

УДК 532.517; 519.6

Численное моделирование газовой динамики в горелке спектрометра с индуктивно-связанной плазмой

© 2026 г. А. С. Мельников, С. В. Бабина, А. Х. Гильмутдинов

Казанский национальный исследовательский технический университет имени А. Н. Туполева – КАИ, 420111, Россия

В работе представлена трехмерная численная модель газовой динамики в горелке индуктивно-связанной плазмы для спектральных исследований с использованием методов вычислительной гидродинамики в ANSYS Fluent. Нестационарные и турбулентные эффекты учитываются благодаря использованию гибридного подхода модели DES, а также полиэдрической сетки, оптимизированной по параметру y^+ . Исследована структура газовых потоков при различных режимах подачи аргона в горелке. Использование трехмерной модели двухфазного течения позволило учесть пространственную асимметрию вихревых структур и вращательный характер подачи газа. Результаты моделирования показали, что тангенциальная подача защитного и плазмообразующего газов приводит к дестабилизации центральной струи транспортного газа и формированию вихревых зон, что согласуется с экспериментальными данными теневой визуализации. Модель демонстрирует точность в предсказании характерных эффектов газовой динамики и может быть использована в качестве основы для дальнейшего моделирования индуктивно-связанной плазмы с учетом электромагнетизма, а также для оптимизации режимов работы и конструкции горелки.

Ключевые слова: численное моделирование, газовая динамика, турбулентные течения, индуктивно-связанная плазма, оптическая эмиссионная спектрометрия, горелка Фассела.

Введение

В современных методах анализа химического состава ключевыми требованиями являются низкие пределы обнаружения и высокая воспроизводимость результатов, что обусловлено необходимостью обеспечения достоверности данных в условиях возрастающих требований к точности аналитических измерений. Методы спектрального анализа с индуктивно-связанной плазмой (ИСП), такие как масс-спектрометрия (МС) и оптическая эмиссионная спектрометрия (ОЭС), обладают высокой чувствительностью (до 0.1 нг/л для некоторых элементов) и широким динамическим диапазоном определения концентраций (от 0.1 до 10^6 мкг/л). Эти методы позволяют обнаруживать множество элементов, что делает их одними из самых точных и универсальных в аналитической химии [1].

Высокая точность и чувствительность методов ИСП-анализа напрямую зависят от характеристик и стабильности горения плазмы, которая, в свою очередь, определяется газовой динамикой в плазматроне. Характер течения газовых потоков влияет на формирование ИСП, распределение температуры, давления и скорости, что критично для эффективной ионизации образцов. Неправильное распределение газовых потоков может приводить к образованию вихрей и турбулентности, локальным перегревам или охлаждению, что снижает точность и может вызывать появление шумов в измеряемом сигнале.

✉ А.С. Мельников: ASMelnikov@kai.ru

Поступила в редакцию: 25.06.2025

После доработки: 03.11.2025

Принята к публикации: 11.11.2025

Кроме того, понимание структуры течений позволяет управлять параметрами плазмы, обеспечивать стабильность плазменного разряда, минимизировать потери энергии и оптимизировать расход газа.

Использование подходов математического моделирования позволяет исследовать эволюцию газовых потоков в динамике, предсказывать влияние изменения параметров потока на распределение концентрации исследуемых образцов, температуры и давления в системе, а также оптимизировать конструкцию прибора.

Применению ИСП-анализа и исследованию численными методами этих процессов уделяется значительное внимание авторов [2–7]. Так, в работе [2] рассмотрено влияние различных параметров на поведение газовых потоков (мощность, расходы газов, геометрические параметры прибора) в ИСП-МС. Обнаружено возникновение вихревых потоков в горелке и даны рекомендации по их устранению путем увеличения расхода транспортного газа. В работе [4] предложена конструкция горелки, обеспечивающая стабильность горения плазмы. Численное моделирование и эксперименты показали, что коническая форма позволяет снизить турбулентность газовых потоков по сравнению с цилиндрическими горелками.

В рассмотренных работах, посвященных исследованию газовой динамики в ИСП-МС, численные модели представлены, как правило, в 2D- или осесимметричной постановке.

Целью данной работы является разработка трехмерной численной модели газовой динамики в горелке ИСП и ее применение для исследования структуры течений и устойчивости газовых струй.

Основные уравнения

Моделирование газовых потоков в горелке основано на решении системы уравнений Навье – Стокса для несжимаемого турбулентного течения, включающей уравнение импульса:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{a}_F, \quad (1)$$

где \mathbf{u} – вектор скорости (м/с), p – давление (Па), ν – кинематическая вязкость (м²/с), \mathbf{a}_F – ускорение, обусловленное внешними силами (м/с²); и уравнение неразрывности:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2)$$

Приближение несжимаемой жидкости обосновано тем, что моделирование проводится для холодных газовых потоков, без воздействия электромагнитного поля, когда отсутствуют значительные перепады температуры и давления, ведущие к изменению плотности. Кроме того, число Маха для исследуемых потоков аргона в данной работе значительно меньше порогового значения $M = 0.3$ (скорости потоков не превышают 30 м/с), при котором влияние сжимаемости становится существенным [8].

Геометрия и расчетная сетка

В работе рассматривается геометрия классической горелки Фассела, представленной на рис. 1.

Расчетная область представляется в виде двух основных доменов: воздушного домена и домена горелки плазмотрона. Размеры доменов и их взаимное расположение представлены на рис. 2. Область, заполненная воздухом – основная рабочая область, в которой происходит эволюция газовых потоков, исследованию динамики которых и уделяется основное внимание в данной работе. Горелка индуктивно-связанной плазмы состоит из трех концентрических трубок, содержащих каналы для подачи транспортного (центральный канал), плазмообразующего или вспомогательного (средний канал) и защитного или охлаждающего (внешний канал) газов.

Для построения сетки в обоих доменах преимущественно использованы тетраэдрические элементы. Статистические и качественные характеристики по критерию максимального соотношения сторон ячеек приведены в табл. 1.

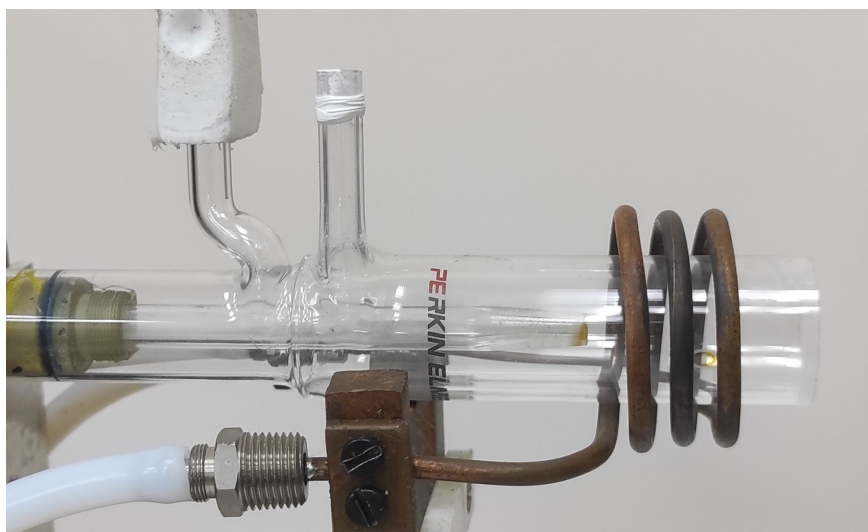


Рис. 1. Аналитическая ИСП-горелка

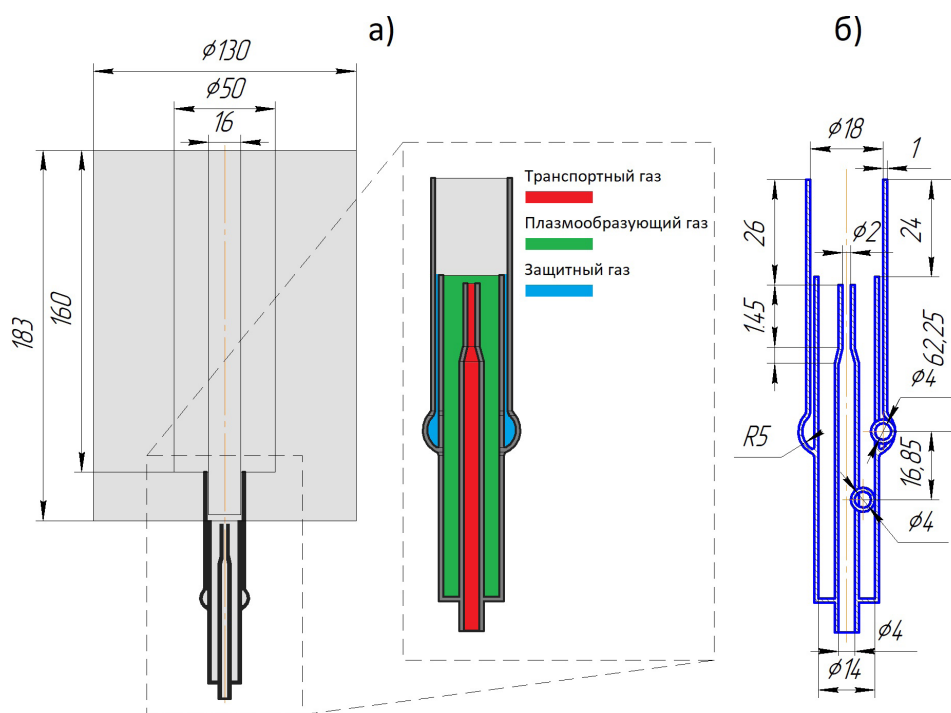


Рис. 2. Расчетная область: а) геометрия воздушного домена и взаимное расположение доменов, каналы для подачи газа в горелке; б) геометрия домена кварцевой горелки плазматрона

Таблица 1. Статистические и качественные характеристики по метрике «Aspect Ratio» расчетной сетки

Статистика расчетной сетки	Значение
Количество узлов	1 514 010
Количество элементов	3 518 802
Минимальный показатель	1.154
Максимальный показатель	14.651
Среднее значение	2.919
Стандартное отклонение	1.765

Основная часть воздушного домена имеет цилиндрическую форму и разделена на три области, что позволяет сохранить качество расчета в центральной части домена, где направление газового потока совпадает с геометрической осью горелки, и при этом обеспечить меньшие вычислительные затраты за счет увеличения размера сетки в областях, отдаленных от основных течений. Различные сечения воздушного домена представлены на рис. 3.

Сетка внешней и промежуточной (рис. 3, б–в) областей воздушного домена, представляющих собой цилиндрические тела, строится автоматически и имеет переменный размер, что дает возможность обеспечить плавный переход между расчетными областями и увеличить точность моделирования в центральной части.

Центральная область (рис. 3,г) представлена сеткой О-типа, состоящей из пяти частей, в поперечном сечении являющихся правильным четырехугольником со скругленными сторонами и четырьмя одинаковыми круговыми сегментами. Такой метод построения сетки позволяет повысить точность расчетов и снизить численную диффузию в области, где основное направление потока совпадает с осью симметрии. Для построения сетки в данной расчетной области использован метод «Sweep», который позволяет строить сетку на основе призматических элементов с помощью операции протягивания элементов одного слоя вдоль некоторой оси.

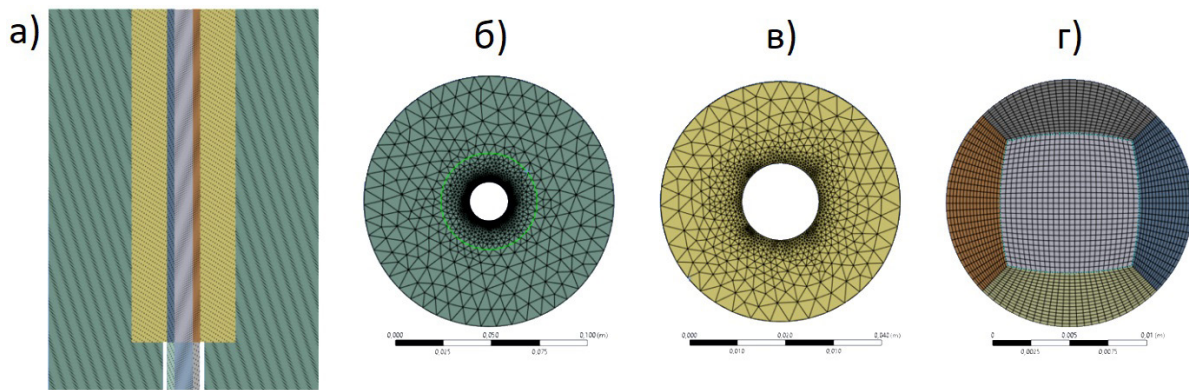


Рис. 3. Расчетные сетки воздушного домена: общий вид (а) и поперечные сечения внешней (б), промежуточной (в) и центральной (г) областей

Сама горелка плазмотрона, представленная внутренней полостью, которая ограничена кварцевыми стенками, в модели не указывается явно, поскольку в рамках исследования рассматривается лишь газодинамический аспект. Полость состоит из каналов, по которым в область индуктивно-связанной плазмы подаются транспортный, плазмообразующий и защитный газовые потоки в соответствии со схемой, приведенной на рис. 2. Отличительной особенностью расчетной сетки домена горелки является использование метода «Inflation», обеспечивающего локальное повышение разрешения сетки и со специальной структурой, оптимизированной для параметра y^+ . В рамках вычислительной задачи данный метод используется для моделирования пристеночных слоев, где скорость течения газа вблизи стенки значительно ниже, чем в основной части потока, тем самым обеспечивается условие стенки без проскальзывания. Такое граничное условие выбрано, поскольку давление в системе близко к атмосферному, а число Кнудсена $Kn < 0.001$ (при характерных размерах расчетной области порядка 1 мм), что позволяет рассматривать газ как сплошную среду.

Параметр y^+ представляет собой безразмерное расстояние от стенки до центра пристеночной ячейки расчетной сетки, значение которого является критическим для точного моделирования турбулентных течений и определяет насколько хорошо сетка разрешает область больших градиентов скорости вблизи стенки:

$$y^+ = \frac{y \cdot u_\tau}{\nu}, \quad (3)$$

где y – физическое расстояние от стенки до центра пристеночной ячейки расчетной сетки (м), u_{τ} – динамическая скорость (м/с) [10]. Для используемой гибридной модели турбулентности принято целевое значение $y^+ \approx 1$, что соответствует полному разрешению вязкого подслоя.

Высокое разрешение сетки на выходе горелки обеспечивает точное моделирование газовых потоков, в первую очередь, для корректного описания зон срыва потока и формирования вихревых структур, возникающих при взаимодействии тангенциальных и осевых струй газа. На рис. 4 приведен общий вид домена горелки с особенностями сетки.

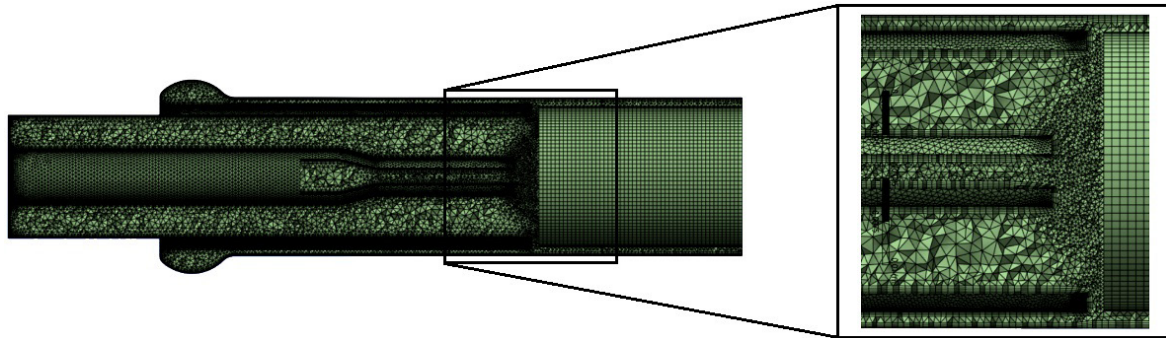


Рис. 4. Расчетная сетка домена горелки плазматрона

Поскольку качество сетки может повлиять на результаты моделирования, необходимо оценить показатели ее основных характеристик (табл. 2).

Таблица 2. Показатели качества сетки

Критерий качества	Предельное значение для предупреждения	Предельное значение для ошибки расчета	Худший показатель по сетке
Минимальное качество элементов	0.05	0.0005	0.118
Максимальное соотношение сторон	5	1000	14.651
Минимальная ортогональность	0.05	0.005	0.151
Максимальная скошенность	0.9	0.999	0.8489

На основании табл. 2, можно сделать вывод, что стандартные критерии качества сетки ANSYS Mesh для рассматриваемой в данной работе расчетной области могут считаться удовлетворительными.

Следующим шагом для решения задач газодинамики средствами ANSYS Fluent тетраэдрическая сетка расчетной области преобразована в сетку с многогранными ячейками (Polyhedral Mesh). Многогранные элементы обладают большей степенью свободы, что позволяет лучше аппроксимировать сложную геометрию и физические процессы, что особенно важно для моделей с криволинейными границами или сложной топологией потока. Такой тип сетки обеспечивают лучшее распределение потоков и масс внутри элемента, что позволяет снизить численную диффузию и улучшить разрешение мелких деталей потока [9], а главное уменьшить общее количество ячеек в расчетной сетке.

Параметры моделирования

Моделирование выполнялось в ANSYS Fluent 2023 R1 с использованием нестационарной постановки задачи. Для описания турбулентного течения применялась гибридная модель DES (Detached Eddy Simulation), сочетающая подходы RANS вблизи стенок и LES в основном потоке¹. Многофазная среда в воздушном домене моделировалась с использованием модели «Species». Через три входных канала подавался аргон с заданными массовыми расходами (табл. 3) при температуре 300 К. На выходе устанавливалось нулевое относительное давление. Все стенки считались адиабатическими с условием без проскальзывания.

¹ ANSYS Fluent User's Guide, Release 2023 R1. ANSYS, Inc., 2023.

Таблица 3. Параметры газовых потоков на входе в горелку

Газовый поток	Объемный расход аргона (л/мин)	Массовый расход аргона (кг/с)
Транспортный	1	$2.705 \cdot 10^{-5}$
Плазмообразующий	1	$2.705 \cdot 10^{-5}$
Защитный	15	$4.05 \cdot 10^{-4}$

Для решения связанных уравнений движения и энергии использовался алгоритм «Coupled» с шагом по времени $2.5 \cdot 10^{-4}$ с. На каждом временном шаге выполнялось 40 итераций, что обеспечивало значение невязок ниже 10^{-4} для всех уравнений. Аппроксимация конвективных членов выполнялась схемами второго порядка точности. Коэффициенты релаксации составили 1.0 для уравнений импульса и 0.8 для параметров турбулентности.

Результаты и выводы

Были проведены три вычислительных эксперимента, соответствующие различным режимам подачи холодного газа:

1. Активен только канал для транспортного газового потока (1 л/мин).
2. Активны каналы для транспортного и плазмообразующего газовых потоков (по 1 л/мин в каждом).
3. Активны все три канала (расходы в соответствии с табл. 3).

Качественное сопоставление с экспериментальными данными, представленное на рис. 5, показало хорошее соответствие. Сравнивались шпирен-изображения [10] с полем массовой доли аргона, построенным на осевом сечении установки. Для первого режима (рис. 5,а) моделирование воспроизвело характерную ламинарную струю аргона с минимальными возмущениями на всем протяжении исследуемой области. Во втором режиме (рис. 5,б) видна область дестабилизации струи на расстоянии около одного внешнего диаметра горелки от ее края. В третьей конфигурации (рис. 5,в) результаты продемонстрировали полное разрушение центральной струи на расстоянии примерно половины внешнего диаметра горелки от ее края и формирование развитой турбулентной структуры.

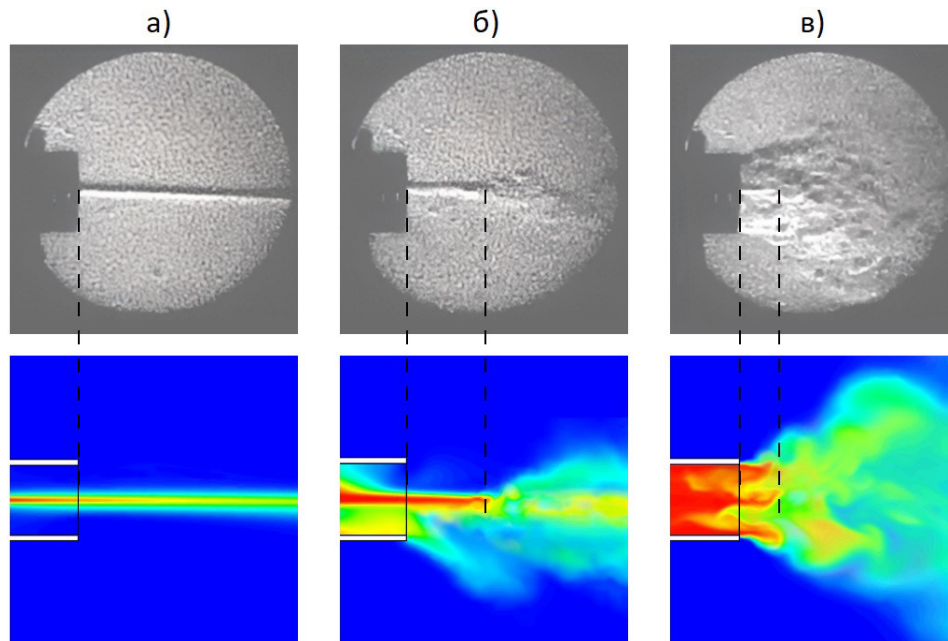


Рис. 5. Сравнение экспериментальных теневых изображений с результатами моделирования в различных режимах: а) активен канал для транспортного газового потока; б) активны каналы для транспортного и плазмообразующего газовых потоков; в) активны все три газовых потока. Штриховыми линиями показаны соответствия между краями горелки и областями дестабилизации ламинарной струи

Кроме того, модель воспроизводит формирование зоны с возвратными вихревыми течениями внутри горелки у ее выхода, что показано на рис. 6. Это явление объясняется эффектом Вентури [10], когда при взаимодействии центрального высокоскоростного потока с окружающим газом согласно закону Бернулли возникает локальное падение давления, что также подтверждают результаты численного моделирования (рис. 7).

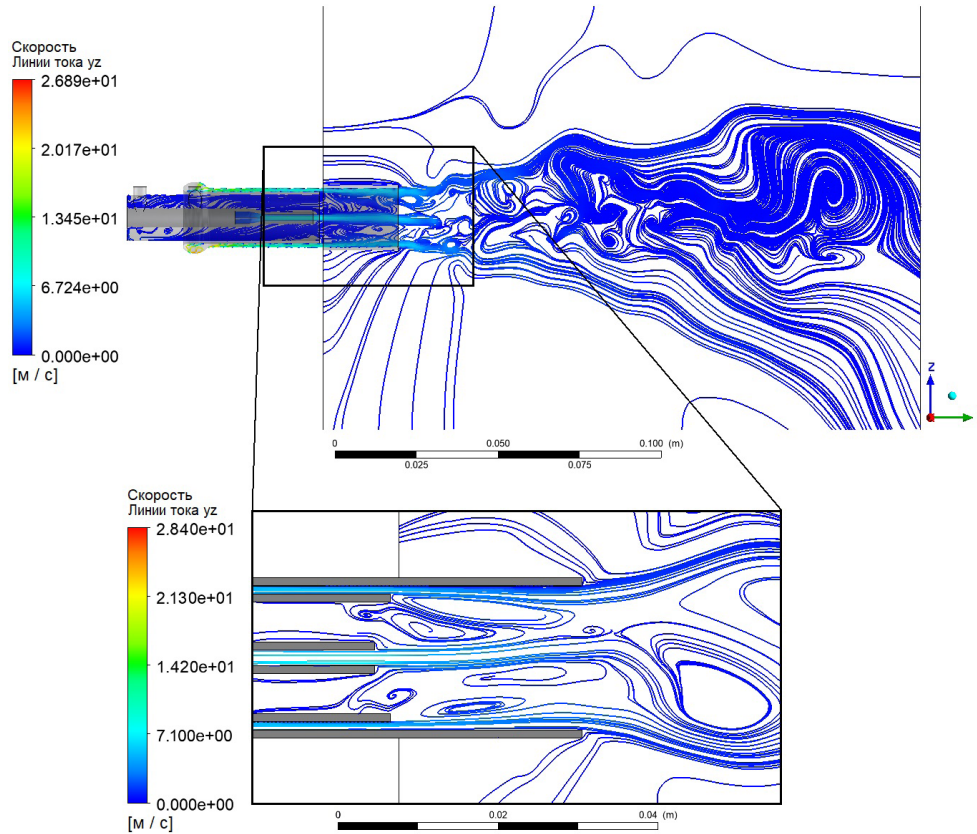


Рис. 6. Линии тока в осевом сечении, демонстрирующие турбулентный характер расширяющегося газового потока, а также возвратные вихри в области горелки

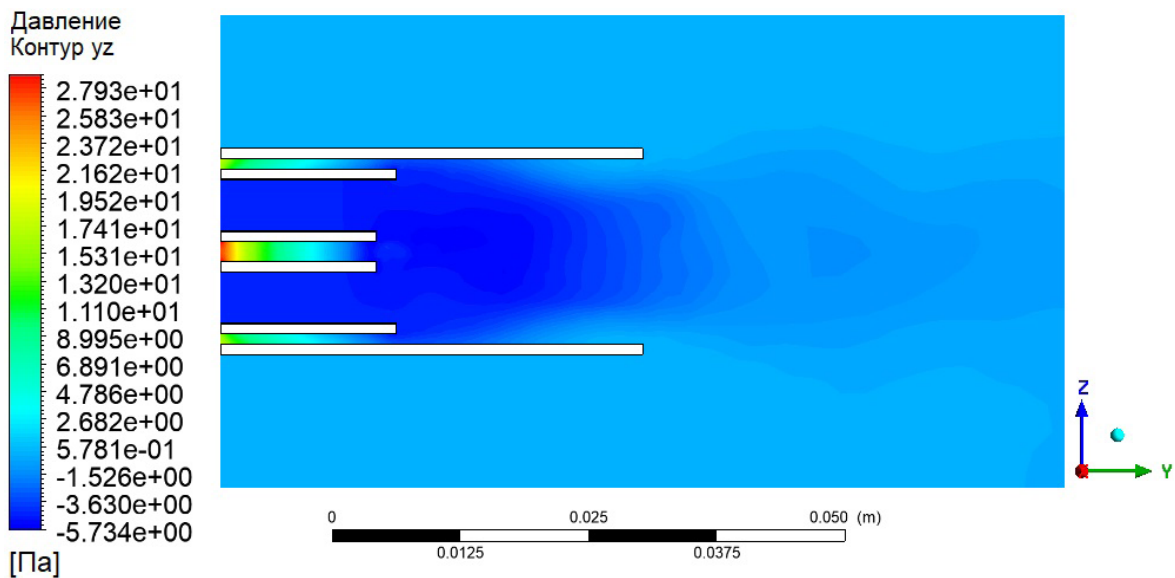


Рис. 7. Поле с изолиниями статического давления в осевом сечении установки при активных трех газовых потоках

Заключение

Представлена трехмерная численная модель газовой динамики в горелке спектрометра с индуктивно-связанной плазмой, описывающая структуру течений и турбулентные эффекты при различных режимах подачи аргона. Проведенные вычислительные эксперименты позволили:

- реализовать трехмерную нестационарную численную модель холодных газовых потоков в горелке Фассела с использованием гибридного подхода DES для моделирования турбулентности и многофазной модели «Species» в программном комплексе ANSYS Fluent;
- установить, что тангенциальный характер подачи защитного и плазмообразующего газов приводит к разрушению ламинарной струи транспортного газа и формированию вихревых структур;
- выявить формирование зоны возвратных вихревых течений в области выхода горелки, обусловленное локальным падением давления вследствие эффекта Вентури;
- провести экспериментальную валидацию модели, показавшую хорошее соответствие расчетных результатов данным теневой визуализации, включая характерные области дестабилизации потока и зоны возвратного течения.

Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными и могут быть использованы для оптимизации конструкции горелки и режимов подачи газов с целью повышения стабильности горения плазмы. Перспективным направлением дальнейших исследований является разработка комплексной модели, объединяющей газодинамические и электромагнитные процессы в индуктивно-связанной плазме.

Финансирование

Работа выполнена за счет предоставленного в 2024 году Академией наук Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и прикладных научных работ в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

Конфликт интересов

Конфликт интересов отсутствует.

Вклад авторов

А.С. Мельников – выбор методов исследования, разработка математической модели, проведение численных расчетов, подготовка текста статьи.

С.В. Бабина – обработка результатов, подготовка текста статьи, участие в проведении исследования и обсуждении результатов.

А.Х. Гильмутдинов – формулировка идеи и целей исследования, постановка задачи, участие в обсуждении результатов.

Список литературы

1. *Wilschefska S.C., Baxter M.R.* Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry: Introduction to Analytical Aspects // *The Clinical biochemist. Reviews*, 2019. V. 40. Iss. 3. P.115–133. DOI: 10.33176/AACB-19-00024.

2. *Aghaei M., Flamigni L., Lindner H., Günther D., Bogaerts A.* Occurrence of gas flow rotational motion inside the ICP torch: a computational and experimental study // *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 2014. V. 29. Iss. 2. P. 249–261. DOI: 10.1039/C3JA50302J.

3. *Bernardi D., Colombo V., Ghedini E., Mentrelli A.* Comparison of different techniques for the FLUENT-based treatment of the electromagnetic field in inductively coupled plasma torches // *The European Physical Journal D. Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2003. V. 27. Iss. 1. P. 55–72. DOI: 10.1140/epjd/e2003-00227-1.

4. *Alavi S., Mostaghimi J.* A Novel ICP Torch with Conical Geometry // *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 2019. V. 39. P. 359–376. DOI: org/10.1007/s11090-018-9948-5.

5. *Bai Y., Zuo Y., Li J., Liu H., Yuan H., Chen G.* Effect of water-cooling and sheath gas-cooling in a jet driven by RF-ICP studied by means of numerical simulation // *Diamond and Related Materials*, 2017. V. 73. P. 72–79. DOI: 10.1016/j.diamond.2016.12.012.

6. Voronov M., Hoffmann V., Buscher W., Engelhard C. Computational model of inductively coupled plasma sources in comparison to experimental data for different torch designs and plasma conditions. Part II: theoretical model // Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2017. V. 32. Iss. 1. P. 181–192. DOI: 10.1039/C6JA00192K.

7. Javid S.M., Alavi S., Guo X., Zabihisari A., Mostaghimi J. Torch Simulator: An analytical model for rapid prediction of inductively coupled plasma parameters // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2021. V. 180. P. 106182. DOI: 10.1016/j.sab.2021.106182.

8. Anderson J. D. Fundamentals of Aerodynamics. McGraw-Hill Education, 2017.

9. Sosnowski M., Krzywanski J., Gnatowska R. Polyhedral meshing as an innovative approach to computational domain discretization of a cyclone in a fluidized bed CLC unit // E3S Web of Conferences, 2017. V. 14. P. 01027. DOI: 10.1051/e3sconf/20171401027.

10. Нагулин К.Ю. Теневая визуализация газовых и плазменных потоков в горелке индуктивно-связанной плазмы оптического эмиссионного спектрометра // Инженерный вестник Дона, 2016. № 2(41). С. 23.

Vestnik Natsional'nogo Issledovatel'skogo Yadernogo Universiteta «MIFI», 2026, vol. 15, no. 1, pp. 3–12

Numerical simulation of gas dynamics in an inductively coupled plasma spectrometer torch

A. S. Melnikov[✉], S. V. Babina, A. Kh. Gilmutdinov

Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev – KAI, 420111, Russia

[✉] ASMelnikov@kai.ru

Received June 25, 2025; revised November 3, 2025; accepted November 11, 2025

The study presents a three-dimensional numerical model of gas dynamics in an inductively coupled plasma torch for spectral analysis using computational fluid dynamics methods in ANSYS Fluent. Transient and turbulent effects are accounted for through a hybrid DES model approach and a polyhedral mesh optimized for y^+ parameter. The study investigates gas flow patterns under different argon supply regimes in the torch. The three-dimensional multiphase flow model enabled consideration of spatial asymmetry in vortex structures and the rotational gas injection. Simulation results demonstrate that tangential injection of both plasma and sheath gases destabilizes the central carrier gas jet and promotes vortex formation, which agrees with experimental shadow visualization data. The model shows accurate prediction of characteristic gas dynamics effects and can serve as a basis for further inductively coupled plasma modeling incorporating electromagnetic phenomena, as well as for optimizing torch operating parameters and design.

Keywords: numerical simulation, gas dynamics, turbulent flow, inductively coupled plasma, optical emission spectrometry, Fassel torch.

References

1. Wilschefska S.C., Baxter M.R. Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry: Introduction to Analytical Aspects. The Clinical biochemist. Reviews, 2019. Vol. 40. Iss. 3. Pp. 115–133. DOI: 10.33176/AACB-19-00024.

2. Aghaei M., Flamigni L., Lindner H., Günther D., Bogaerts A. Occurrence of gas flow rotational motion inside the ICP torch: a computational and experimental study. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2014. Vol. 29. Iss. 2. Pp. 249–261. DOI: 10.1039/C3JA50302J.

3. Bernardi D., Colombo V., Ghedini E., Mentrelli A. Comparison of different techniques for the FLUENT-based treatment of the electromagnetic field in inductively coupled plasma torches // The European Physical Journal D. Atomic, Molecular and Optical Physics, 2003. Vol. 27. Iss. 1. Pp. 55–72. DOI: 10.1140/epjd/e2003-00227-1.

4. *Alavi S., Mostaghimi J.* A Novel ICP Torch with Conical Geometry. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 2019. Vol. 39. Pp. 359–376. DOI: org/10.1007/s11090-018-9948-5.
5. *Bai Y., Zuo Y., Li J., Liu H., Yuan H., Chen G.* Effect of water-cooling and sheath gas-cooling in a jet driven by RF-ICP studied by means of numerical simulation. *Diamond and Related Materials*, 2017. Vol. 73. Pp. 72–79. DOI: 10.1016/j.diamond.2016.12.012.
6. *Voronov M., Hoffmann V., Buscher W., Engelhard C.* Computational model of inductively coupled plasma sources in comparison to experimental data for different torch designs and plasma conditions. Part II: theoretical model // *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 2017. Vol. 32. Iss. 1. Pp. 181–192. DOI: 10.1039/C6JA00192K.
7. *Javid S.M., Alavi S., Guo X., Zabihhesari A., Mostaghimi J.* Torch Simulator: An analytical model for rapid prediction of inductively coupled plasma parameters. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 2021. Vol. 180. Pp. 106182. DOI: 10.1016/j.sab.2021.106182.
8. *Anderson J.D.* *Fundamentals of Aerodynamics*. McGraw-Hill Education, 2017.
9. *Sosnowski M., Krzywanski J., Gnatowska R.* Polyhedral meshing as an innovative approach to computational domain discretization of a cyclone in a fluidized bed CLC unit. *E3S Web of Conferences*, 2017. Vol. 14. Pp. 01027. DOI: 10.1051/e3sconf/20171401027.
10. *Nagulin K.Yu.* Tenevaya vizualizaciya gazovyh i plazmennyh potokov v gorelke induktivno-svyazannoj plazmy opticheskogo emissionnogo spektrometra [Shadow visualization of gas and plasma flows in the torch of an inductively coupled plasma optical emission spectrometer]. *Inženernyj vestnik Dona*, 2016. No. 2(41). Pp. 23 (in Russian).