

[文章编号] 1001-246X(2009)04-0541-07

流量对比对 Coil 增益分布影响的数值研究

吕俊明, 王 春, 姜宗林

(LHD, 中国科学院力学研究所, 北京 100080)

[摘 要] 利用三维 CFD 技术, 通过求解层流 Navier-Stokes 方程与组分输运方程, 对简化后的化学氧碘激光 RADICL 模型进行数值模拟与分析, 结合 10 种组分和 21 个基元反应的化学反应模型, 对 COIL 亚声速段横向射流情况下, 不同的主副流流量对比对化学氧碘激光器性能的影响进行分析与比较. 结果证明, 过高或过低的碘分子浓度状态均不利于合理、可观的小信号增益系数产生. 存在一个最佳流量配比范围, 与之对应的工作状态下, COIL 的小信号增益系数会得到显著提高.

[关键词] COIL; 横向射流; 流量配比; 增益系数

[中图分类号] TN248.2 [文献标识码] A

0 引言

化学氧碘激光 COIL (Chemical Oxygen Iodine Laser) 利用亚稳态的单重态氧 $O_2(^1)$ 与基态碘原子之间的近共振传能过程产生激发态碘原子 I^* 作为增益介质 ($O_2(^1) + I \rightarrow I^* + O_2(^3)$), I^* 受激辐射产生近红外激光束 ($I^* + h\nu \rightarrow I + 2h\nu$). 其首先由美国空军武器实验室在 1977 年研制成功^[1], 是第一个应用电子跃迁而不是转动或振动跃迁来运转的化学激光器. COIL 产生的激光波长 $\lambda = 1.315 \mu\text{m}$, 适用于光纤传输与远距离传输, 加上高功率以及高效率的特点使其在军事与工业上具有广泛的应用前景.

目前常用的方案是超声速化学氧碘激光, 它通过超声速膨胀过程降低腔内介质温度, 从而降低单重态氧阈值以实现粒子数反转, 同时使腔压维持在低水平. 而超声速 COIL 中的超声速混合问题, 以及化学反应对气动以及光学过程的影响都为 COIL 的实现和效率提高带来挑战. 文[2-4]采用二维薄剪切层法和三维 N-S 方程对此进行了研究. 国内对 COIL 的数值模拟工作开展不多^[5-8], 而且只在近期开始涉及带有化学反应的复杂模型的三维计算.

文[9]在理论分析以及实验的基础上得出单位碘分子在混合喷管中大约需要消耗 4.2 ± 0.4 单位的单重态氧分子, 且在碘分子浓度较低的情况下耗氧会有所升高. 而以往的数值模拟与实验研究大多选取了低碘分子浓度, 即单重态氧与碘的流量比例维持在高水平. 在这种低碘分子浓度条件下, 单重态氧的利用率会降低, 加之去活反应与碘原子的快速复合, 化学效率会降低. 而在高碘分子浓度条件下, 单重态氧的不足会使碘的分解不完全, 并无法提供充足的载能介质参与泵浦反应, 导致性能下降. 所以对于 COIL, 流量配比问题值得关心与研究. 文[10]针对此问题进行了初步的实验研究与简单理论分析, 本文针对完整的混合喷管以及谐振腔模型, 采用三维 N-S 方程, 基元化学反应模型及二元等效扩散模型对此问题进行细致的数值模拟与分析. 在 COIL 亚声速段横向射流并且穿透深度合理的条件下, 分析比较不同的主副流流量配比条件对化学氧碘激光性能的影响, 尤其是对小信号增益系数分布的影响, 对提高 COIL 工作效率以及确定合理的流量配比都有很重要的意义.

1 物理模型与计算方法

1.1 物理模型

物理模型参考 RADICL (Research Assessment Device Improvement Chemical Laser) 狭缝喷管(图 1), 模型尺寸

[收稿日期] 2008-03-05; [修回日期] 2008-05-28

[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项目

[作者简介] 吕俊明(1981-), 男, 陕西, 博士生, 从事化学反应流数值研究.

其中 w 和 c 分别代表组分的分子量及摩尔浓度, c_t 代表总摩尔浓度, D_{sp} 代表组分 sp 的平均扩散系数.

表 1 COIL 化学反应计算采用的 21 个基元反应

Table 1 21 reactions in COIL chemical computation

Reaction equations		Rates	Reaction equations		Rates
1	$O_2(^1) + O_2(^1) \rightarrow O_2(^1) + O_2(^3)$	2.7×10^{-17}	12	$I_2^* + O_2(^3) \rightarrow I_2 + O_2(^3)$	4.9×10^{-12}
2	$O_2(^1) + H_2O \rightarrow O_2(^1) + H_2O$	6.7×10^{-12}	13	$I_2^* + H_2O \rightarrow I_2 + H_2O$	1.7×10^{-11}
3	$O_2(^1) + O_2(^3) \rightarrow O_2(^3) + O_2(^3)$	1.6×10^{-18}	14	$I_2^* + He \rightarrow I_2 + He$	9.8×10^{-12}
4	$O_2(^1) + H_2O \rightarrow O_2(^3) + H_2O$	4.0×10^{-18}	15	$I + O_2(^1) \rightarrow I^* + O_2(^3)$	7.8×10^{-11}
5	$O_2(^1) + Cl_2 \rightarrow O_2(^3) + Cl_2$	6.0×10^{-18}	16	$I^* + O_2(^3) \rightarrow I + O_2(^1)$	$1.0277 \times 10^{-10} \exp(-401.4/T)$
6	$O_2(^1) + He \rightarrow O_2(^3) + He$	8.0×10^{-21}	17	$I + O_2(^1) \rightarrow I + O_2(^3)$	1.0×10^{-15}
7	$I_2 + O_2(^1) \rightarrow 2I + O_2(^3)$	4.0×10^{-12}	18	$I^* + O_2(^1) \rightarrow I + O_2(^1)$	1.1×10^{-13}
8	$I_2 + O_2(^1) \rightarrow I_2 + O_2(^3)$	1.6×10^{-11}	19	$I^* + O_2(^1) \rightarrow I + O_2(^1)$	1.1×10^{-13}
9	$I_2 + O_2(^1) \rightarrow I_2^* + O_2(^3)$	7.0×10^{-15}	20	$I + I^* \rightarrow I + I$	1.6×10^{-14}
10	$I_2 + I^* \rightarrow I + I_2^*$	3.8×10^{-11}	21	$I^* + H_2O \rightarrow I + H_2O$	2.0×10^{-12}
11	$I_2^* + O_2(^1) \rightarrow 2I + O_2(^3)$	3.0×10^{-10}			

1.3 数值方法

上节所述三维 N-S 方程所对应的空间半离散差分方程表述为

$$\left(\frac{U}{t} \right)_{i,j,k} = - CONV_{i,j,k}^n + VIS C_{i,j,k}^n + S_{i,j,k}^n,$$

其中 $CONV$ 为对流项,采用具有二阶精度、结构简单且鲁棒的频散可控耗散格式(DCD)进行离散^[13,14], $VISC$ 为耗散项,包括分子扩散、粘性效应和热传导项,采用中心差分格式离散.

2 计算结果与讨论

2.1 计算条件

在本文的模拟中主流采用 $O_2(^1)$, $O_2(^3)$, H_2O , Cl_2 , He 的混合物,分别为基态氧、单重态氧、水蒸汽、氯气和载气氦气,摩尔配比为 1 1.5 0.16 0.24 19.72,在各算例中保持不变.副流为 I_2 , He 的混合物,摩尔配比的选择参考不同的流量配比.为便于比较,气动参数均取相同条件.具体的计算参数见表 2,其中下标 p 代表主流, s 代表副流.值得一提的是,副流与主流的压力匹配关系的选定基于作者先前关于射流穿透深度对 COIL 性能影响的工作^[15],为基本完全穿透条件.

表 2 模拟采用的计算条件

Table 2 Computational conditions in simulation

\dot{n}_p/\dot{n}_s	P_p/kPa	T_p/K	p_s/kPa	T_s/K	$n_{I_2} \quad n_{He}$
7	9.961 7	315	20	415	1 30.15
10	9.961 7	315	20	415	1 51.22
15	9.961 7	315	20	415	1 88.29
20	9.961 7	315	20	415	1 126.06

2.2 泵浦率与增益分布

I_2 分解率(Dissociation)、I 泵浦率(Pump)以及 $O_2(^1)$ 生成率(Yield)的计算公式如下:

$$diss = \frac{I + I^*}{I_2 + I_2^* + I + I^*}, \quad pump = \frac{I^*}{I + I^*}, \quad yield = \frac{O_2(^1)}{O_2(^1) + O_2(^1) + O_2(^3)}.$$

图 2 分别为在流量配比为 7, 10, 15, 20 条件下所得到的 I_2 分解率、I 泵浦率以及 $O_2(^1)$ 生成率沿网格点 $j=25$ (大约在半喷管的中心位置)的流向分布,图中每种分布的各条曲线代表不同的横向位置,即不同的 k 方向网格点,下文所示图例皆如此,不再赘述.可见,在配比 7 的情况下,单重态氧消耗巨大,导致分解率不高,而泵浦率在喷管下游基本保持在 20% 多的水平.对于配比 10, 下游段碘分子基本完全分解,而单重态氧产率在 20% 左右,泵浦率维持在 60%. 配比在 15 及更高的情况,由于单重态氧的富集,会产生大量过渡态产物 I_2^* , 外加碘原子的快速复合,会导致分解率下降,呈现由入口至出口的线性上升,且最大分解率随配比增

加而减小. 由于载能介质大量存在, 泵浦率均维持在 80 % 以上.

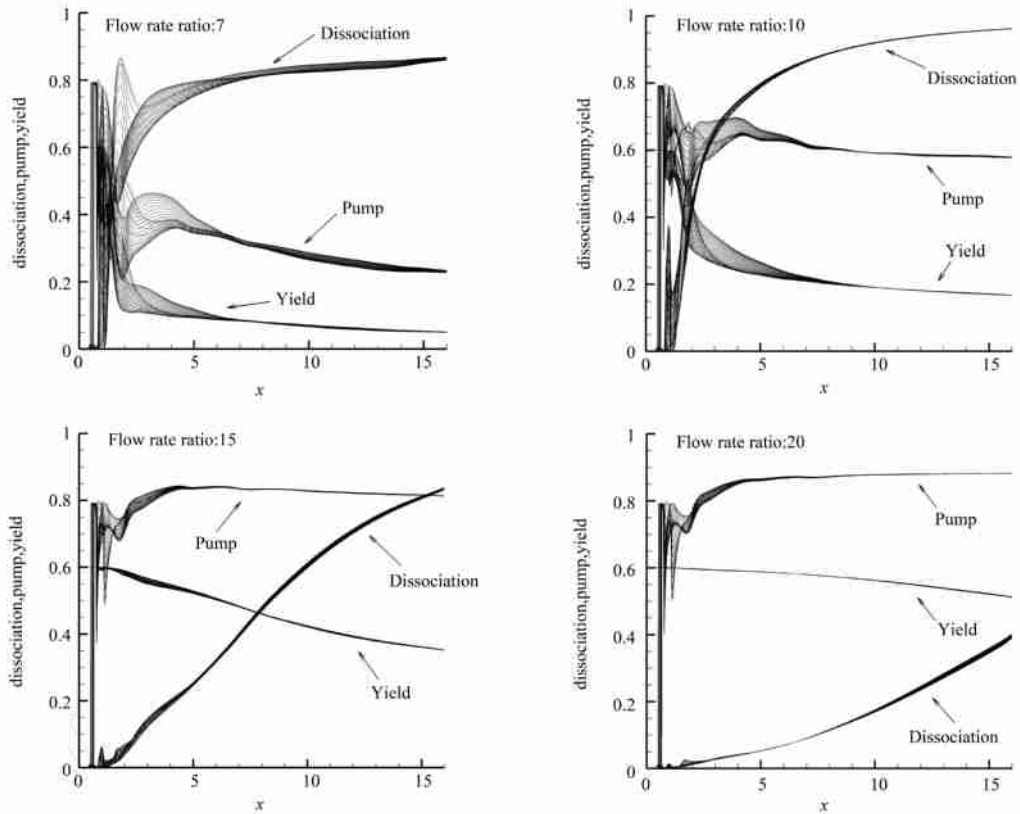


图 2 $j = 25$ 网格线上分解率、泵浦率和单重态氧产率沿 x 方向的分布
Fig. 2 Dissociation, pump and yield rate along x axis on $j = 25$ gridline

图 3 分别为在流量配比为 7, 10, 15, 20 条件下所得到的 I_2 分解率、I 泵浦率以及 $O_2(^1)$ 生成率沿网格点 $i = 300$ (大约为 $x = 11$ cm 处) 的纵向分布. 在对其它流向位置的结果进行分析时, 发现此分布在 $x = 10 \sim 15$ cm 区域基本保持恒定. 图中反映了三种变化率和上述较为近似的分布规律. 载能介质不足会导致分解率与泵浦率都偏低, 碘分子分解较为充分, 但泵浦的激发态碘原子非常少. 若载能介质过多则会导致分解率随配比提高而降低. 适宜的流量配比将会同时得到不错的分解率与泵浦率.

在化学氧碘激光器的光学谐振腔中, I^* 达到粒子数反转后的激射发生在最大增益跃迁线上, 故激光功率与小信号增益系数有重要的关系. 其具体的表达式如下:

$$g = \left[[I^*] - \frac{1}{2} [I] \right] = \frac{A^3}{8} \sqrt{\frac{m}{2 k_b T}} \frac{7}{12} \left[[I^*] - \frac{1}{2} [I] \right],$$

其中 A 为爱因斯坦自发辐射系数; λ 为激光波长; $[I^*]$, $[I]$ 分别为平衡时激发态和基态碘原子浓度; m 为碘原子质量; k_b 为玻尔兹曼系数; T 为绝对温度.

由上述公式可知, 小信号增益系数不仅取决于泵浦率的高低, 还与绝对的浓度大小有关, 这就关系到碘喷流的多少以及分解率的高低. 图 4 是增益系数在 $j = 25$ 网格线沿 x 方向的分布. 在配比 7 的情况下出现了负增益, 而在 10 的情况下, 增益在 1 %/cm 左右, 但不断减小, 配比 15 时, 在光腔附近增益保持恒定, 并维持在 1 %/cm 左右. 高配比情况下, 虽然泵浦率保持稳定的高水平, 但鉴于分解率的变化所导致的组分密度的变化, 形成了增益的变化规律, 且由于本身喷流流量不大, 增益的值也非常小, 只有 0.4 %/cm 左右.

图 5 是增益系数在 $i = 300$ 网格线上的纵向分布, 做了对称处理. 几种情况下横向分布基本均匀, 三维效应在光腔附近已经不明显, 其中也有副流的穿透深度合理的因素. 流量配比低时, 不仅出现负增益, 且纵向分布不均匀. 配比为 7, 10 时, 在竖直方向对称面附近出现了增益峰, 这可能缘于穿透深度并非完全合适, 也是亚声速段喷流固有的弊端, 即通过喉道后由于膨胀作用, 对称面附近的碘密度相对较低, 在低配比条件下恰

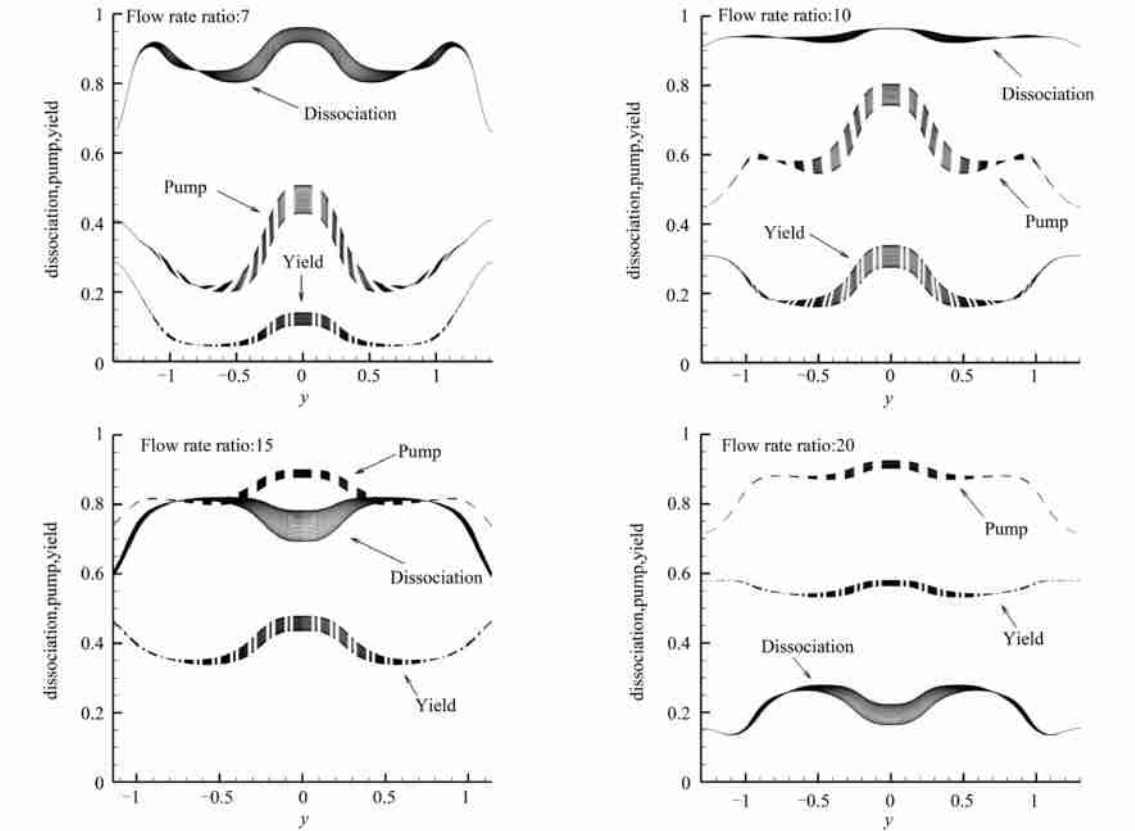


图 3 $i = 300$ 网格线上分解率、泵浦率和单重态氧产率沿 y 方向的分布

Fig. 3 Dissociation, pump and yield rate along y axis on $i = 300$ gridline

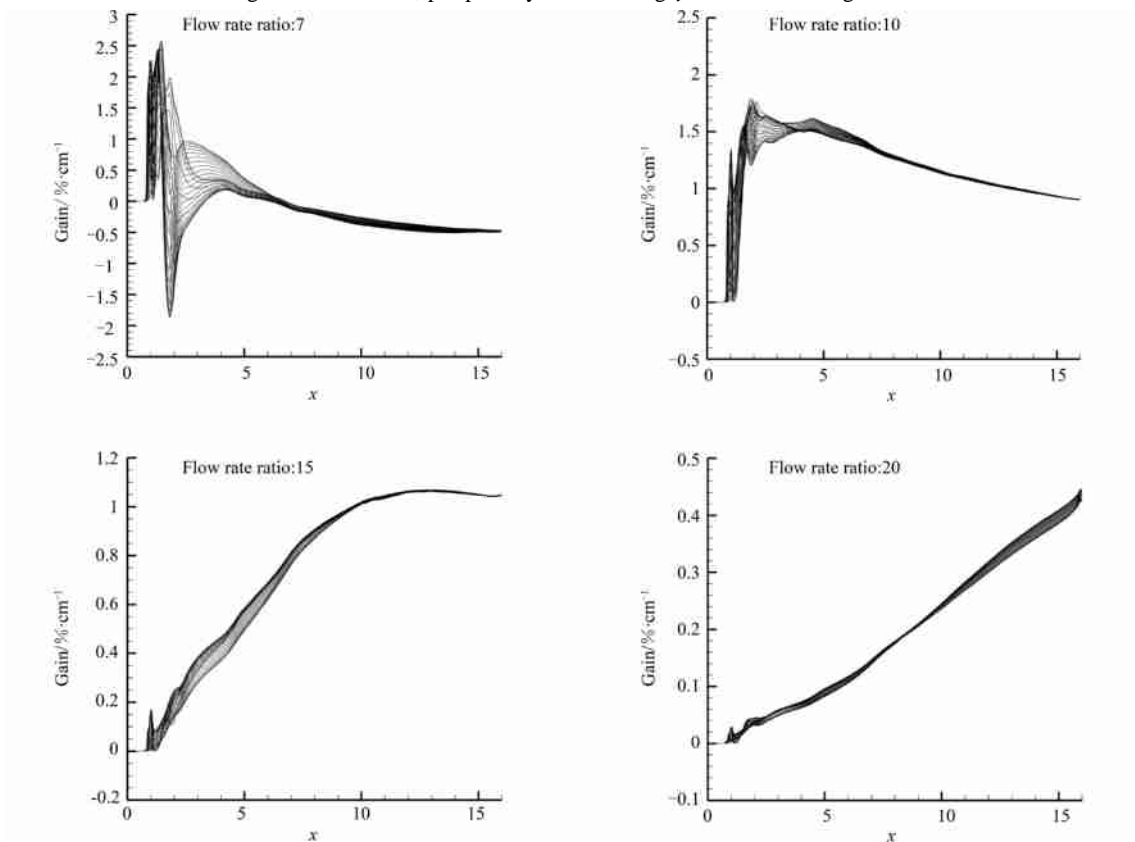


图 4 $j = 25$ 网格线上小信号增益系数沿 x 方向的分布

Fig. 4 Small signal gain along x axis on $j = 25$ gridline

好是合理的配比状态. 而在此区域剪切作用又很明显, 流动混合得到很好的加强, 加上此区域存留有大量载能介质, 所以增益出现峰值. 而适当的流量配比不仅如上文所述在流向上分布均匀, 还能得到较为均匀的纵向分布, 并达到 $1\%/cm$ 的水平. 其在纵向对称面附近, 横向分布不均匀是由于圆孔射流方式下, 副流在传递到下游空间时, 横向分布下非核心区密度明显低于核心区, 改变了载能介质与增益介质的含量匹配, 外加核心区边界附近的剪切作用, 都将导致横向分布的不均匀性, 但并不严重.

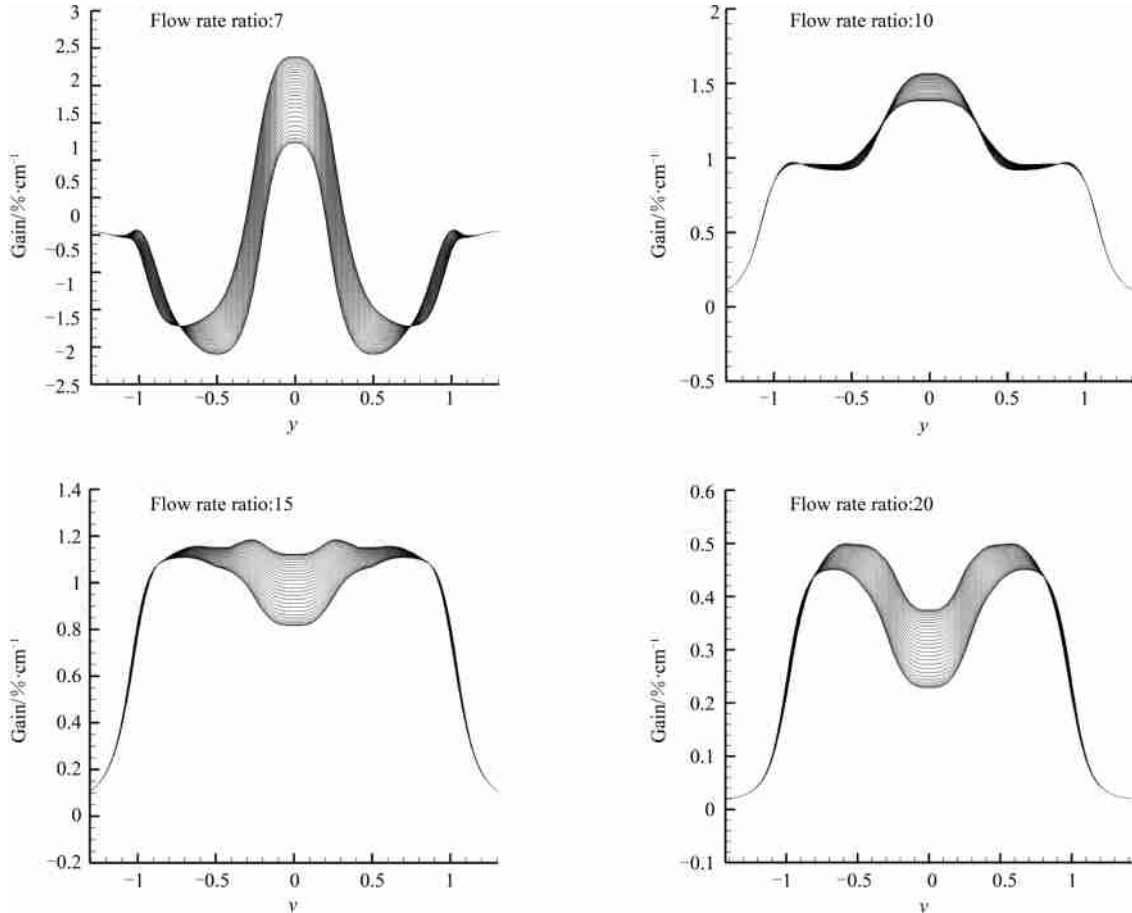


图 5 $i = 300$ 网格线上小信号增益系数沿 y 方向的分布

Fig. 5 Small signal gain along y axis on $i = 300$ gridline

3 结论

本文通过求解三维层流 Navier-Stokes 方程与组分输运方程, 结合基元化学反应模型对 COIL 亚声速段横向射流在不同主副流流量配比下小信号增益系数的分布规律进行了数值分析, 得到以下结论:

在混合喷管亚声速段进行横向喷流, 碘分子分解率、基态碘原子泵浦率以及单重态氧的产率沿流向及纵向的分布均受到主副流流量配比的影响. 小信号增益系数同时受到泵浦率及碘分子浓度的影响. 在高碘分子浓度条件下, 泵浦率不高, 增益系数横向分布极不均匀并出现大量负增益区. 在低碘分子浓度条件下, 泵浦率理想并分布均匀, 但由于碘分子本身的低密度以及分解率不高的限制, 增益系数分布虽然均匀但很难达到理想水平. 数值结果证明, COIL 中的混合与化学反应在喷管中的流动具有一定的时间与空间变化规律, 不同的配比条件下增益最大值出现的位置也不断向下游移动, 直到高配比时增益还未达到最大值. 合理的主副流流量配比将得到理想的、分布均匀的小信号增益信号系数.

[参 考 文 献]

- [1] McDermott W E, Pchelkin N R, Benard D J, Bousek R R. An electronic transition chemical laser[J]. Appl Phys Lett, 1978, **32**: 469 - 470.
- [2] Crowell P G. Laminar mixing between chemically reacting parallel streams of excited oxygen and iodine for an exact multicomponent diffusion model[R]. R & D Associates Report 83-A/K14-0. 1984: 1983.
- [3] Buggeln R C, Shamroth S, Lampson A I, Crowell P G. Three-dimensional (3-D) Navier-Stokes analysis of the mixing and power extraction in a supersonic chemical oxygen iodine laser (COIL) with transverse I₂ injection [R]. AIAA 94-2435, 25th AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, June 20 - 23, 1994, Colorado Springs, CO.
- [4] Madden Timothy J, Miller James H. Theoretical exploration of gas lasers using time dependent 3-D Navier-Stokes simulation[C]//Proceeding of SPIE, 2005, **5777**:111 - 116.
- [5] Yang Bailing. Latest advances in COIL at Dalian[C]//Proceeding of SPIE, 1998, **3574**:281 - 289.
- [6] 李守先, 刘广华,等. 氧碘化学激光器中混合现象的数值模拟[J]. 强激光与粒子束, 1999, **11**(5):535 - 537.
- [7] 袁先旭,陈坚强,邓小刚,等. 化学氧碘激光(COIL)三维混合反应流场数值模拟研究[J]. 空气动力学学报, 2006, **24**(4): 444 - 449.
- [8] 胡宗民,孙英英,吴宝根,姜宗林,等. COIL 亚声速段横向喷流混合流场数值分析[J]. 强激光与粒子束, 2005, **17**(4):481 - 484.
- [9] Rybalkin V, Katz A, Waichman K, Vingurt D, Dahan Z, Barmashenko B D, Rosenwaks S. How many O₂ molecules are consumed per dissociated I₂ in chemical oxygen-iodine lasers[J]. Applied Physics Letters, 2006, **89**: 021115 - 1 - 3.
- [10] 刘万发, 赵彤, 徐文刚, 王科. 碘气流穿透深度和碘流量对 COIL 激光输出功率的影响[J]. 强激光与粒子束, 2004, **16**(12): 1506 - 1508.
- [11] Madden T.J. Aspects of 3-D chemical oxygen-iodine laser simulation[C]//Proceeding of SPIE, 2003, **5120**:363 - 375.
- [12] Paschkewitz J, Shang J, Miller J, Madden T. An assessment of COIL physical property and chemical kinetic modeling methodologies [R]. AIAA Paper 2000 - 2574, 2000.
- [13] Jiang ZL, 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.
- [14] Jiang ZL. On dispersion-controlled principles for nonoscillatory shock-capturing schemes[J]. Acta Mechanica Sinica, 2004, **20**(1): 1 - 15.
- [15] Lu J M, Hu ZM, Jiang ZL. Effect of penetration in HPCOIL[J]. Chinese J Comput Phys, 2008, **25**(4): 414 - 420.

Numerical Study on Gain Distribution in COIL : Flow Rate Ratio of Primary and Secondary Flow

LV Junming, WANG Chun, JIANG Zonglin
(LHD, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080, China)

Abstract: Three-dimensional CFD technology is applied in a RADICL model by solving laminar Navier-Stokes equations and transportation equations to study iodine molecule dissociation rate, iodine atom pumping rate, singlet oxygen yield rate and small signal gain at different flow rate ratio of primary and secondary flow. It is found that an appropriate flow rate ratio plays an important role in spatial distribution of the small signal gain. Rich or poor oxygen conditions go against with a proper gain.

Key words: COIL; jet in cross flow; flow rate ratio; gain