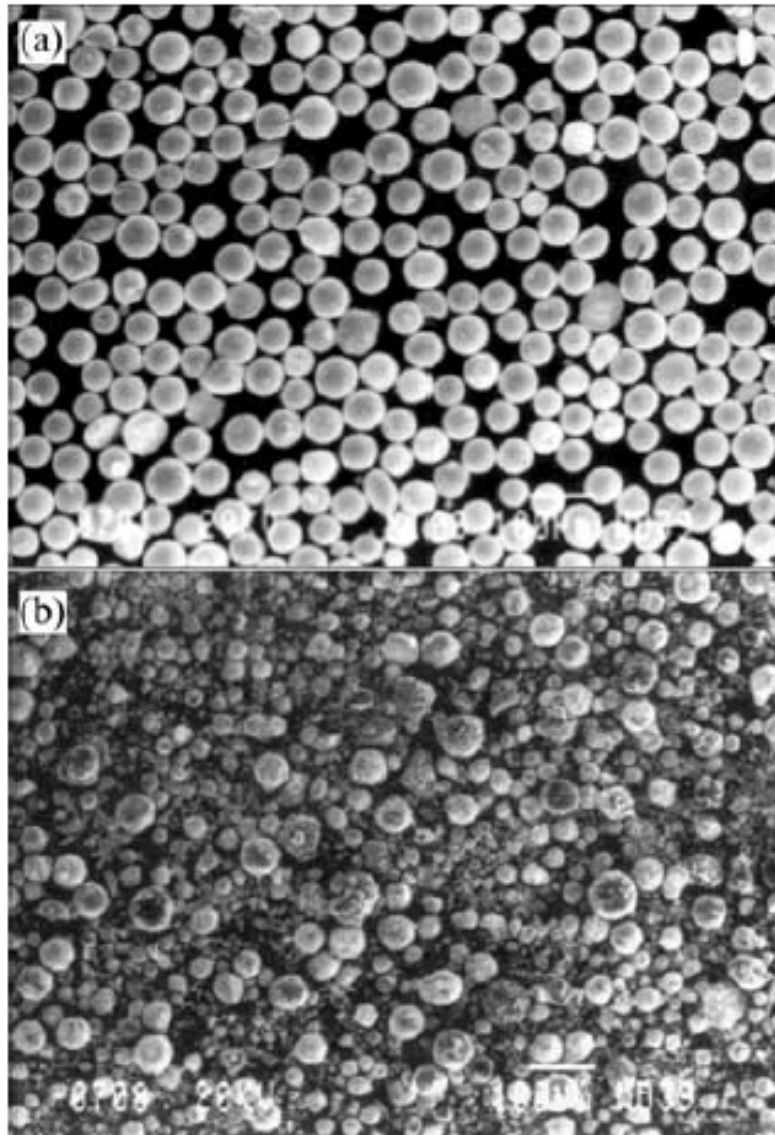
Die vloeï- en temperatuurvelde om 'n enkele partikel is van belang om die trajek van die partikel sowel as die energie-oordrag te bereken. Die vloeï om 'n sferiese partikel by verskillende Reynolds-getalle word aangetoon in Figuur 8. Die vloeï is by $Re < 100$ wat in die laminêre vloeï gebied is en algemeen onder plasmatoestande voorkom (Feinman, 1987).

Figuur 9 wys partikels wat in die hoof-opgaarbak verkry is, in (a), en die partikels wat van die kant afgehaal is, in (b). In die figuur is dit duidelik dat die partikels wat van die kant af kom 'n groter partikel-grootte-verspreiding het en aansienlik kleiner is, omdat hierdie partikels verdamp het a.g.v. oorverhitting en op die kant van die reaktor gekondenseer het (Jiang & Boulos, 2006).



Figuur 8: Stroomlyne vir die vloeï om 'n sferiese partikel (Feinman, 1987).

Modellering van die proses gee insig in die verloop van die proses binne die reaktor en maak optimering van die proses vinniger en meer effektief, en gevolglik goedkoper. Kennis van die temperatuurprofiel binne die plasma asook die partikels en hulle trajekte, maak dit moontlik om so min as moontlik energie te gebruik terwyl die partikels smelt om die gewenste produk te lewer. Die model maak dit ook moontlik om die limiete te toets en die produksie-tempo te verhoog sonder om proefflopië, wat skade kan veroorsaak, op die toerusting te doen. Die navorsing het dus groot finansiële implikasies vir die nywerheid.



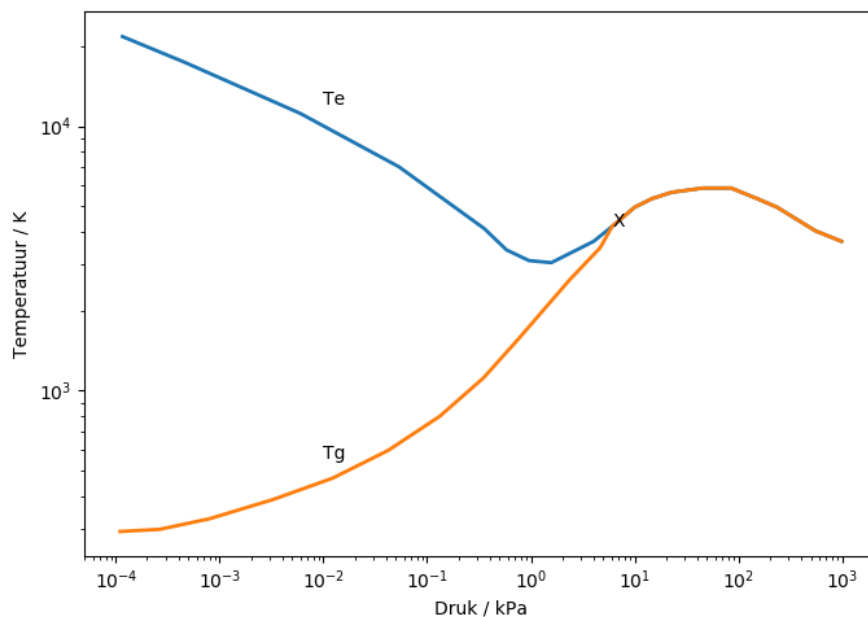
Figuur 9: SEM foto van ge.sferoïediseerde wolframpartikels uit: a) die hoof-opvangsbak, en b) van die kant van die plasma-opstelling (Jiang & Boulos, 2006).

2.3 Plasmas: 'n Kort inleiding en agtergrond

Skoog, Holler & Crouch (2017: 255) beskryf 'n plasma as 'n elektriesgeleidende gasmengsel met 'n beduidende konsentrasie van katione en vryvloeiende elektrone. Die konsentrasie van die katione relatief tot die elektrone is van so 'n aard dat daar geen netto lading op die plasma is nie (dit staan as kwasieneutraliteit bekend). Daar is drie hooftipes hoëtemperatuurplasmas: die induktiefgekoppelde plasma, die gelykstroomplasma, en die mikrogolfeïnduseerde plasma. Argonplasmas word oor algemeen gebruik vir emmiesiespektrumanalises.

Die vry elektrone in 'n plasma word deur die elektriese veld versnel en ontwikkel dus baie hoë kinetiese energie. Die elektrone bots met die neutrale gasspesies, en ioniseer hulle.

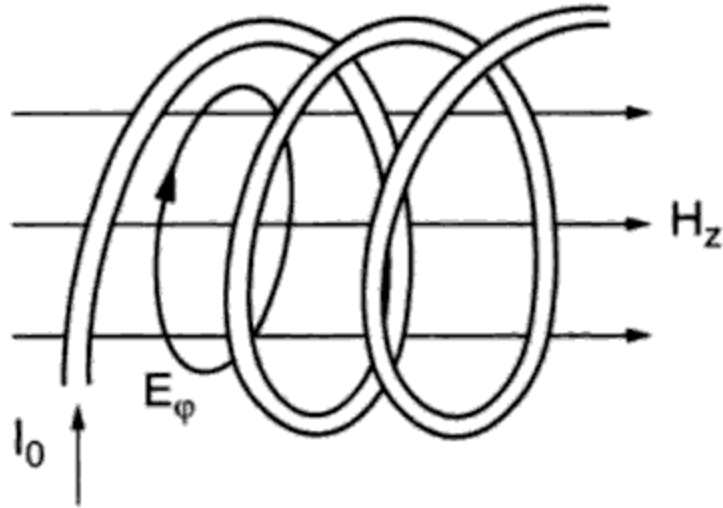
Die elektrone wat tydens ionisasie vrygestel word, word op hulle beurt weer deur die veld versnel en kan verdere ionisasie veroorsaak. Die proses gaan voort en uiteindelik word 'n gestadigde toestand bereik waar die ionisasiestempo gelyk is aan die elektronverliestempo. Behalwe ionisasie word energie ook deur ander nie-elastiese prosesse na die gasspesies oorgedra. Druk en stroom bepaal die energie-oordragstempo. Met toenemende druk verlaag die elektrone se vrye-padlengte en verhoog hulle botsingtempo, en die gas- en die elektrontemperature bereik ewewig. Die punt waar die twee temperature gelyk is, word na verwys as lokale termodinamiese ewewig. Die punt word aangedui deur die kruis in Figuur 10 (Boulos, Fauchais & Pfender, 1994: 7–8).



Figuur 10: Gas- en elektrontemperatuur van 'n plasma as 'n funksie van druk.

Die induktiefgekoppelde radio-frekwensieplasma (RF-plasma) werk op die beginsel geïllustreer in Figuur 11. Hoëfrekwensiestroom vloei deur die spoel en genereer 'n hoëfrekwensiemagneetveld in die ontlaadingsbuis. Die magneetveld induseer dus 'n hoëfrekwensie-elektriese vorteks konsentries met die spoel wat die induktiefgekoppelde ontlading onderhou. Hoë frekwensies van 0.1 tot 100 MHz word benodig om die plasma te onderhou. Die algemene frekwensie wat in die nywerheid gebruik word is 13.6 MHz. Dit is so gekies om te voorkom dat geruis wat deur die opstelling opgewek word met radiokommunikasiesone inmeng (Fridman & Kennedy, 2004: 595–596).

Die induktiefgekoppelde plasma het 'n piek tussen die middelpunt en die wand van die IGP in die temperatuurveld soos getoon in Figuur 12. Hierdie effek kan gekwantifiseer word deur middel van die veldiepte δ in Vergelyking 1.



Figuur 11: Generering van 'n induktiefgekoppelde plasma (I is die stroom is, E die elektriese veld, en Hz die frekwensie) (Fridman & Kennedy, 2004: 595).

$$\delta = \left(\frac{1}{\pi f \sigma_e \mu} \right)^{1/2} \quad (1)$$

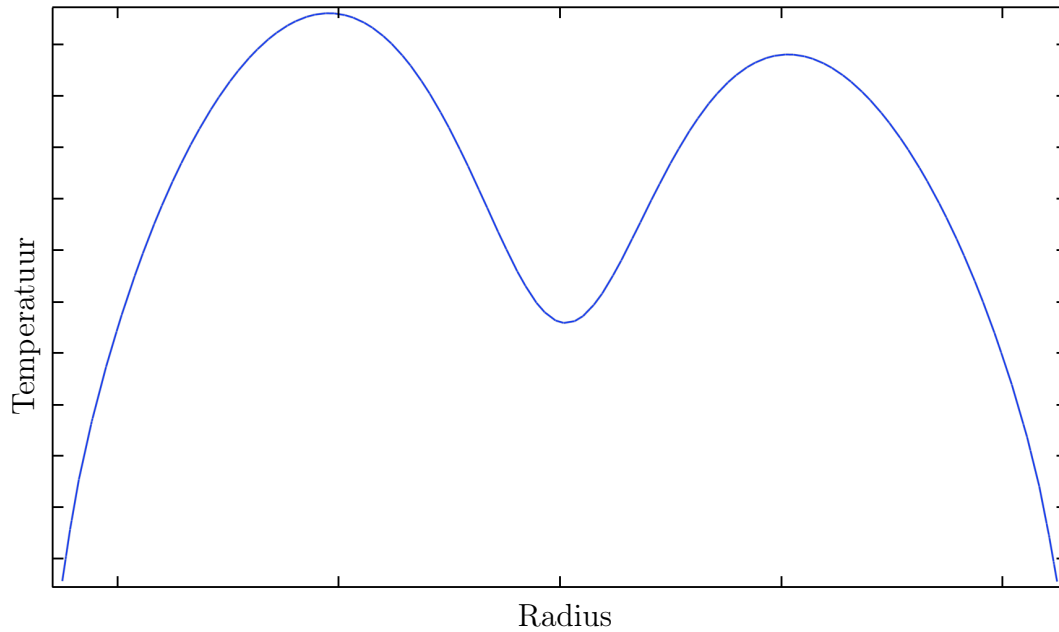
Die veldiepte is die diepte wat die ossilerende magneetveld die plasma kan penetreer met elke ossilasie voor die stroom weer afneem en in die teenoorgestelde rigting vloei en is dus 'n funksie van die frekwensie van die RF generator. Die plasma het 'n hoë elektriese geleidingsvermoë en die ossilerende magneetveld kan nie die plasma heeltemal penetreer nie. Dit veroorsaak dat die warmste deel van die plasma nie in die middel van die reaktor is nie maar tussen die middelpunt en die wand soos gesien in Figuur 12 (Boulos *et al*, 1994: 18).

In 'n suiwer-argonplasma is daar slegs drie spesies *viz.* elektrone, argonione (wat in die opgewekte toestand kan wees) en neutrale argonatome (wat ook in 'n opgewekte toestand kan wees). Argon ioniseer soos in Reaksie R1.



Hierdie geval kan beskryf word deur die Eggert-Saha vergelyking, Dalton se wet en die vereiste vir kwasieneutraliteit, in Verglyking 2 tot Vergelyking 4.

$$\frac{n_e n_i}{n} = \frac{2F_i}{F_n} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h_p^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_i}{k_B T} \right) \quad (2)$$



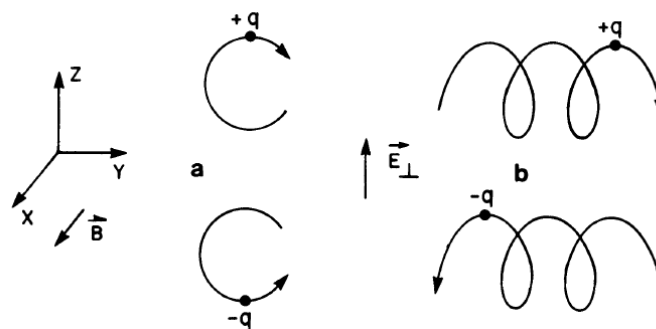
Figuur 12: Tipiese radiale temperatuurprofiel in 'n induktiefgekoppelde plasma.

$$p = (n_e + n_i + n)k_B T \quad (3)$$

$$n_e = n_i \quad (4)$$

waar n_e , n_i en n die elektrone, ione en neutrale atome se getaldigtheid is. E_i , h_p , k , F_i , F_n en m_e is die ionisasie energie, Planck se konstante, Boltzman se konstante, ioniese toestandsom, neutrale toestandsom en elektronmassa, respektiewelik (Boulos *et al*, 1994: 22–23).

Lorentz-kragte is die naam wat gegee word vir die krag wat op 'n gelaaiete partikel uitgeoefen word in die teenwoordigheid van 'n magneetveld en 'n elektriese veld. Die Lorentz-krag veroorsaak 'n tipe spiraalbeweging van gelaaiete partikels (sien Figuur 13) en veroorsaak dus werwilmvloei in die plasma (Boulos *et al*, 1994: 147).



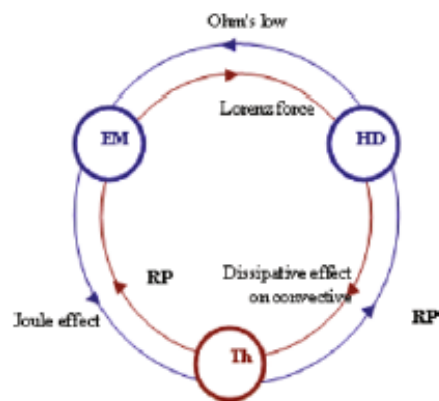
Figuur 13: Beweging van positiewe en negatiewe deeltjies in a) 'n magneetveld in die x-riktig, en b) in 'n elektriese veld in die y-riktig.

2.4 Bestaande modelle

Daar is verskeie bestaande modelle in die literatuur. Van die meer moderne modelle word in Tabel 1 en Tabel 2 opgesom. Tipiese voorbeelde word in die paragrawe hier onder bespreek.

Bogaerts & Aghaei (2017) het 'n oorsigartikel geskryf waar hulle verduidelik hoe die model wat hulle ontwikkel het, insig gee i.v.m. die effek van partikel-diameter, posisie van 'n sonde, en ander parameters en hoe dit die plasma affekteer.

Ikhlef *et al* (2012) het 'n 15 kW suiwer-argonplasma by atmosferiese druk gemodelleer in COMSOL INC (2018). Hulle doel was om die koppeling tussen die vloeidinamika, hitte-oordrag en elektromagnetiese veld beter te verstaan. Figuur 14 wys hoe hulle die koppeling verduidelik. Die afkortings gebruik is soos volg: EM, elektromagneties; HD, hydrodinamika; Th, hitte-oordrag; RP, invoer van nuwe temperatuur-afhanklike veranderlikes. Die outeurs rapporteer dat 35 % van die insetkrag verloor word a.g.v. stralingsverliese, 16.7 % a.g.v. geleiding, en 48 % a.g.v. konveksie. Hulle aannames is: laminêre vloeï, 2D aksissimmetrie, en lokale termiese ewewig.



Figuur 14: Koppeling tussen elektromagnetiese veld, hydrodinamika, en warmte-oordrag (Ikhlef *et al*, 2012).

Tabel 1: Vergelyking van bestaande IGP modelle met belangrikste aannames en parameters

Model	Kort beskrywing	Sagteware	Plasma gas	Drywing (kW)	Druk (bar)
Aghaei & Bogaerts (2016)	Bestudeer Cu druppels se verdamping in 'n IGP	(ANSYS, Inc, 2018)	Ar	1	-
Bolot <i>et al</i> (2007)	IGP modellering vir die sintese van nanopartikels	(ANSYS, Inc, 2018)	Ar		0.4
Xue, Proulx & Boulos (2001)	IGP model wat die elektromagnetiese veld oor die hele geometrie bereken	(ANSYS, Inc, 2018)	Ar	5	1
Ikhlef <i>et al</i> (2012)	Die doel is om die koppeling tussen die vloedinamika, hitte-oordrag en elektromagnetieseveld beter te verstaan	(COMSOL INC, 2018)	Ar	15	1
Baeva & Uhrlandt (2010)	Beskrywing van die dampneerslag proses vir optiese vesels	(ESI Group, 2018)	Ar, N ₂ , O ₂	25	1
Colombo, Ghedini & Mostaghimi (2008)	Modellering van 'n IGP vir 'n beter verstaan van die temperatuur- en vloeivelde vir optimering van analitiese toerusting	(ANSYS, Inc, 2018)	Ar	0.3	
Ye, Ishigaki & Boulos (2004)	Modellering van 'n IGP onder turbulente nie-gestadigde toestande	-	Ar/H ₂	3.5-15.3	1
Lei <i>et al</i> (2018)	Argon IGP model en vergelyk met eksperimentele waardes om akkuraatheid van model vas te stel	(COMSOL INC, 2018)	Ar		
Punjabi <i>et al</i> (2010)	Bestudeer die effek van krulnelheid in verskillende rigtings in die plasma		Ar		1

Tabel 2: Vergelyking van bestaande IGP modelle met belangrikste aannames en parameters

Model	Geometrie	Vloei
Aghaei & Bogaerts (2016)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr
Bolot <i>et al</i> (2007)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr
Xue, Proulx & Boulos (2001)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr
Ikhlef <i>et al</i> (2012)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr
Baeva & Uhrlandt (2010)	3D	Laminêr
Colombo, Ghedini & Mostaghimi (2008)	3D	turbulent, k-epsilon
Ye, Ishigaki & Boulos (2004)	2D aksiaalsimmetries	turbulent, k-epsilon
Lei <i>et al</i> (2018)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr
Punjabi <i>et al</i> (2010)	2D aksiaalsimmetries	Laminêr

3 Model

3.1 Samestellende vergelykings

COMSOL gebruik 'n wiskundige model ontwikkel deur Boulos *et al* (1994) vir die beskrywing van 'n IGP. Die saampersbare vloeï in die sisteem word beskryf deur die kontinuiteitsvergelyking en momentumvergelyking in Vergelyking 5 en Vergelyking 6 met die k - ω aanpassings in Vergelyking 7 tot Vergelyking 10 met ω die spesifieke dissipasiestempo (COMSOL INC, 2017: 68).

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (5)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{I} + (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\mu + \mu_T)(\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \right] + \mathbf{F} \quad (6)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot [(\mu + \mu_T \sigma_k^*) \nabla k] + P_k - \beta_0^* \rho \omega k \quad (7)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \omega = \nabla \cdot [(\mu + \mu_T \sigma_\omega) \nabla \omega] + \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta_0 \rho \omega^2 \quad (8)$$

$$\mu_T = \rho \frac{k}{\omega} \quad (9)$$

$$P_k = \mu_T \left[\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \right] - \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (10)$$

Die totale warmte-oordrag word beskryf in Vergelyking 11 en die konduktiewe hittevloed word deur Vergelyking 12 beskryf.

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q + Q_p + Q_{vd} \quad (11)$$

$$\mathbf{q} = -k_{TH} \nabla T \quad (12)$$

Die Maxwell-vergelykings wat gebruik word vir die berekening van die elektromagnetiese veld word gegee in Vergelyking 13 tot Vergelyking 16.

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (13)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (14)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} + j\omega_e \mathbf{D} + \sigma \mathbf{v} \times \mathbf{B} + \mathbf{J}_e \quad (15)$$

$$\mathbf{E} = -j\omega_e \mathbf{A} \quad (16)$$

Die plasma-koppeling word beskryf deur Vergelyking 17.

$$Q = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{5k_B T}{2q} \right) (\nabla T \cdot \mathbf{J}) + \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} + Q_{rad} \quad (17)$$

Die Lorentz-kragte word getoon in Vergelyking 18

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2} Re(\mathbf{J} \times \mathbf{B}^*) \quad (18)$$

Die partikel-trajekte word beskryf deur Vergelyking 19 Vergelyking 20.

$$\mathbf{F}_t = \frac{d(m_p \mathbf{v})}{dt} \quad (19)$$

$$\frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial t} = - \sum_{j=1}^{N_t} f_{rel} F_D \delta(\mathbf{r} - \mathbf{q}_j) \quad (20)$$

3.2 Rekenaarmodel

Die wiskundige model, soos beskryf deur Vergelykings 5 tot 20, is gebruik om 'n Tekna plasmareaktor te simuleer met COMSOL Multiphysics[®] modellering sagteware. Die model is geïmplementeer met drie fisikanodes, nl. vir vloeidinamika, warmte-oordrag en die elektromagnetiese veld. Die magneetveld-node los die Maxwell-vergelykings op vir die elektromagnetiese velde, opgewek deur 'n ossilerende stroom in die klos. Die COMSOL-plasmapakket is gebruik om die magneetveld-node en die warmte-oordrag-node te koppel deur 'n plasmahittebron te verskaf. Die $k-\omega$ turbulente model werk beter naby aan grense waar $k-\epsilon$ weer beter werk verder vanaf grense (Wasserman, 2016). Die geometrie behels interne vloei naby aan die wande daarom is die $k-\omega$ -turbulente model gebruik vir die vloei vergelykings.

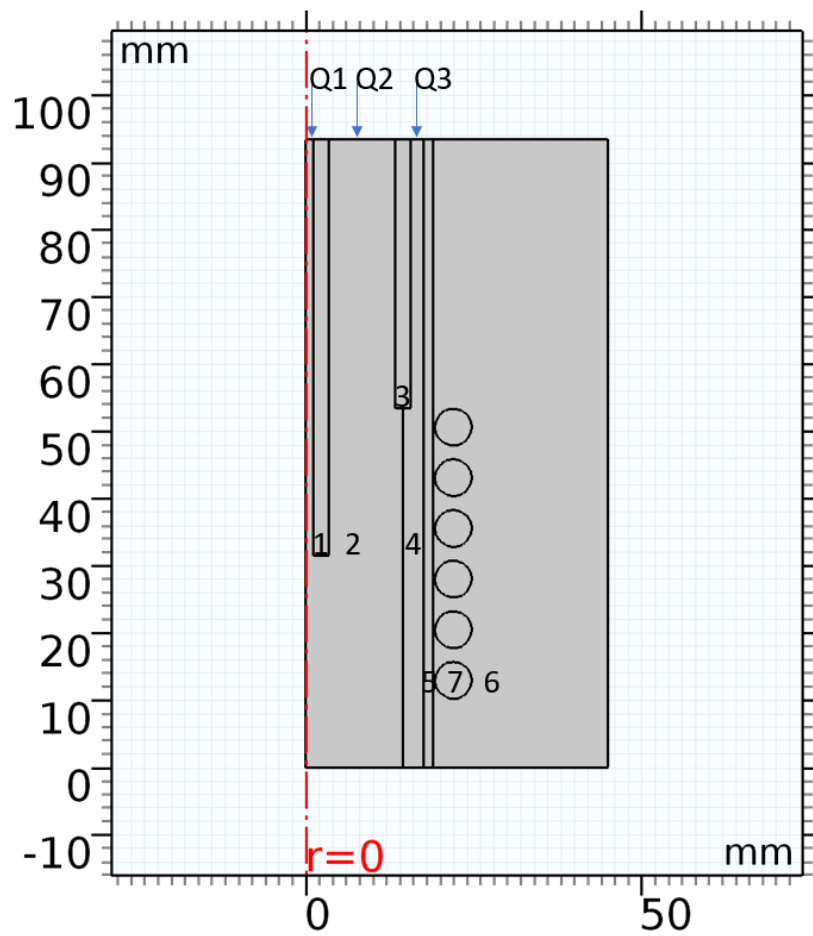
Die modelgeometrie word in Figuur 15 gegee. Die geometrie is 'n praktiese vereenvoudiging van die tegniese diagram Figuur 17 in Afdeling 4.1. Die silindriese simmetrie van die reaktor is vereenvoudig na 'n 2D-aksiaalsimmetriese voorstelling, met 'n gevolglike drastiese vermindering in berekening- en simulasietyd.

Gebied 1 (in Figuur 15) is die wand van die draergasbuis en Q1 is die draergasinlaat. Gebied 2 is die sentrale plasmagas, Gebied 3 die kwartsbuis wat die plasmagas en skermgas skei. Gebied 4 is die skermgas en gebied 5 die plasmareaktorwand. Die vloeidinamika-vergelykings is slegs opgelos vir gebied 2 en 4 met 'n geenglip-randvoorwaarde op die wand (die grens tussen Gebied 4 en 5). Die grens tussen gebied 2 en 4 is oop, met geen fisiese effekte op die vloeiende warmte-oordrag nie.

COMSOL neem nie die vermenging van gase in 'n plasma in ag nie. Die modellering van 'n sisteem met waterstof in die skermgas vereis dat die sagteware ge-'kul' word met 'n vals skeiding tussen twee gebiede met verskillende samestellings, maar steeds toelaat vir vloei en warmte-oordrag. Gebied 4 is daarom 'n homogene mengsel van waterstof en argon en die eienskappe is met die hand ingeprogrammeer.

Die warmte-oordrag is bepaal in gebiede 2, 4, en 5. Warmte-oordrag in die res van die geometrie is nie van belang nie, aangesien die energie verloor deur die verkoelingswater ingesluit is in die model deur 'n vaste temperatuur van 300 K op die buite wand te spesifiseer.

Die sisteem is ondersoek in 'n frekwensie-tyd-gebied vir 8 s van bedryfstyd. Verskeie simulاسies is gedoen met wisselende hoeveelhede H_2 in die skermgas. Dit word verder in Afdeling 5.3 bespreek.



Figuur 15: Simulasiegeometrie wat die verkillende gebiede en inlate aandui.

4 Eksperimenteel

Dit is ooglopend belangrik dat enige wiskundige model teenoor eksperimentele waardes ge-yk word. Hierdie afdeling behandel die eksperimentele komponent van die werk wat gedoen is om die model se akkuraatheid te bevestig.

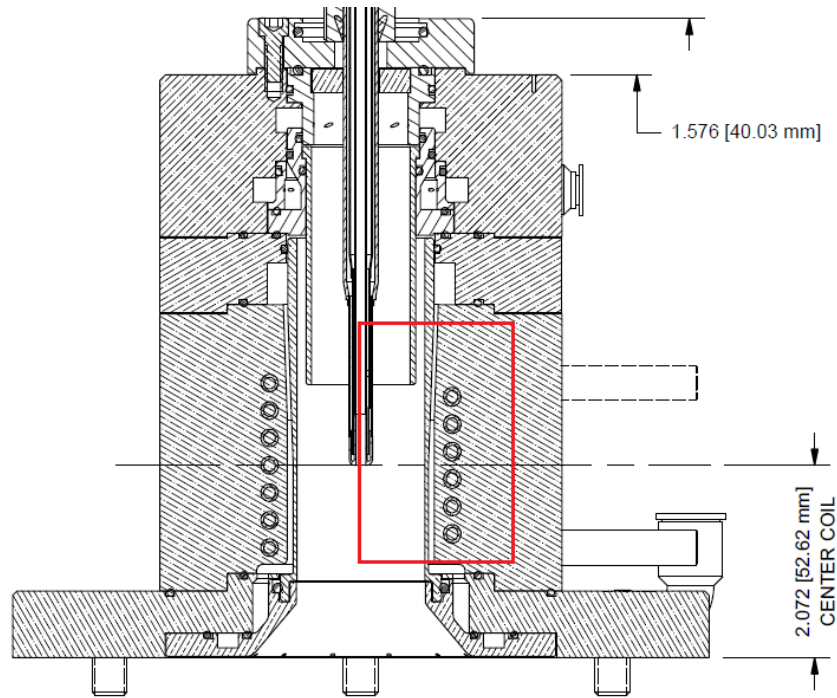
4.1 Toerusting

Die sferoïediseringstelsel waarvoor die model ontwikkel is, is die Tekna TekSphero-15 in Figuur 16. Dit is 'n 15 kW induktiefgekoppelde plasmastelsel wat ongeveer 1 kg h^{-1} metaalpoeier kan verwerk.



Figuur 16: Die Tekna TekSphero-15 IGP-sferoïediseringstelsel.

Figuur 17 is 'n tegniese diagram van die Tekna-plasmareaktor. Die area in rooi is die area wat in Figuur 15 gebruik is om te simuleer.



Figuur 17: Tegnie diagram van 'n Tekna Teksphero-15-plasmatron (Tekna, 2016: 146).

4.2 Bepanning

Verskeie eksperimentele lopies met variërende waterstofinhoud in die skermgas is by Necs uitgevoer. Meeste van die onafhanklike veranderlikes (vloei, druk en drywing) is dieselfde gestel as die in die model in van die eksperimente, maar ongelukkig nie almal nie. Dit het die bruikbare data verminder vir modelvalidasie.

Die temperatuur van die verkoelingswater se inlaat en uitlaat is gemeet en Vergelyking 21 is gebruik om die energie wat deur die wand in die verkoelingswater verloor word, te meet.

$$Q_{water} = \dot{m}_{water} C_P (T_o - T_i) \quad (21)$$

Die eksperimentele toestande wat gebruik is, word in Tabel 3 gelys.

Tabel 3: Eksperimente voltooi by die Suid-Afrikaanse Kernenergiekorporasie (Necsa).

Drywing (kW)	Ar in skermgas (slpm)	H ₂ in skermgas (slpm)	Druk (kPa)
11	40	0	85
11	40	2	85
11	40	3	85
11	40	2	65
11	40	2	100
15	40	2	85
15	40	2	65
15	40	2	100
15	40	3	85
15	40	4	85
15	40	5	85
15	50	3	85
15	30	3	85

Tabel 4 hieronder dui die verskillende afhanglike en onafhanklik veranderlikes aan. Die verskeidenheid onafhanklike veranderlikes en omstandighede waar die sisteem bedryf kan word beteken daar is te veel moontlike kombinasies om almal te toets. Daarom vir die doel van hierdie studie is slegs die waterstof inhoud in die skermgas verander om die hipotese te toets.

Tabel 4: Afhanglike en onafhanklike veranderlikes.

Afhanglike veranderlikes	Afhanglike veranderlikes
Hitte verliese	Druk
Stralings verliese	Vloei
Temperatuur	Gas samestelling
Magnetiese vektorpotensiaal	Drywing
Magnetiese vloeddigtheid	Stroom
Konduktiewe hittevloed	

5 Resultate

Daar is verskeie belangrike aspekte van die model ter sprake. Die rekenaar-hardeware waarop die model ontwikkel is, is getoets om die optimale fisiese behoeftes vas te stel. Daar is ook 'n maasdigtheidstudie uitgevoer om die nodige digtheid van die maas vas te stel. Die belangrikste is natuurlik die resultate vir die samestelling van die skermgas en die verskillende gevalle wat getoets is. Daar was ook voorlopige werk gedoen vir die partikeltrajekte binne die plasma-torus.

5.1 Optimering van rekenaarhardeware

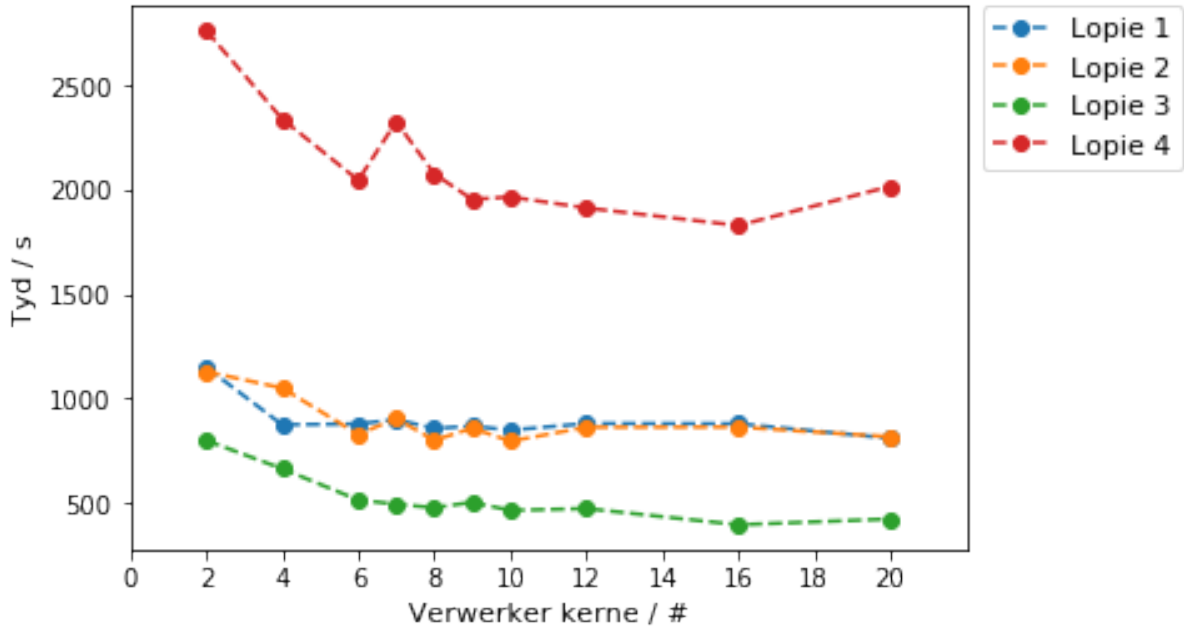
Die spesifieke rekenaarhardeware wat gebruik is, het ooglopend 'n groot invloed op die oplossingstyd. Die algemene idee van 'hoe groter hoe beter' is bewys om nie noodwendig waar te wees nie. Die twee belangrike aspekte van die hardeware is die hoeveelheid rekenaargeheue en aantal verwerkers wat die rekenaar beskikbaar het. 'n Paar toetslopie is gedoen op 'n trosrekenaar (Eng. 'cluster computer') met 2 Intel Xeon Gold-verwerkers wat elkeen 20 fisiese kerne het, saam met 20 logiese kerne, en 396 GB geheue in totaal. Dit is bevind dat vir COMSOL oor die algemeen, die totale verwerkingstyd afplat vir meer as 8 kerne. Die gebruik van slegs 8 kerne is dus optimaal 'n gewone rekenaar met 'n i7 verwerker met 8 fisiese kerne is meer as voldoende. Die hoeveelheid geheue gebruik hang baie af van die geometrie van die model en in 3D-gevalle kan 'n paar honderd gigagrepe se geheue nodig wees. Dit word wel aanbeveel om met 'n absolute minimum van ten minste 16 GB geheue te werk.

Figuur 18 illustreer die bogenoemde bevinding, dat wanneer meer as 8 verwerkers gebruik word daar nie veel verdere verbetering in verwerkingstyd is nie en dat dit in sommige gevalle dit selfs verswak.

Tabel 5 beskryf die verskil tussen die lopies wat gebruik is om die hardeware te toets.

Tabel 5: Lopiebeskrywings vir hardewaretoets, lopie 2 is 'n herhaling van lopie 1

Lopie	Tipe	maasgrootte	Numeriese metode
1	IGP	17 000	MUMPS
2	IGP	17 000	MUMPS
3	IGP	17 000	PARDISO
4	IGP	49 000	MUMPS

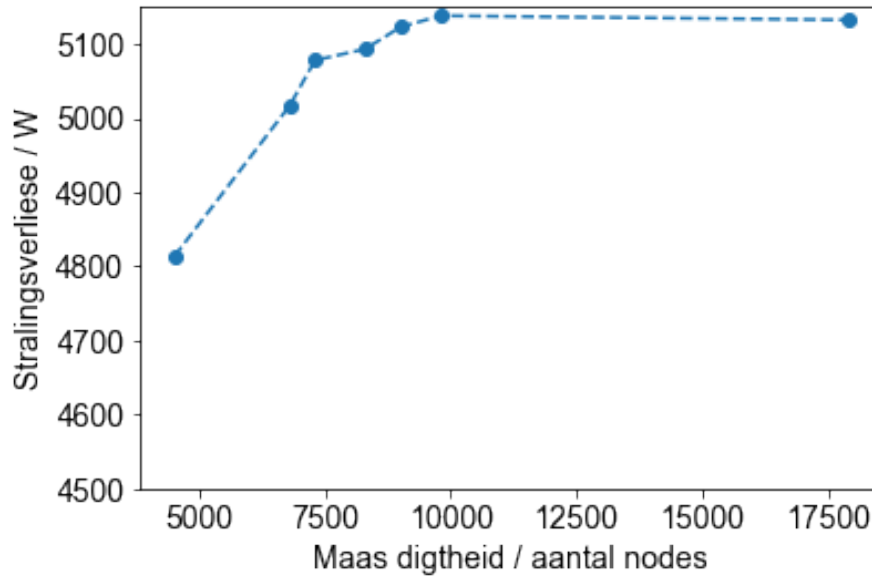


Figuur 18: Verwerkings tyd van verskillende gevalle op trosrekenaar.

5.2 Maasdigtheidstudie

Die maas is 'n kritiek-belangrike aspek van die simulasiëproses. Indien 'n maas nie fyn genoeg is nie, kan dit 'n diskontinuiteit in die resultate veroorsaak. Die maasstudie is dus gedoen om te bevestig dat die maas fyn genoeg is deur sistematies verskillende groottes te toets. Die punt waar verfyning nie verdere verandering tot gevolg het nie, word as akkuraat genoeg beskou. In baie gevalle kan die maas ook te fyn wees en, behalwe om onnodige rekenaarhardeware te vereis, ook divergente gedrag in die oplossing veroorsaak.

Sewe verskillende maasdigthede is getoets. Figuur 19 wys die stralingsverliese as funksie van die maasdigtheid verander. Dit is duidelik dat dit stabiliseer rondom 9 000 maasnodes. Dit impliseer dat 'n maas van ten minste 9 000 nodes benodig word vir 'n akkurate oplossing. Die kleinste maas wat getoets is, het 4 500 nodes bevat; minder as dit het divergente gedrag in die model veroorsaak.



Figuur 19: Stralingsverliese van die plasma as 'n funksie van maasdigtheid

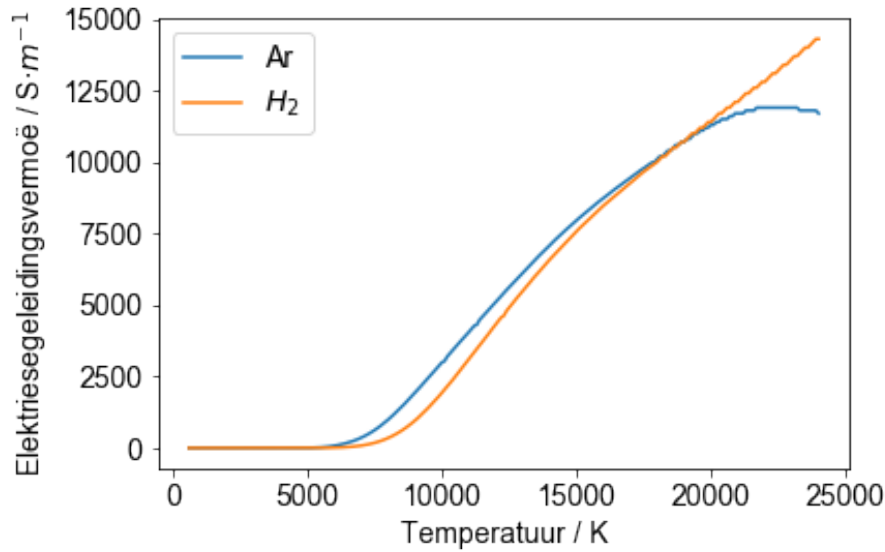
5.3 Skermgas

Die skermgas speel 'n belangrike rol in die termiese afskerming van die reaktorwand in 'n IGP. Waterstof is moeiliker om te ioniseer as argon en die elektriese geleidingsvermoë is laer as die van argon by temperature van belang. Waterstof word dus in klein hoeveelhede in die skermgas gebruik in die geval van argon as hoofplasmagas. Waterstof voorkom dus plasmavorming naby die wand. Die skermgas het ook 'n heelwat hoër vloeisnelheid en verminder so die tyd vir konvekiewe hitte-oordrag na die wand. Daar is verskeie numeriese modelle van IGP-sisteme in die literatuur; nie een neem egter die effek van die skermgassamestelling in ag nie. Die hoeveelheid waterstof in die skermgas kan groot newe-effekte op die plasmagas hê a.g.v. sy fisiese eienskappe. 'n Oormaat waterstof in die skermgas is verder 'n mors van voermateriaal. Albei die faktore het 'n invloed op die ekonomie van die plasmaproces.

Figuur 20 gee die elektriese geleidingsvermoë van waterstof en argon as 'n funksie van temperatuur, soos gebruik deur COMSOL. In die temperatuurreeks van belang, *viz.*, 5 000 K to 20 000 K, is die elektriese geleidingsvermoë van argon hoër as waterstof en sal dus makliker ioniseer by laer temperature. Waterstof sal dus a.g.v. sy hoër weerstand minder stroom deurlaat, en in kritiese gevalle nie die vorming van 'n plasma toelaat nie.

Die samestelling van die skermgas is tussen $x = 0\%$ en 7.5% H_2 gewissel om die effek van die waterstofinhoud te bepaal. Die bedryfstoeistande vir die wisselende H_2 hoeveelheid in die skermgas-simulasies word in Tabel 6 getoon.

Die hoofresultate word in Figuur 21 tot Figuur 27 aangetoon. Figuur 21 wys die tempe-



Figuur 20: Elektriesegeleidingsvermoë van argon en waterstof as 'n funksie van temperatuur (Boulos, Fauchais & Pfender, 1994: 387–447).

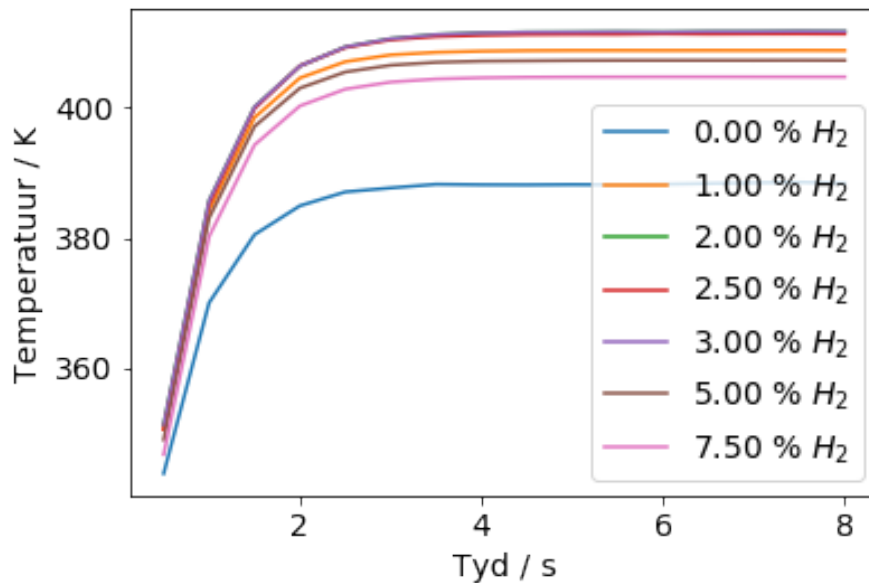
Tabel 6: Simulasieparameters

Eienskap	Waarde	Eenheid
Drywing	11	kW
Frekwensie	3	MHz
Inlaat 1	2	slpm
Inlaat 2	10	slpm
Inlaat 3	40 + x	slpm
Beginwaarde: temperatuur	300	K
Beginwaarde: vloeï veld	0	m s ⁻¹
Beginwaarde: magnetiese vektor potensiaal	0	Wb m ⁻¹

ratuur by 'n vaste punt in die middel van die wand. Die punt is gestel op die hoogte waar Figuur 22 die maksimum temperatuur bereik. Figuur 22 wys die temperatuur 1 mm weg van die reaktor se wand af. Figuur 23 wys die totale radiale hittevloed oor die grens op die buitewand. Figuur 27 wys die radiale temperatuurprofiel by die maksimum temperatuur vir elke simulاسie.

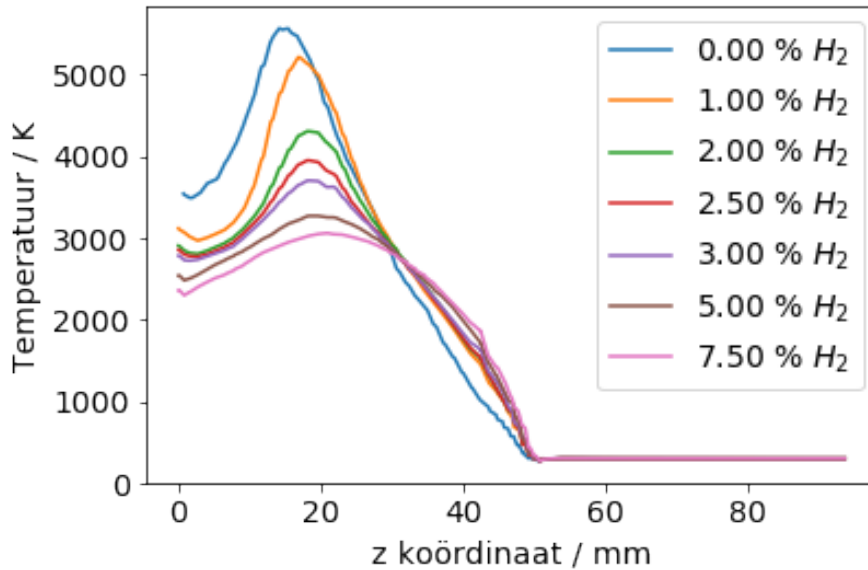
Die temperatuur in die wand blyk of dit 'n gestadigde toestand bereik na 4 s (Figuur 21). Die simulاسies is dus almal vir 8 s geloop. Die teenwoordigheid van waterstof veroorsaak dat die hitesone na links beweeg en verminder plasmavorming by die wand (soos later aangetoon); maar dit verbeter ook die hitte-oordrag na die wand. Dit word verwag aangesien, soos bo genoem, waterstof 'n beter hittegeleidingsvermoë as argon het. Hierdie effek veroorsaak ook 'n warmer plasma, in geheel, met 'n hoër maksimumtemperatuur as gevolg van die teenwoordigheid van waterstof in die plasma. Die verbeterde hittegeleiding

na die wand en die groter afstand tussen die wand en die hittesone is twee kompeterende effekte wat lei tot 'n optimale punt.



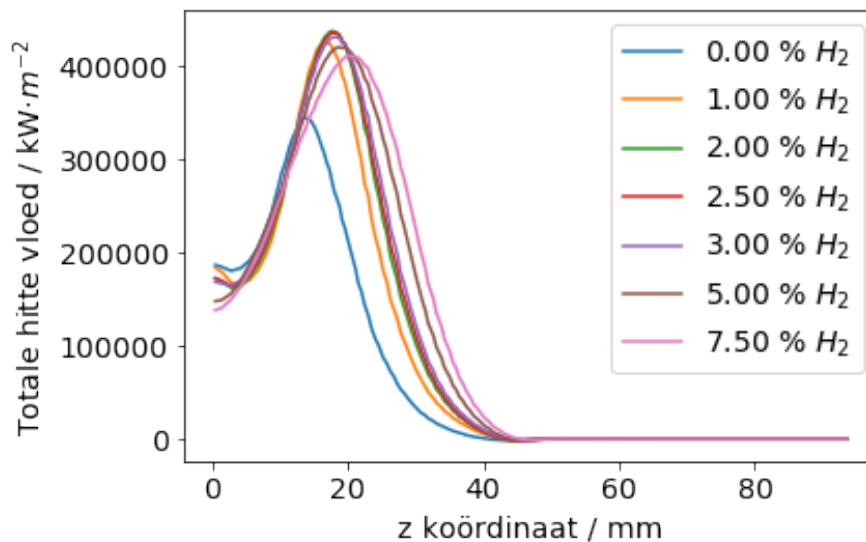
Figuur 21: Temperatuur in die plasmareaktorwand by die hoogte van die maksimum temperatuur vir 30 s bedryfstyd.

Figuur 22 wys die temperatuurprofiel 1 mm weg van die binnewand oor die volle lengte van die reaktor vir verskillende konsentrasies van H₂ in die skermgas by die finale tydstep. Die maksimumtemperatuur naby die wand is onder 5 000 K indien daar meer as 2.0 % H₂ in die skermgas is. Argon begin om te ioniseer by 5 000 K. Dit beteken dus dat daar geen plasmavorming by die wand plaasvind nie. Dit is 'n vereiste om die temperatuur onder 5 000 K te hou by die wand, ordelik die temperatuur waaronder 'n plasma nie onderhou kan word nie. Ons kan uit hierdie data die gevolgtrekking maak dat daar ten minste 2 % H₂ in die skermgas moet wees.



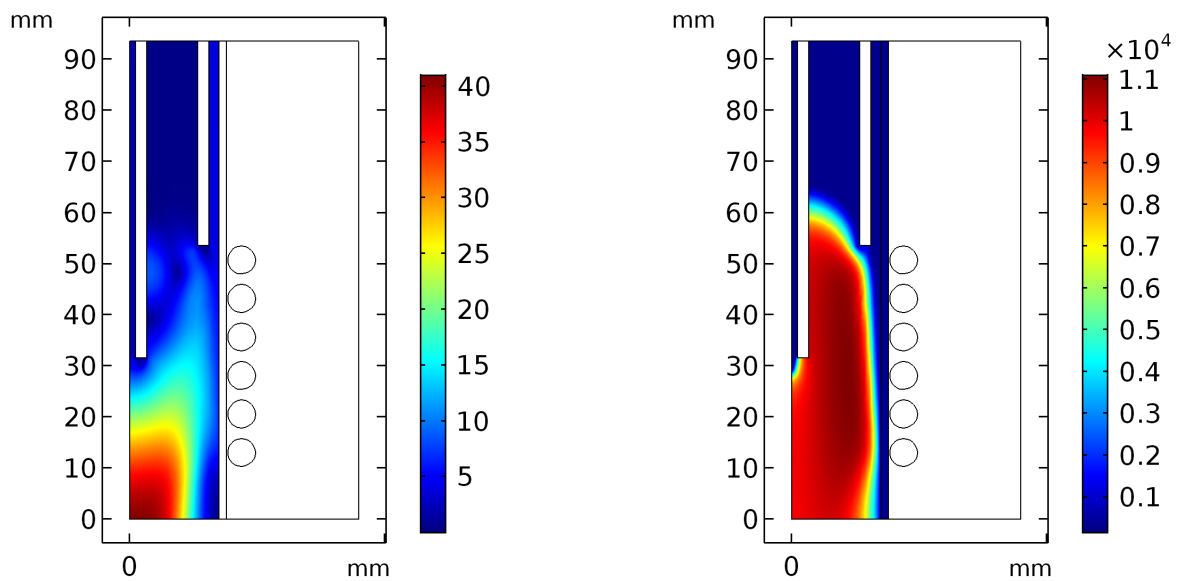
Figuur 22: Temperatuur 1 mm weg van die binnewand vir verskillende konsentrasies H_2 in die skermgas.

Figuur 23 wys die totale normaal-hittevloed oor buitewand vir verskillende konsentrasies H_2 -gas. Dit is duidelik dat die H_2 'n groot invloed tot op 2.0 % H_2 uitoefen, en dat verdere verhoging in die H_2 -konsentrasie nie verdere groot verandering veroorsaak nie.

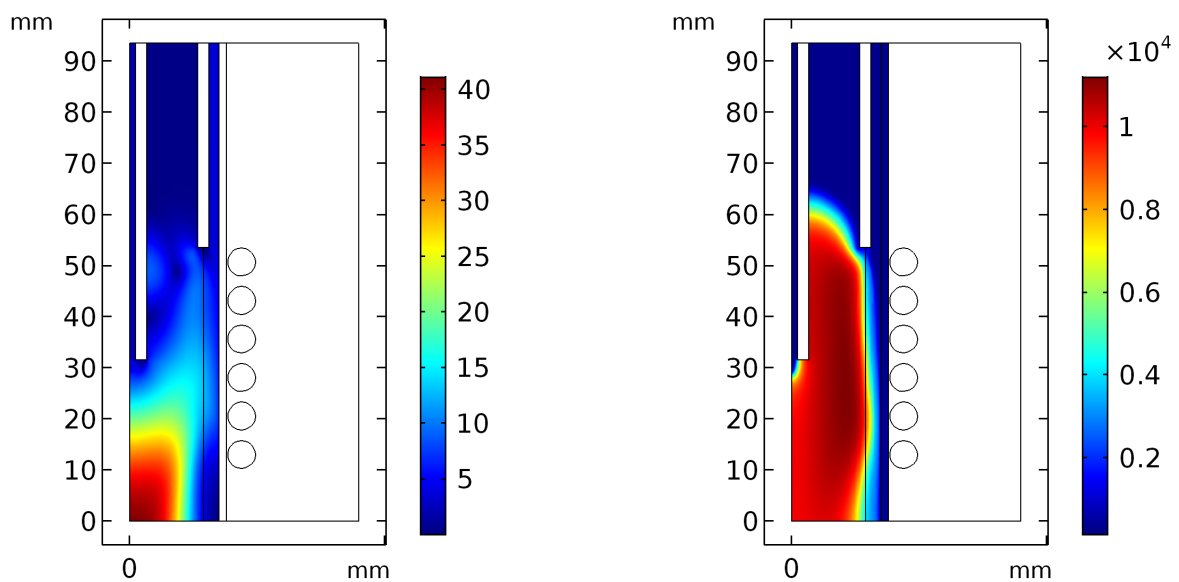


Figuur 23: Totale hittevloed oor die buitewand by verskillende konsentrasies H_2 gas.

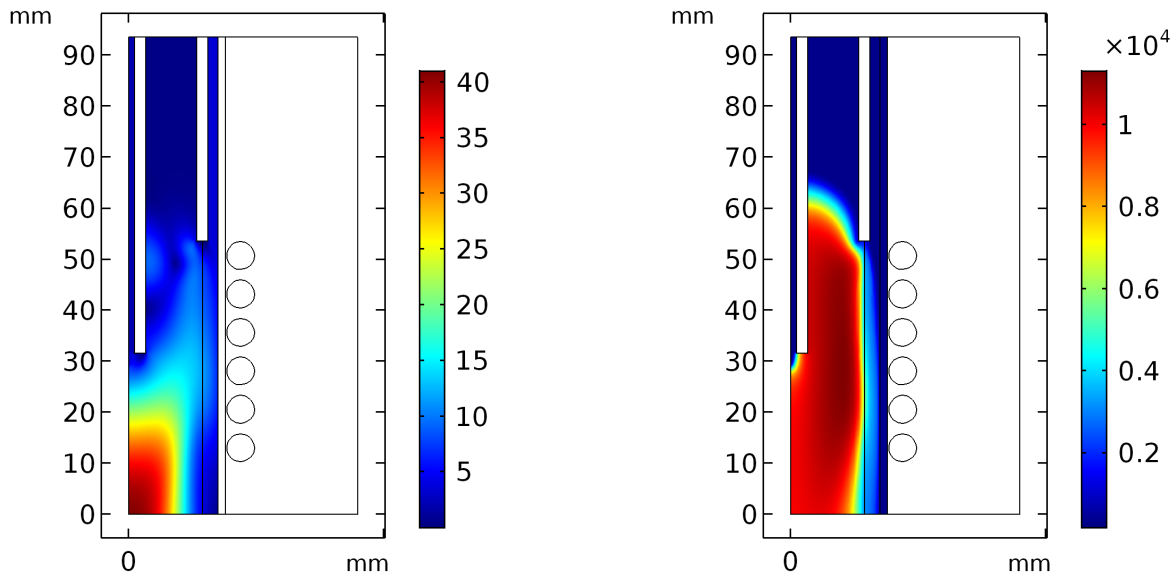
Figuur 24 - 26 wys die temperatuurprofiel van die geometrie (regs) en die vloeiveld (links) vir die lopies met 0 %, 3 %, en 7.5 % H_2 in die skermgas. Die resultate vir die res van die lopies is in Bylae A. Die figure wys hoe die hittedone van 0 % tot 7.5 % H_2 in die skermgas meer na die middel beweeg.



Figuur 24: Vloeveld links en temperatuurprofiel regs vir 0 % H₂ in die skermgas.



Figuur 25: Vloeveld links en temperatuurprofiel regs vir 3 % H₂ in die skermgas.



Figuur 26: Vloeierveld links en temperatuurprofiel regs vir 7.5 % H₂ in die skermgas.

Tabel 7 wys die totale energie verloor deur die buitewand vir verskillende konsentrasies H₂ in die skermgas.

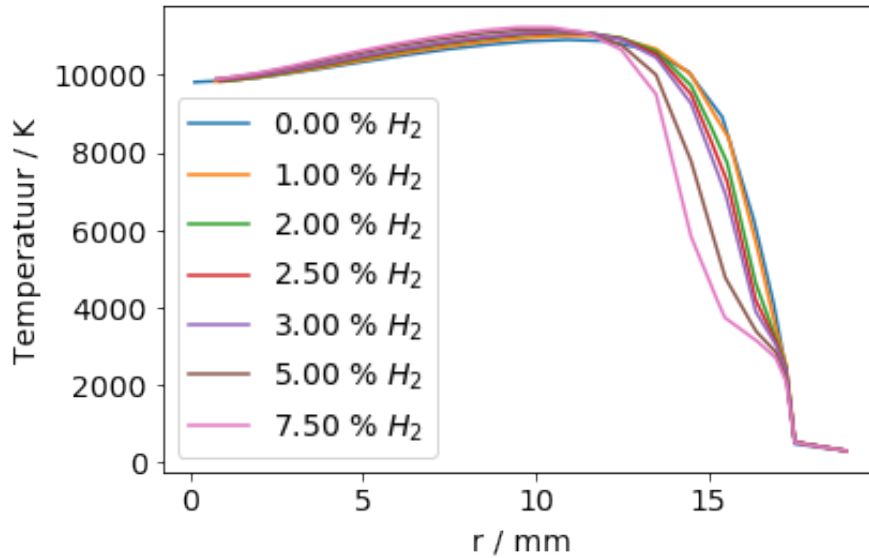
Tabel 7: Energiebalans

H ₂ (%)	Warmteverlies deur wand (W)	Stralings- verliese (W)	Hitteverlies deur uitlaat (W)	Hitteverlies deur klos (W)	Joule- verhitting (W)	Balans (W)
0	741.34	5051.0	4972.8	226	10 774	8.86
1	942.35	5136.1	4571.8	232	10 768	117.75
2	1020.6	5135.3	4408.8	240	10 760	195.30
2.5	1038.3	5125.6	4349.7	246	10 754	240.40
3	1062.9	5122.8	4287.7	250	10 750	287.30
5	1133.9	5140.6	4086.2	266	10 734	373.30
7.5	1177.6	5170.0	3936.9	284	10 716	431.50

Die waardes in Tabel 7 dui dat die stralingsverliese die laagste is in 'n suiwer argonplasma. Waterstof se teenwoordigheid in die skermgas veroorsaak 'n toename in stralingsverliese, alhoewel daar 'n lokale minimum by 3 % H₂ in die skermgas ontstaan.

Figuur 27 dui die beweging van die hittedone na links met 'n toename van H₂ in die skermgas. Die hittedone skuif amper 4 mm links van 0 % na 7.5 % H₂ in die skermgas.

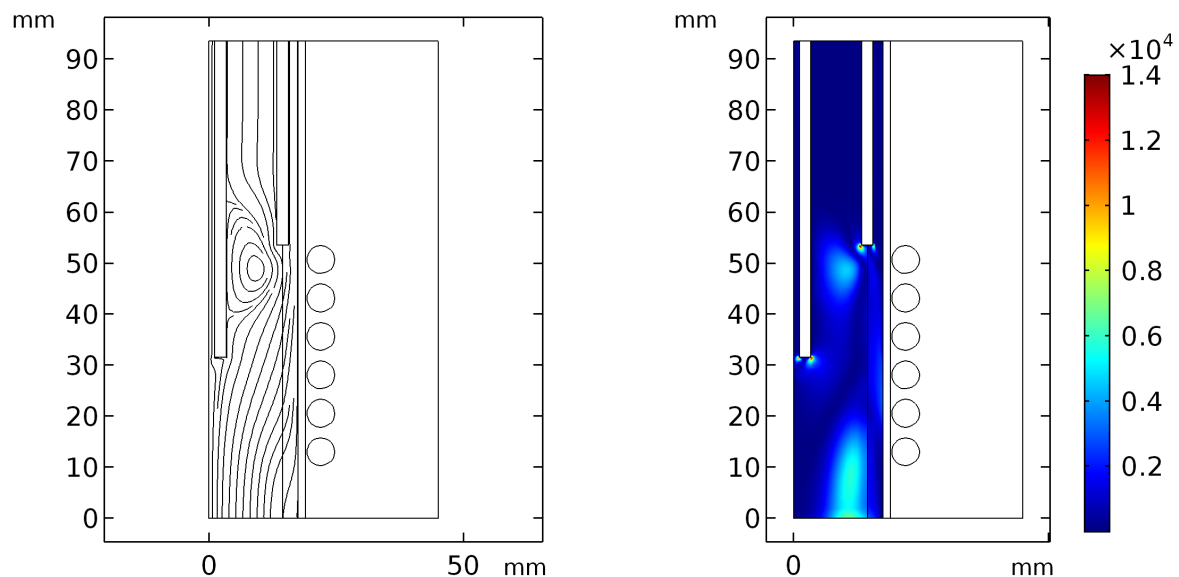
Ons neem waar uit Figuur 22 dat daar ten minste 2 % H₂ in die skermgas moet wees. Ons weet ook dat H₂ duurder is as Ar en daarom wil 'n mens spaarsamig daarmee werk, vir ekonomiese redes. Te veel H₂ kan ook die plasma blus. Die lokale minimum in stralingsverliese by 3 % H₂ in die skermgas dui dus saam met die laasgenoemde dat die



Figuur 27: Radiale temperatuurprofiel by die maksimum temperatuur.

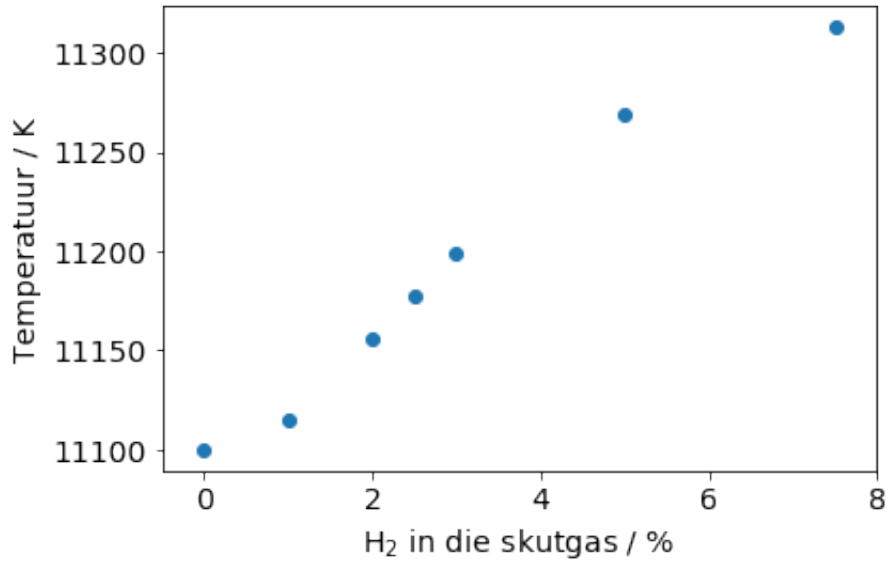
optimale hoeveelheid waterstof om in argonplasma se skermgas te gebruik, 3 % H_2 op 'n molbasis moet wees.

Die stroomlyne en vortisiteit van 3 % H_2 in die skermgas kan in Figuur 28 gesien word. Die sirkel in die middel van die geometrie dui op die teenwoordigheid van werwelings. Die vortisiteit wys twee groot werwelings van omtrent 5 kHz. Dit ondersteun die keuse om turbulente vloei te gebruik om die sisteem te simuleer.



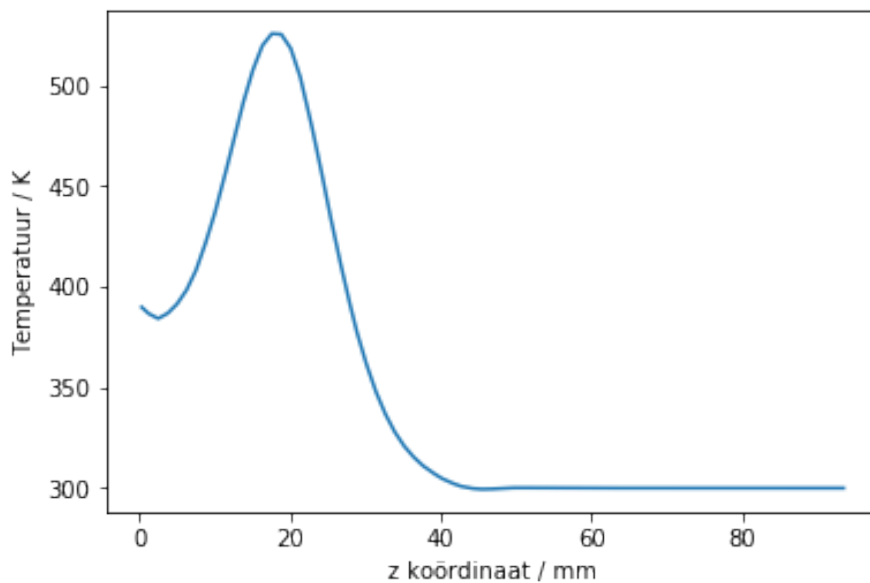
Figuur 28: Stroomlyne in die vloeiveld links en die vortisiteit in Hz regs van die IGP met 3 % H_2 in die skermgas.

Figuur 29 wys hoe die maksimum temperatuur verander as funksie van die hoeveelheid H_2 in die skermgas.



Figuur 29: Maksimumtemperatuur in 'n IGP by verskillende H₂-konsentrasies.

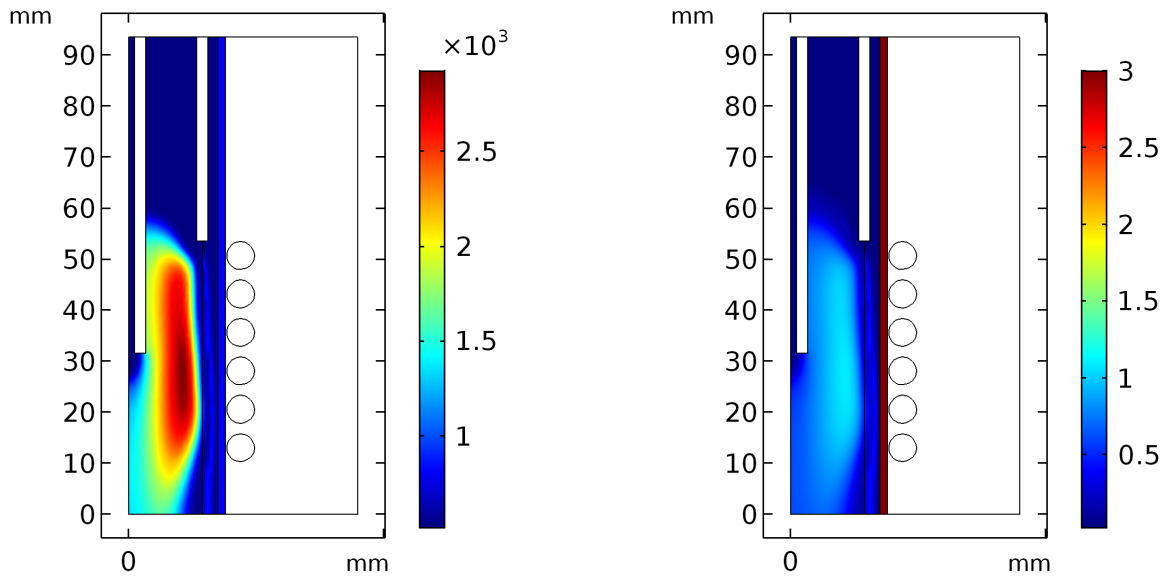
Figuur 30 wys die temperatuur op die wand vir 3 % H₂ in die skermgas. Die maksimumtemperatuur op die wand is 520 K wat laag genoeg is om termiese skade op die wand te verhoed.



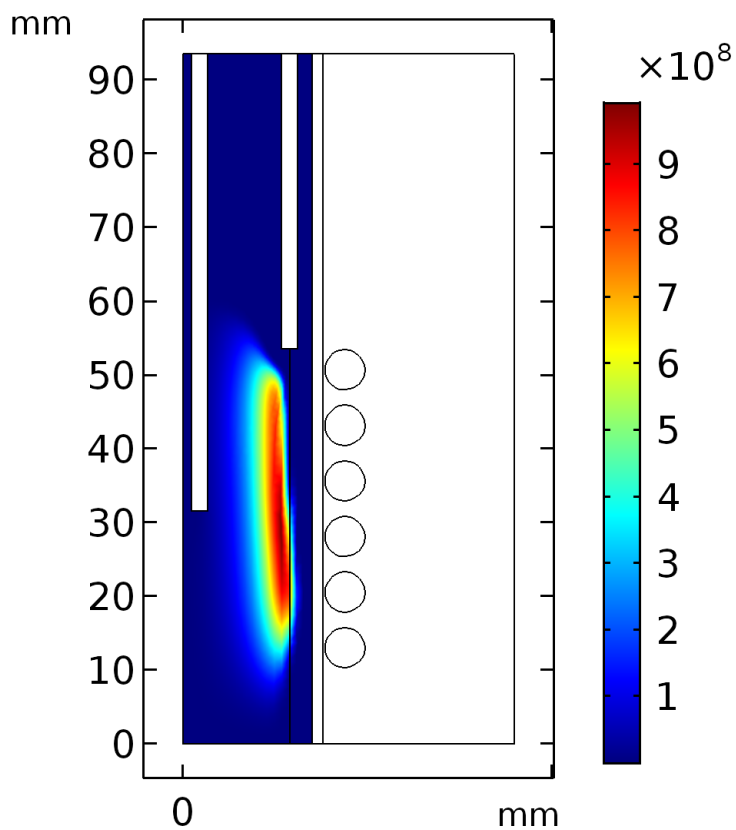
Figuur 30: Wandtemperatuur vir 3 % waterstof in die skermgas.

Figuur 31 wys die konduktiewe hitte-oordrags koëffisient en die warmtekapasiteit van die plasma met 3 % H₂ in die skermgas.

Figuur 32 wys die Joule-verhitting in die plasma.

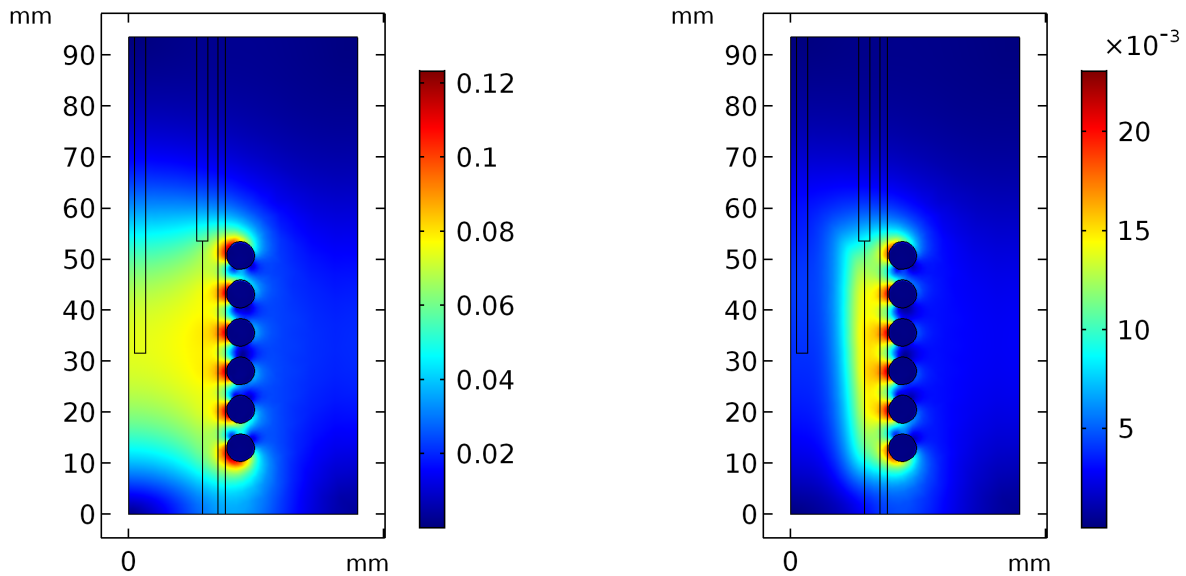


Figuur 31: Konduktiewehitte-oordragskoeffisient ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$) links en die warmtekapasiteit ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$) regs.



Figuur 32: Verhittingsdigtheid (W m^{-3}).

Figuur 33 wys die vloeddigtheid van die magnetiese veld aan die begin en na 8 s. Die effek van die veld kan hier gesien word. Wanneer die argon ioniseer en elektries geleidend word, kan die magneetveld nie meer so diep penetreer soos by tyd 0 s nie.



Figuur 33: Vloeddigtheid (T) van die magnetiese veld by tyd 0 s (links) en na 8 s (regs).

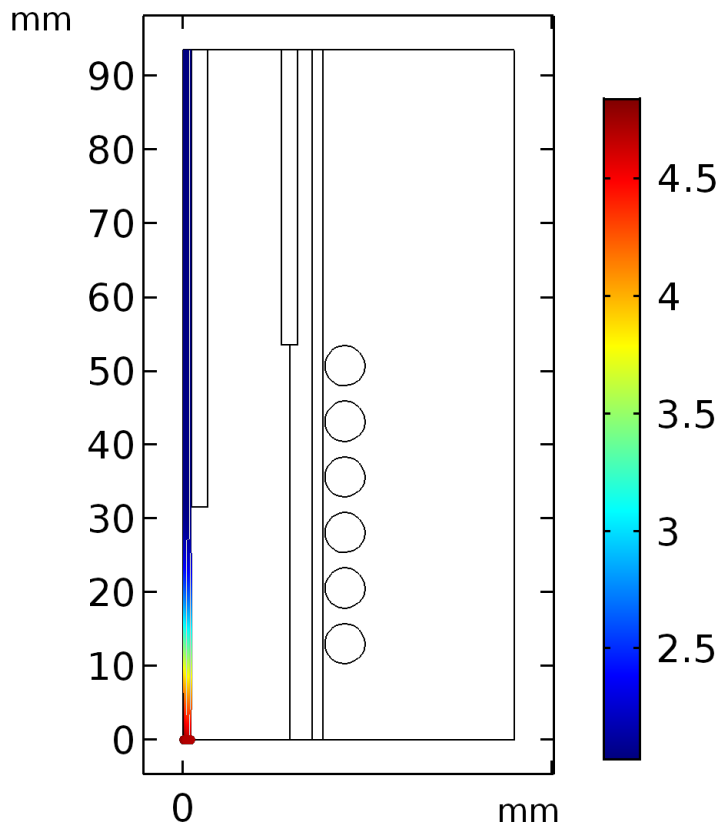
5.4 Partikeltrajekte

Die aard van die partikeltrajekte is van uiterste belang vir metaal-sferoïdisering. Hierdie kennis kan gebruik word om te bevestig dat die mees effektiewe pad gevolg word. Indien nie, kan verstellings gerasionaliseer word om enersyds te verhoed dat partikels verdamp, of andersyds dat hulle nie smelt nie.

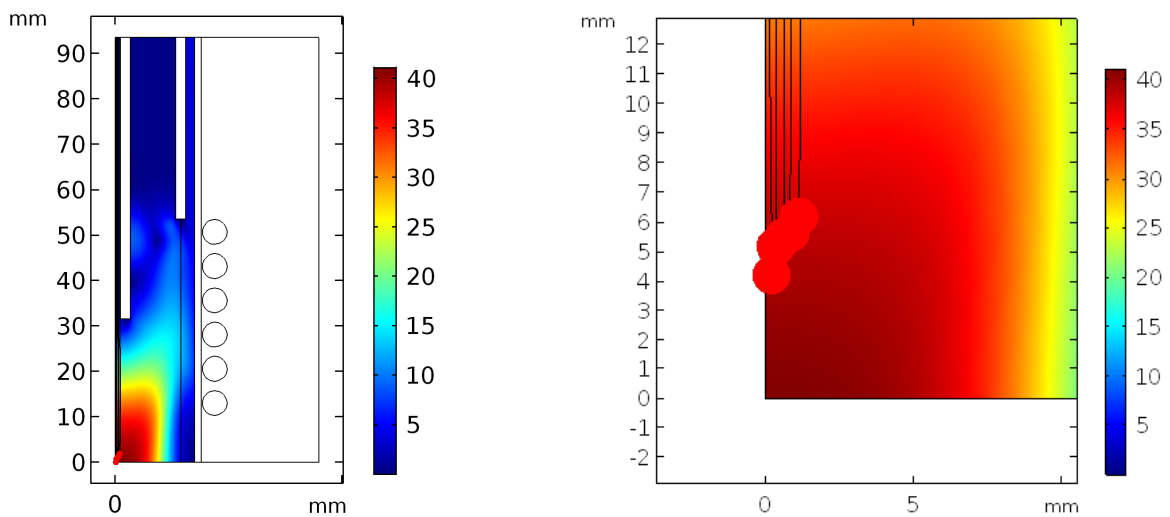
Daar is voorlopige werk aangaande die partikel trajekte gedoen. Die voorspelde partikel-snelhede kan in Figuur 34 gesien word.

Figuur 35 toon die partikeltrajekte aan. Hierdie is slegs voorlopige werk en hierdie model neem nie die effek van die partikels op die gasvloei in ag nie. Daarom lyk dit of die partikels 'n besondere reguit pad deur die reaktor volg.

Hierdie simulاسies vermeerder egter die berekenings tyd aansienlik. Soos uitgewys in Afdeling 5.1 presteer die sagteware optimaal met 8 kerne met ander woorde groter en beter hardware is nie die oplossing nie. Dit het 'n paar dae geneem om slegs enkele sekondes te simuleer met eenvoudiger fisika. Dus sal die probleem moet heroorweeg word en ander benadering word dus benodig vir hierdie probleem.



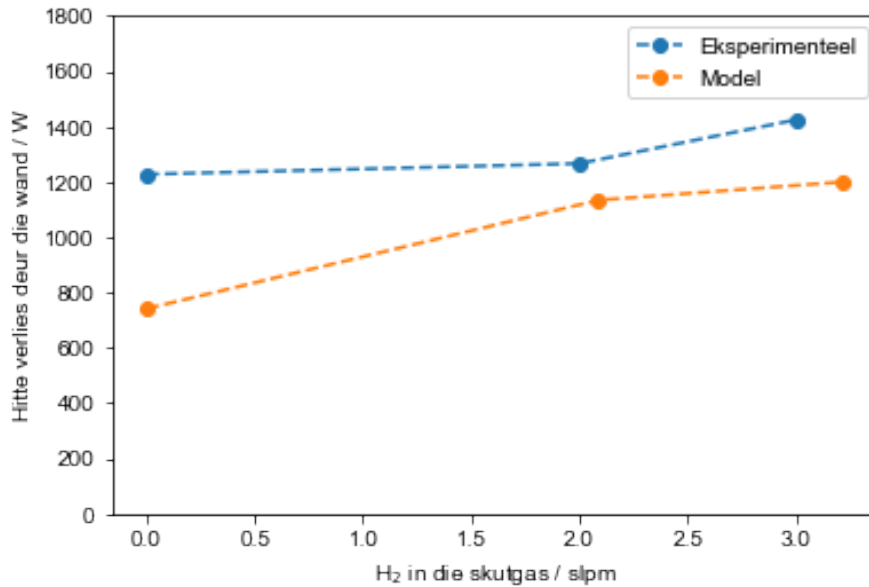
Figuur 34: Partikelsnelhede in m s^{-1} .



Figuur 35: Partikeltrajekte met 'n vergroete beeld regs op die vloei-profiel van die plasmagas in m s^{-1}

5.5 Modelvalidasie

Die bedryfstoestande vir die eksperimentele werk by Necsa word aangedui in Tabel 3 in Afdeling 4.2. Slegs drie datapunte kan vir modelvalidasie gebruik word. Figuur 36 toon die eksperimentele asook model resultate vir die drie gevalle.



Figuur 36: Eksperimentele en model-resultate van wamte verliese verloor deur die plasmareaktorwand.

Figuur 36 toon die verskil tussen die eksperimentele waardes en die hitte verlies resultate verkry vanaf die rekenaarmodel. Die model toon 'n gemiddelde fout van 22.4 % wanneer bereken soos aangedui in Vergelyking 22.

$$\% F_{out} = \frac{\sum_n^i \frac{E_i - M_i}{E_i}}{n} \times 100 \quad (22)$$

Daar is verskeie oorsake vir die fout. Die onafhanklike veranderlikes wat konstant gehou was vir die simulatie sal by 'n presies konstante waarde bly waar die waardes in werklikheid effens kan fluktueer en dalk nie presies is nie. Selfs al kon die waardes presies reg bly tydens die bedryf van die eksperiment sal daar steeds 'n fout wees aangesien die model 'n vereenvoudigde numeriese oplossing van die Navier-Stokes vergelyking is. COSMOL kan ongelukkig nie die vermenging van gas spesies simuleer nie, daarom is daarom geen konsentrasie gradiënt tussen gebied 4 en 2 nie in Figuur 15. Die verskillende faktore kan na 'n groter fout lei as wat verwag word.

5.6 Opsomming

Die optimale hoeveelheid rekenaarkerne om hierdie model op te los met behulp van COMSOL Multifisika is agt. Die maasdigtheidstudie het getoon dat 9 000 nodes fyn genoeg is vir 'n akkurate oplossing van die model. Die skermgasanalise het gewys dat 3 % H₂ in die skermgas op 'n molbasis die optimale samestelling is. Die voorlopige werk in partikeltrajekte toon dat die partikels deur die middel van die hitte-sone beweeg en 'n aanvaarbare residensityd het.

6 Gevolgtrekking

Die rekenaarmodel dui daarop dat die plasmatronwand teen plasmavorming beskerm kan word deur die teenwoordigheid van waterstof in die skermgas deur die kontak tussen die hittesone en die wand te verhoed. Waterstof verbeter wel die skermgas se warmte-oordrag vermoë as gevolg van sy hoër warmte-geleidings vermoë. Dit beteken dat die skermgas hitte meer effektief verwyder. Die wand word ook warmer, maar die plasma gas in die onmiddellike omgewing van die wand koel af. Waterstof is duur en uit 'n ekonomiese oogpunt is dit voordelig om so min as moontlik waterstof in die skermgas te gebruik. Ons weet dat 'n minimum van 2 % benodig word om die wand teen plasmavorming te beskerm. Die minimum in die stralingsverliese by 3 % persent dui daarop dat dit die optimale bedryfspunt is. Dit is voldoende om die wand te beskerm en min genoeg dat dit ekonomies sinvol is.

Bibliografie

Aghaei, M en Bogaerts, A (2016) “Particle transport through an inductively coupled plasma torch: elemental droplet evaporation” *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 31, (3): 631–641.

ANSYS, Inc (2018) *ANSYS Fluent* URL: <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent> (visited on 07/19/2018).

Baeva, M en Uhrlandt, D (2010) “Magnetohydrodynamic modeling for an OVD reactor setup” *Surface and Coatings Technology*, 204, (24): 4044–4050.

Bogaerts, A en Aghaei, M (2017) “Inductively coupled plasma-mass spectrometry: insights through computer modeling” *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 32, (2): 233–261.

Bolot, R, Coddet, C, Schreuders, C, Leparoux, M en Siegmann, S (2007) “Modeling of an inductively coupled plasma for the synthesis of nanoparticles” *Journal of Thermal Spray Technology*, 16, (5-6): 690–697.

Boulos, MI, Fauchais, P en Pfender, E (1994) *Thermal Plasmas: Fundamentals and Applications*, Plenum, New York.

Colombo, V, Ghedini, E en Mostaghimi, J (2008) “Three-dimensional modeling of an inductively coupled plasma torch for spectroscopic analysis” *IEEE transactions on plasma science*, 36, (4): 1040–1041.

COMSOL INC (2017) *CFD Module User’s Guide version 5.3a*.

COMSOL INC (2018) *Understand, Predict, and Optimize Engineering Designs with the COMSOL Multiphysics Software* URL: <https://www.comsol.com/> (visited on 07/16/2018).

Concept Laser (2017) “X LINE 2000R” , <http://www.conceptlaserinc.com/en/products/machines.html> [2018, Februarie 19].

ESI Group (2018) *CFD-ACE+* URL: <https://www.esi-group.com/software-solutions/virtual-environment/cfd-multiphysics/ace-suite/cfd-ace> (visited on 08/03/2018).

Feinman, J (1987) *Plasma Technology in Metallurgical Processing*, Iron and Steel Society, Warrendale, PA.

Ford, S en Despeisse, M (2016) “Additive manufacturing and sustainability: an exploratory study of the advantages and challenges” *Journal of Cleaner Production*, 137, 1573–1587.

Fridman, A en Kennedy, LA (2004) *Plasma Physics and Engineering*, CRC press, Florida.

Gebhardt, A en Hötter, JS (2016) *Additive Manufacturing 3D Printing for Prototyping and Manufacturing*, Hanser Publications.

Geng, Y, Dalhaimer, P, Cai, S, Tsai, R, Tewari, M, Minko, T en Discher, DE (2007) “Shape Effects of Filaments Versus Spherical Particles in Flow and Drug Delivery” *Nature Nanotechnology*, 2, (1): 249–255.

Hewlett Packard (2018) *HP Metal Jet technology* URL: <http://www8.hp.com/h20195/v2/GetPDF.aspx/4AA7-3333EEW.pdf> (visited on 09/14/2018).

Ikhlef, N, Hacib, T, Leroy, O en Mékiddèche, M (2012) “Nonlinear compressible magnetohydrodynamic flow modeling of a process ICP torch” *The European Physical Journal-Applied Physics*, 58, (1).

Ji, Z, Jin, H, Wu, Y, Li, Y, Liu, M, Xu, C, Hou, P, Dong, J en Hou, S (2015) “Numerical simulation of silica particle trajectory in flow field and silica particle spheroidizing in oxygen-acetylene flame spheroidization process” *Powder Technology*, 286, 451–458.

Jiang, XL en Boulos, MI (2006) “Induction plasma spheroidization of tungsten and molybdenum powders” *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 16, (1): 13–17.

Karoly, Z en Szepvolgyi, J (2005) “Plasma spheroidization of ceramic particles” *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 44, (2): 221–224.

Lei, F, Li, X, Liu, Y, Liu, D, Yang, M en Yu, Y (2018) “Simulation of a large size inductively coupled plasma generator and comparison with experimental data” *AIP Advances*, 8, (1): 015003.

Petrovic, V, Vicente Haro Gonzalez, J, Jordá Ferrando, O, Delgado Gordillo, J, Ramón Blasco Puchades, J en Portolés Griñan, L (2011) “Additive layered manufacturing: sectors

of industrial application shown through case studies” *International Journal of Production Research*, 49, (4): 1061–1079.

Punjabi, SB, Das, T, Joshi, N, Mangalvedekar, H, Lande, B en Das, A (2010) “The effect of swirl velocity on ICP torch simulation” in: *Journal of Physics: Conference Series* vol. 208 1 IOP Publishing: p. 012055.

Skoog, DA, Holler, FJ en Crouch, SR (2017) *Principles of Instrumental Analysis*, Cengage learning.

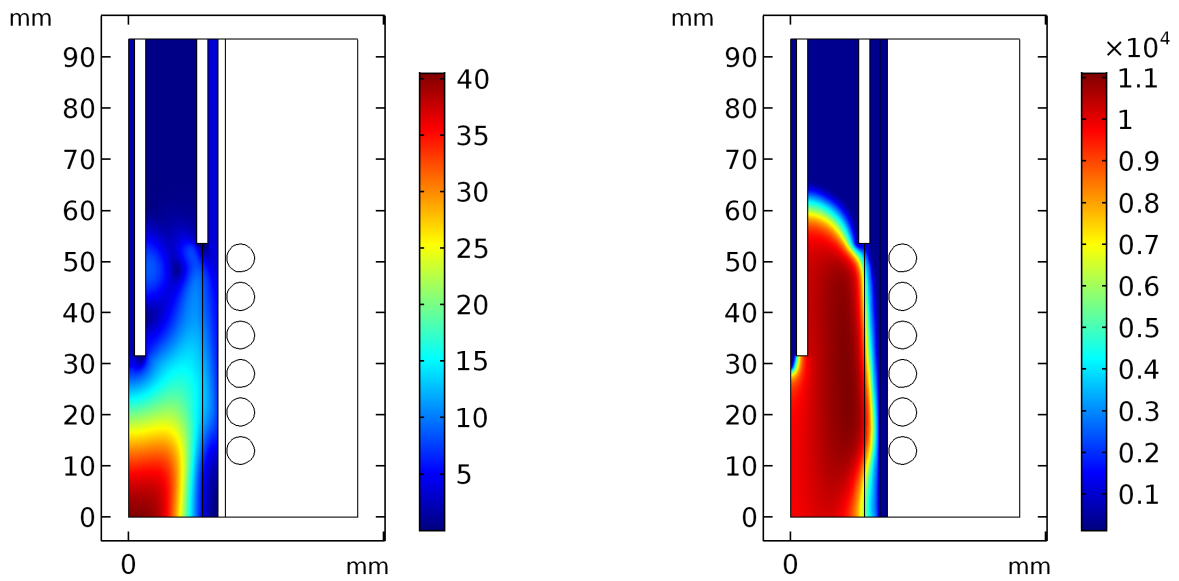
Tekna (2016) *SY163 15 kW Induction Plasma System Original Operating Manual*, Tekna Plasma Systems inc., Canada.

Wasserman, S (2016) *Choosing the Right Turbulence Model for Your CFD Simulation*
URL: <https://www.engineering.com/DesignSoftware/DesignSoftwareArticles/ArticleID/13743/Choosing-the-Right-Turbulence-Model-for-Your-CFD-Simulation.aspx> (visited on 08/23/2018).

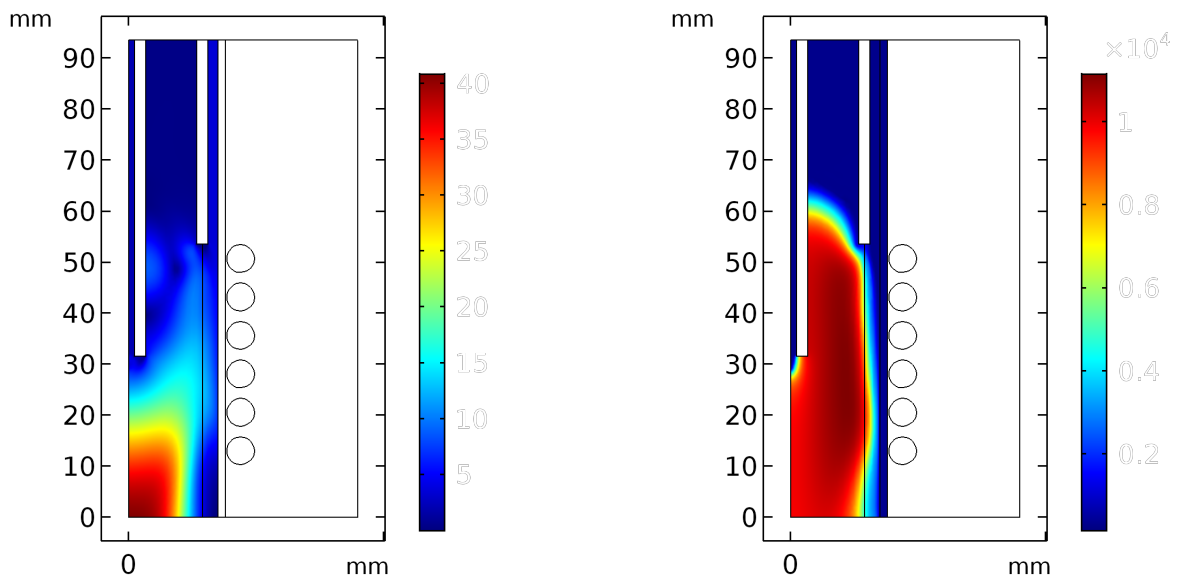
Xue, S, Proulx, P en Boulos, MI (2001) “Extended-field electromagnetic model for inductively coupled plasma” *Journal of Physics D: Applied Physics*, 34, (12): 1897.

Ye, R, Ishigaki, T en Boulos, M (2004) “Modeling of an induction plasma under transient turbulent flow conditions” *Journal of Applied Physics*, 96, (1): 118–126.

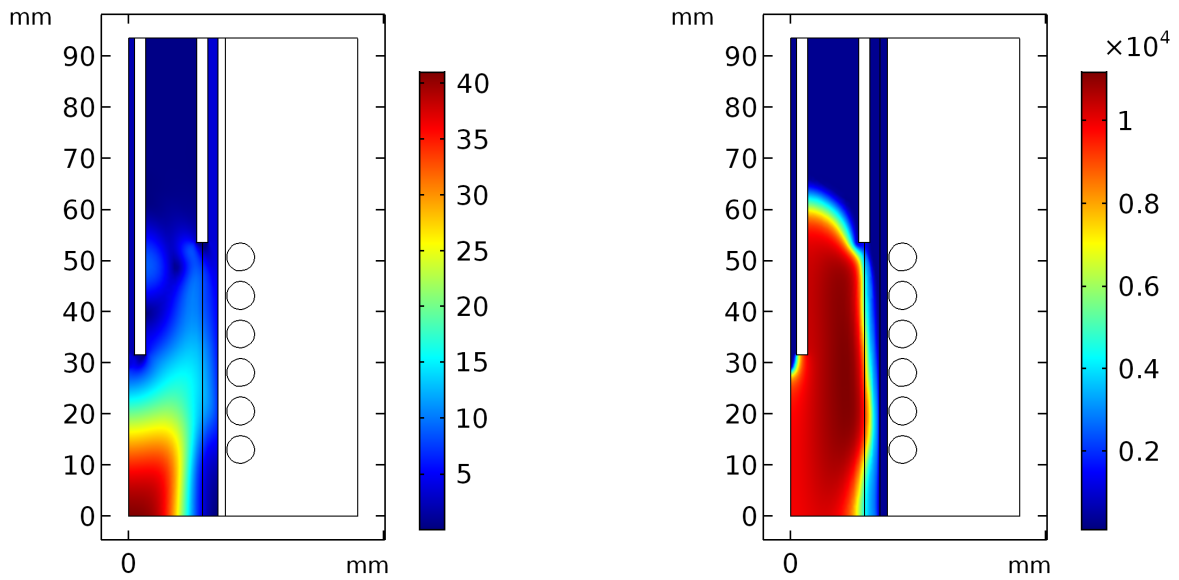
A Bylae



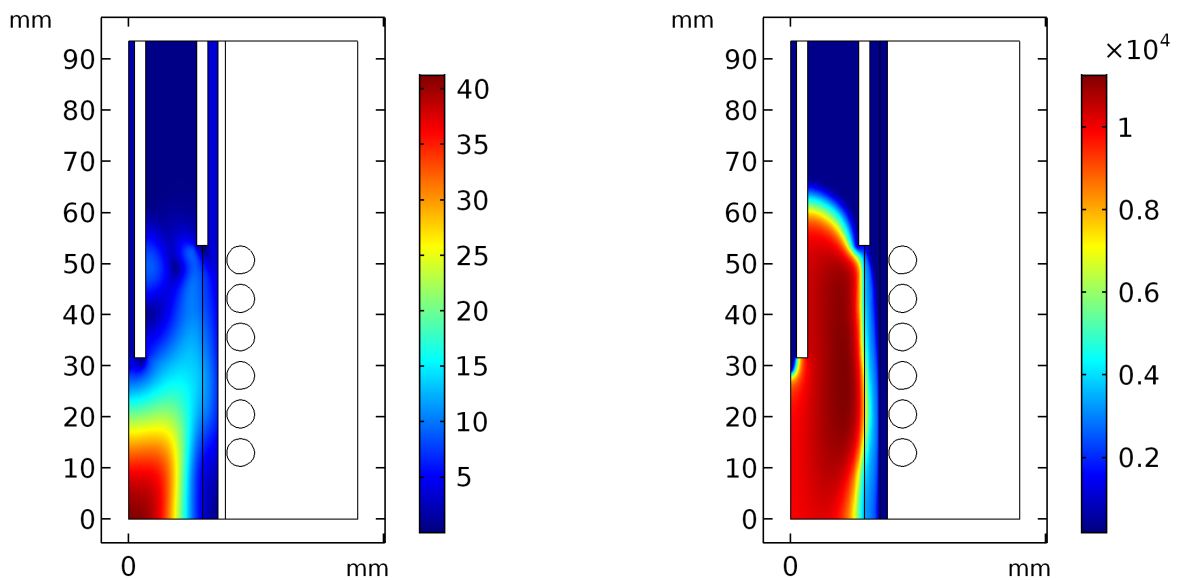
Figuur A.1: Vloeveld links, en temperatuurprofiel regs vir 1 % H₂ in die skermgas.



Figuur A.2: Vloeveld links en temperatuurprofiel regs vir 2 % H₂ in die skermgas.



Figuur A.3: Vloeiveld links en temperatuurprofiel regs vir 2.5 % H₂ in die skermgas.



Figuur A.4: Vloeiveld links en temperatuurprofiel regs vir 5 % H₂ in die skermgas.