

文章编号: 1001-4322(2005)04-0481-04

# CO L 亚声速段横向喷流混合流场数值分析\*

胡宗民, 孙英英, 吴宝根, 姜宗林

(中国科学院 力学研究所 高温气体动力学重点实验室, 北京 100080)

**摘 要:** CO L 是一个气体动力学、化学反应动力学以及光学相互耦合的复杂过程。作为高总压 CO L 系统研究的第一步, 利用三维 CFD 技术对传统的 CO L 亚声速段横向射流混合过程进行了数值分析, 讨论了包括压力梯度驱动项的分子扩散机制, 得到了横向射流的较精细的结构, 如马蹄形射流界面、逆旋涡对以及射流剪切层。结果表明, 压力梯度驱动项对重、轻组分的扩散作用相反, 重组分沿压力梯度正向扩散, 轻组分逆压力梯度方向扩散。在射流穿透不足的情况下, 仍然在喷管出口得到了约为  $0.01 \text{ cm}^{-1}$  的小信号增益系数。

**关键词:** CO L 流场; 混合; 反应; 数值分析; 三维计算流体力学

**中图分类号:** O354.3 **文献标识码:** A

化学氧碘激光 CO L 利用亚稳态的单重态氧  $\text{O}_2(^1)$  与基态碘原子之间的近共振传能过程产生激发态碘原子  $\text{I}^*$  作为增益介质,  $\text{I}^*$  受激辐射产生  $\lambda = 1.315 \mu\text{m}$  的近红外激光束。CO L 是一个气体动力学、化学反应动力学以及光学相互耦合的复杂过程, 在 CO L 的发展进程中, 关于其化学效率、光学特性等方面已经进行了广泛细致的研究, 但是针对 CO L 系统的压力恢复性能的研究还非常有限<sup>[1]</sup>, 其主要性能指标仍有改进的空间<sup>[2]</sup>。由于实际应用中经济性和机动性的要求, 高总压激光系统已经成为 CO L 研究的重要内容之一。

由于较高的压力会引起单重态氧发生器性能和光束质量降低, 因此提高总压只有通过提高副流总压以及系统的流动马赫数来实现, 总压与腔压关系见式 (1)。目前主要有二流混合<sup>[1,3]</sup>和三流混合<sup>[4,5]</sup>方案, 这两类方案都不再应用亚声速区域横向射流技术而改为超声速区域平行射流混合。

$$p_0 = p_{\text{cav}} [1 + M a^2 (\gamma - 1) / 2]^{(\gamma - 1)} \quad (1)$$

超声速混合技术不仅使单重态氧发生系统和碘蒸气供给系统得以解耦, 大大减轻了水蒸汽对增益介质  $\text{I}^*$  的去活效应, 还可以得到更为合理的增益介质分布, 使得腔镜负载分布更为均匀<sup>[6]</sup>。但是, 在另一方面, 超声速流使混合层趋于稳定, 使可能产生的大涡结构受到抑制, 有效混合时间缩短, 混合效率降低<sup>[7]</sup>, 而且超声速流中固有的激波间断等流场结构以及射流的非定常特性<sup>[8]</sup>可能对 CO L 产生负面影响。超声速混合技术的作用是两方面的, 这也是值得做进一步研究的原因。

在 CO L 的发展过程中, 数值分析对混合喷管构形优化、混合特性分析以及理解其根本的物理化学机制起到了重要的作用。本文针对高总压 CO L 系统混合喷管亚声速段横向喷流混合过程和基本流场特性进行了数值分析, 并希望进一步探讨超声速混和的增混机制, 提高系统的混合效率和压力恢复性能。

## 1 问题描述

以 RADICL 狭缝喷管为研究对象, 以 He 为载气的主流进入喷管亚声速段, 其中单重态氧产率为 41%, 副流的碘蒸气以 He 为载气, 以声速横向喷入喷管亚声速区, 主流和副流在此进行初步混合, 并迅速进入喷管超声速区膨胀并加速到超声速。通过超声速膨胀过程, 腔内介质温度降低, 从而降低实现粒子数反转的单重态氧阈值, 同时使腔压不至于过高 (见式 1), 这都有利于增益介质的形成和光束质量的改善。

## 2 数值模型

直角坐标系下三维可压缩多组分层流 N-S 方程可以写为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} = \frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} + \frac{\partial H_v}{\partial z} + S_{\text{chem}} \quad (2)$$

式中考虑了组分扩散效应和基元化学反应, 式中各矩阵不再展开。对流项和扩散项分别应用 DCD 格式<sup>[9,10]</sup>和二

\* 收稿日期: 2004-10-09; 修订日期: 2004-12-27

基金项目: 国家 863 计划项目与大连化学物理研究所基金联合资助课题

作者简介: 胡宗民 (1970—), 男, 籍贯山东, 博士研究生, 方向为化学反应流数值研究; E-mail: bighum in@126.com

阶中心差分格式离散,采用 DCD 格式计算多组分对流通量的公式详见文献 [11],时间方向为显式推进,其中组分热力学参数由多项式拟合,在输运参数中组分的粘性系数以及热导率也由多项式拟合,而等效扩散通量的计算中组分扩散系数则通过分子动力学得出,组分生成率通过基元反应模型来求得,化学反应模型考虑 10 种组分 21 个反应。

对于多组分混合体系,某一组分的扩散速度不仅取决于该组分的浓度梯度 (Fick 扩散模型),而且还受其它组分浓度梯度的影响 (二元扩散模型)。等效扩散模型包括浓度梯度贡献项  $G$  和压力梯度贡献项  $G_{pi}$  两部分,见式 (3) 和 (4)。组分扩散通量为

$$v_i = - \left[ G_i - \sum_{j=1}^{ns} G_j \right] - \left[ G_{pi} - \sum_{j=1}^{ns} G_{pj} \right] \quad (3)$$

$$G_i = M_i D_i \nabla c_i; \quad G_{pi} = M_i D_i (c_i - c_i^0) \nabla p/p \quad (4)$$

式中:  $c_i$  为混合物摩尔浓度;  $M_i, c_i, D_i$  分别为组分  $i$  的摩尔质量、摩尔分数和平均扩散系数,  $D_i$  根据组分  $i$  与  $j$  二元扩散系数  $D_{ij}$  与混合物构成求得。由式 (4) 可以看出,压力扩散项的作用是使混合物体系中摩尔质量相对较小 (“轻”) 的组分沿压力梯度逆向扩散,而摩尔质量相对较大 (“重”) 的组分沿压力梯度方向扩散。在 CO<sub>2</sub> 低压流场环境中,准确描述组分的分子扩散效应是很重要的 [7]。

### 3 计算结果与分析

计算区域为 RADICAL 狭缝喷管的半个喷孔单元,在每个喷孔单元内采用传统的一大孔二小孔组合的横向射流混合方案,主流方向上只截取 60 mm,即计算域只到光腔前缘,其它尺寸同文献 [7]。副流为  $I_2$ /He 混合物,物质的量比为 1:118,以声速横向喷入,  $p_{s0} = 16.1$  kPa,  $T_{s0} = 415$  K。主流  $O_2(^3\Sigma^-_g)/O_2(^1\Sigma^+_g)/He/Cl_2/H_2O$  分别为基态氧、单重态氧等混合物,物质的量比为 1:0.692:0.160:0.242:5.773,亚音速入流,  $p_{p0} = 9.9$  kPa,  $T_{p0} = 315$  K。边界条件为:沿喷管壁面设为无滑移恒温固壁条件,  $y$  向中心面以及  $z$  向边界设为对称边界条件,  $x$  向为亚音速入口条件,保持总压和总温恒定,  $x$  方向出口为简单的超声速外推出口条件。网格总数为  $x(i) \times y(j) \times z(k) = 500 \times 70 \times 30$ ,格点沿坐标轴正方向由小到大编号。喉道在  $x = 1.888$  cm 处,大孔射流位置  $x = 0.7278$  cm,  $z = 0$ ,小孔射流位置  $x = 1.0296$  cm,  $z = 0.054$  cm。

图 1 给出了射流喷口附近  $I_2$  密度等值面分布,主流方向从右向左 (即指向  $x$  轴正方向),其中图 1(a) 为无量纲密度等值面。可以看出:横向射流形成的马蹄型结构,这是粘性剪切应力作用的结果,副流介质受剪应力作用并被带向下游,由于背风效应,射流边界向  $x-y$  平面卷曲,形成逆旋涡对。这种马蹄型结构增大了主流与副流介质接触面,增大了组分的浓度梯度,有利于组分的扩散混合,可以加速化学反应进程和增益介质的形成。同时,小孔射流结构可以填充大孔射流所不能到达的空间区域,这种双排孔射流混合方式要比单排孔射流方式好得多。图 1(b) 是  $I_2$  密度分布沿  $x$  向不同位置 (上半部分) 和沿大孔  $z$  向对称面 (下半部分) 的剖面图,三孔横向射流形成的马蹄型结构清晰可见,大孔射流向背风方向卷起,后排小孔射流在前排大孔射流结构的背风区域受涡旋的作用而向纵深处发展,并迅速融合。由于压力不匹配,射流为欠膨胀状态,Shock-cell 结构在图 1(b) 中清晰可见。大小孔横向射流在将要转为平行于主流之前相互融合为一体,主、副流介质通过喷管喉道

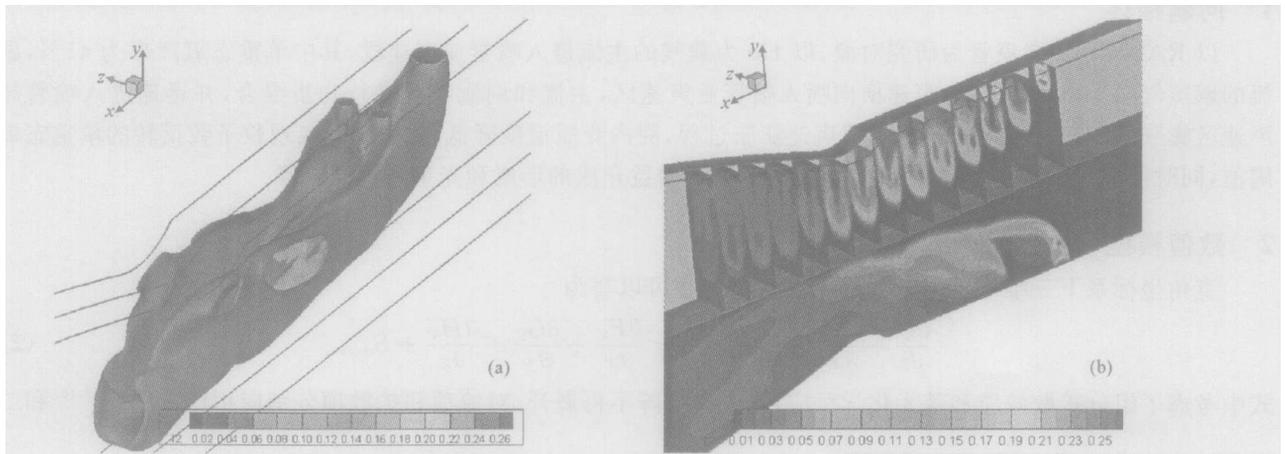


Fig 1 Distribution of  $I_2$  density near the injection region

图 1 射流附近区域内  $I_2$  密度分布

进入超声速段进行膨胀降温,为进一步的泵浦和光提取反应提供较为均匀的低温流场环境。

图 2 给出 I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 无量纲密度沿网格线 j=10, k=1 的分布,其中虚线表示没有考虑组分扩散效应,点划线则表示考虑了组分浓度梯度驱动的扩散效应,而实线表示同时考虑了组分浓度梯度驱动和压力梯度驱动的扩散效应。由图 2 可以看出,在喷管喉道上游为射流与主流的相互作用区,流场结构复杂,但在喉道下游区域,混合过程基本完成, I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 组分分布趋于平稳。如虚线所示,在没有考虑组分扩散效应时,在喉道下游 I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 分布呈波状,这是由于主、副流之间的波状混合界面引起的;考虑分子扩散效应后,如点划线和实线所示,波状分布结构被拉平, I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 分布沿 x 向更趋均匀。

在图 3 中分别给出了喉道下游不同位置处在 z 对称面上的 I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 无量纲密度以及压力沿 y 向分布,可以看出离开喉道越远 I<sub>2</sub> 在 y 向分布越均匀。同时该图也显示出,由于射流穿透力不足,在对称面附近 I<sub>2</sub> 分布偏低。在图 3 中,点划线和粗实线的间距与该处的压力梯度成正比,这是压力扩散项的作用。对比 I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 曲线还可以看出,引入压力扩散项之后,它们的变化趋势恰好相反,这印证了压力梯度驱动的扩散机制分别对“重”和“轻”组分的扩散作用的不同之处。由图 2 和图 3 的分析可以看出,在 CO<sub>2</sub> 混合过程的数值模拟中,由于各反应组分的分子量相差悬殊,而且在射流附近的压力场也不均匀,需要考虑压力驱动的扩散项。

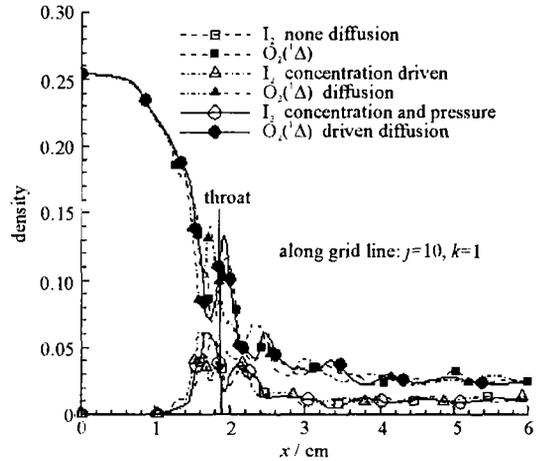


Fig 2 Distribution of I<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) along x-grid lines in the z-symmetric plane

图 2 z 对称面上 I<sub>2</sub> 和 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 无量纲密度沿 x 向分布

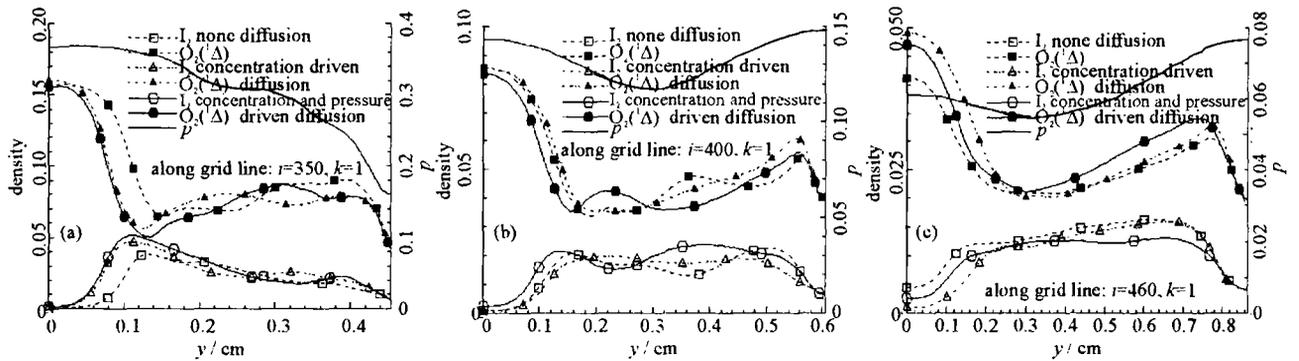


Fig 3 Distribution of I<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) and pressure along y-grid lines in the z-symmetric plane

图 3 z 对称面上 I<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 无量纲密度和压力沿 y 向分布

以上探讨了流场基本结构和混合特性,印证压力扩散模型的作用机制,下面则着重分析化学反应产物分布和小信号增益分布。图 4 给出了 I<sup>+</sup> 和 I 密度以及小信号增益系数 g (单位 cm<sup>-1</sup>) 分布,可以看出在混合喷管内得到了正增益,而且增益沿 y 向较为均匀,见图 4(a)。但由于氧碘扩散混合、I<sub>2</sub> 分解以及氧碘泵浦反应的弛豫效应,增益沿 x 向逐渐增大,见图 4(b)。在喷管出口附近得到的小信号增益系数接近 0.01 cm<sup>-1</sup>。由于射流穿透力不足和边界层效应,在喷管对称面和管壁附近增益偏低,而在这些区域增益介质的存在也体现了分子扩散效应。从图 4(a) 和 (c) 可以看出, I<sub>2</sub> 利用率只有约 45%,而单重态氧 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 产率由入口处的 41% 降为最小约 36.5%,而且其分布也不均匀。由于边界层效应,在靠近上壁面区域 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>) 的利用率更低,混合效率有待于增强。当然,本文的计算区域只有 60 mm,混合流场并没有得到充分发展也是影响因素之一。

### 4 问题与讨论

本文对 CO<sub>2</sub> 亚声速段横向喷流混合过程进行了数值分析,给出了 RADICAL 狭缝喷管内流场的初步结果,分析了 CO<sub>2</sub> 横向射流与混合过程的流场特征,如横向射流形成马蹄型结构以及射流界面的逆旋涡对,同时也分析了压力驱动的扩散机制。计算结果显示,在所用的计算区域内,主流和副流混合并不理想,因此需要采用增混措施。关于超声速段喷流混合以及混合增强研究将是下一步的工作重点。

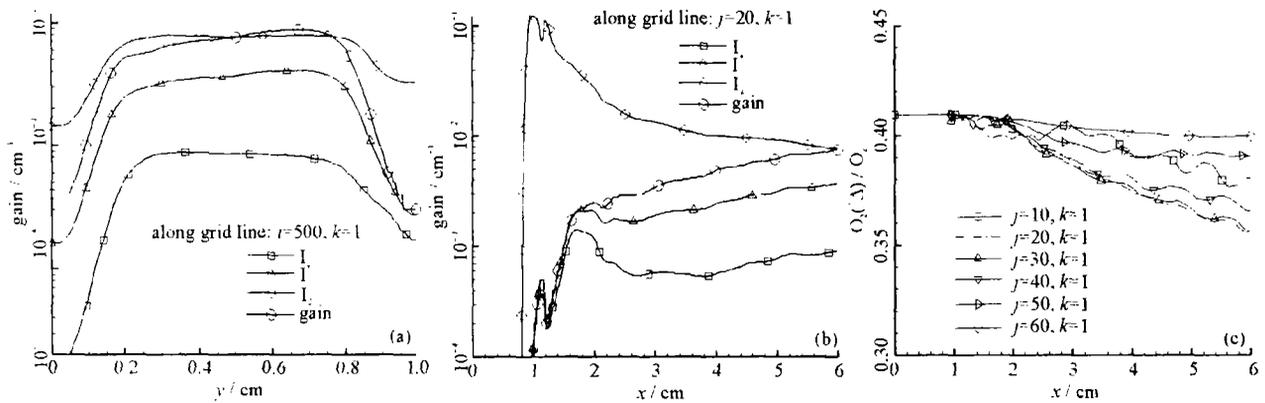


Fig 4 Distribution of  $I, I^*, I_2, g$  and  $O_2(1)$  yield along grid lines in the  $z$ -symmetric plane

图 4  $z$ 对称面上  $I, I^*, I_2$  无量纲密度, 增益系数  $g$  和  $O_2(1)$  产率沿网格线的分布

### 参考文献:

- [1] Yang T T, Dickerson R A, Moon L F, et al Advanced mixing nozzle concepts for CO L [A]. Proc of SPIE[C]. 2000, **3931**: 116—130.
- [2] Bohn W L. International CO L technology survey[A]. Proc of SPIE[C]. 2003, **5120**: 301—307.
- [3] Yang T T, Dickerson R A, Moon L F, et al High Mach number, high pressure recovery CO L nozzle aerodynamic experiments[R]. AIAA Paper, 2000-2425.
- [4] Hager G D, Nikolaev V D, Svistun M I, et al Lasing performance of a chemical oxygen iodine laser (CO L) with advanced ejector-nozzle banks[J]. Appl Phys A, 2003, **77**: 325—329.
- [5] Nikolaev V D, Zagidullin M V, Madden T J, et al An efficient supersonic CO L with more than 200 torr of total pressure in the active medium [R]. AIAA Paper, 2000-2427.
- [6] Madden T J, Hager G D, Lampson A I, et al A comparison of subsonic and supersonic mixing mechanism for the chemical oxygen-iodine laser (CO L) using computational fluid dynamics(CFD) simulation[A]. Proc of SPIE[C]. 1999, **3612**: 135—146.
- [7] Madden T J, Carroll D L, Solomon W C. Detailed mixing in CO L devices[R]. AIAA Paper, 94-2432.
- [8] Madden T J. Aspects of 3-D chemical oxygen-iodine laser simulation[A]. Proc of SPIE[C]. 2003, **5120**: 363—375.
- [9] Jiang Z L, Takayama K, Chen Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications[J]. Comp Fluid Dynamics Journal, 1995, **4**: 137—150.
- [10] Jiang Z L. On dispersion-controlled principles for non-oscillatory shock-capturing schemes[J]. Acta Mechanica Sinica, 2004, **20**(1): 1.
- [11] 胡宗民, 高云亮, 张德良, 等. 爆轰波在楔面上反射数值模拟 [J]. 力学学报, 2004, **36**(4): 385—392. (Hu Z M, Gao Y L, Zhang D L, et al Numerical simulation of gaseous detonation reflection over wedges with a detailed chemical reaction model Acta Mechanica Sinica, 2004, **36**(4): 385—392.)

## Numerical simulation on the flow field of CO L mixing nozzle with injection from subsonic region

HU Zong-min, SUN Ying-ying, WU Bao-gen, JIANG Zong-lin

(Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics,

Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract:** Three-dimensional CFD technology was used to simulate the flow field of CO L mixing nozzle. Concentration-driven as well as pressure-driven diffusion terms were considered in the diffusion equations. The 10 species and 21 reactions chemical model was applied to implement the chemical kinetics. Some elementary fluid dynamic phenomena of a round transverse jet were obtained such as the horse-shoe-shaped jet trajectory and the counter-rotating vortex pairs. The results indicate that the pressure-driven diffusion term has contrary effects on species of different molar weight, the molecular of "heavier" species diffuses toward the pressure gradients and that of "lighter" species against the pressure gradients. It was also found that even complete jet penetration was not achieved, the gain field of  $0.01 \text{ cm}^{-1}$  was obtained near the outlet of the mixing nozzle.

**Key words:** CO L flow-field; Mixing; Reaction; Numerical simulation; Three-dimensional computational fluid dynamics (CFD)