

布居数反转的非平衡流模拟计算

——对流动激光器性能的研究

吴中祥

(中国科学院力学研究所)

主题词 非平衡流; 布居数反转; 激光器

1. 引言

40年代不可逆过程热力学已形成一个新的领域^[1]。60年代初对扩散、传热、导电、弛豫以及热电、电磁等不可逆过程的各种唯象处理已被综合为统一的体系——非平衡态热力学^[2]。由于热机、气体放电、热核聚变以及天体物理、地球物理等方面的研究和发展,流体力学与非平衡态物理学相结合而形成的非平衡流问题的研究已扩展到广泛的领域,流体力学与非平衡态热力学结合形成“热流体动力学”,与电磁学结合形成“磁流体动力学”,等等。近十几年来,大功率激光器的研制迅速发展。工作介质的流动对大功率激光器有重要作用:①流动的对流散热比不流动的扩散散热有效得多;②流动使工作介质不断更新,能保持工作介质的稳定性并持续补充新能源;③可利用快速膨胀直接形成布居数反转。因而,现有的大功率激光器——气动激光器,流动、放电CO₂激光器,准分子激光器,化学激光器等均采用流动气体作为工作介质。

产生激光的根本条件是工作介质的布居数反转,而反转态正是一种非平衡态。在流动激光器中,存在如下的非平衡流问题:①对这类布居数反转的非平衡流,考虑辐射、放电、化学反应、各种弛豫(振动、转动、碰撞)与介质流速等因素的重要作用,提出相应的研究模型;②对以上各因素的处理和计算方法;③这类非平衡流及其混合过程的流体动力学方程及其解;④上述各因素及其变化与工作介质的状态及布居数反转的相互影响及其规律;⑤有关过程的微观动力学机制;⑥有关规律在改进与设计新型流动激光器方面的应用。

对于非平衡流,除了一般流体力学的守恒方程和状态方程而外,还需补充反映不可逆过程熵增的附加方程组而研究相应的物理过程。近十几年来,配合流动激光器性能的研究,流体力学与激光物理相结合,对这类布居数反转的非平衡流及其与强辐射相互作用的研究也相应得到迅速发展。这既是分析流动激光器件性能、对新设想进行预估和设计新器件(特别是大型器件)所必需,又对这类非平衡流特性及激光物理本身的研究有重要的科学价值。

这类问题涉及的因素、参量较多,方程复杂且变化灵敏,各种过于简化条件的解析分

析, 虽能对某些问题起定性和显示倾向的作用, 但为了反映实际问题中的许多规律和特征, 并给实际应用中必要的参量以足够精确的数据, 必须采用较复杂的合理简化模型。这样, 由于方程太复杂而不能解析求解, 只能作数值模拟计算。本文不具体介绍有关非平衡流的大量解析分析工作, 而着重介绍中国科学院力学研究所近10年来, 结合流动激光器性能的研究, 对这类布居数反转非平衡流及其与强辐射相互作用的模拟计算工作。

II. 准一维布居数反转非平衡流的计算

正是理论计算预言了高速流动冷却能使非平衡流产生布居数反转, 从而指导研制了气动激光器^[3,4]。准一维非平衡流计算对气动激光器和其他流动激光器的产生和发展起重要作用。

准一维非平衡流计算方法是准一维流动方程组与弛豫方程组联立求解。大体可分为定常法^[4]与非定常法^[5]两大类。定常法是对定常后的常微分方程组用 Runge-Kutta 法或积分法求解。这种方程在收缩-扩张喷管喉道附近的声速点处出现奇点, 不能对亚、跨、超声速段统一求解。一般假定在喷管的亚声速段是平衡流, 调整参数以给出喉道的初始条件, 从喉道附近开始计算以求得收敛解。非定常法是首先假定非定常的方程组中各未知变量在 $t=0$ 时刻的一个初始分布, 再按一定的时间步长和差分格式求解 $t+\Delta t$ 时刻分布中的各值, 直至各参量均收敛而求得其定常值。方程组在整个喷管均为双曲型, 喉道区域不存在奇点, 可在亚、跨、超声速区统一地求解。70年代我们分别采用这两种方法, 对 $\text{CO}_2\text{-N}_2\text{-H}_2\text{O}$ 组分的非平衡流作了如下工作:

1. 弛豫的模型、数据与方程 在较系统地分析整理已有工作的基础上提出了较为合理的3振型4温度弛豫模型^[7], 给出了统一的广泛适用的弛豫速率数据^[6]和较严格的方程组^[7,8]。

2. 对小信号增益的计算 采用上述改进的模型、方程和整理的的数据, 忽略辐射项, 计算了小信号增益及各因素的影响^[7]。与实验数据和其他作者的计算结果对比表明, 我们的计算与实验更好相符, 并从提高小信号增益的角度得到改进器件性能的一些规律。

3. 定常法与非定常法计算结果的比较 分别采用这两种方法对燃烧型 $\text{CO}_2\text{-N}_2\text{-H}_2\text{O}$ 气动激光体系作了计算和分析^[9], 结果表明: 两种方法所得规律基本一致。但在小信号增益-滞止温度图上, 两者的差别在于, 若将非定常结果向高温方向平移约 100 K 左右, 即与定常结果近于重合, 表明两者合理地一致; 而向高温的移动可解释为非定常法已计及亚声速段的冻结效果, 相当于喉道处降低 100 K 左右, 而且这种降低有随滞止温度的升高而加大的趋势。这只能由与非定常结果对比才能得到, 反映了非定常法的优越性。但定常法有节约机时、容易调试的优点, 与非定常法配合, 适用于粗略、快速地寻找大量的规律性结果。

III. 混合非平衡流计算的简化模型

后混式气动激光器和化学激光器都需解决混合非平衡流的计算。在两股超声速流的混合过程中, 由于复杂的层流或湍流混合, 边界层、粘性及击波等造成的气动损失使问题极其复杂。现虽已有较严格的二维计算方法^[10], 但工作量很大, 不适于大量计算, 因而发展了一些一维的简化模型。

1. 改进的“泄漏管”模型 简化模型中以“泄漏管”模型用得最广^[11]。我们采用此模型的基本方法, 对混合区型线分别采用直线和二次曲线两种线型, 并联系喷管滞止条件给定初始条件, 计算混合 CO_2 气动激光器特性^[12], 得到混合区型线、长度和喷管滞止条件对小信号增益影响的一些规律。

2. “逐渐混合”与“瞬时混合”模型 取类似的一维混合图像, 设参数均匀的两股平行且无间隙的流体 (G 流、J 流) 相互混合成混合流 (M 流), M 流的参数由垂直于流动方向的截面上 G、J 两股流的相应参数在混合区内相应截面的平均值确定, 并沿流动方向按给定的混合区型线逐点地利用积分形式的一维定常流方程组和弛豫方程组联立求解, 以确定各瞬时混合区的参数。这称为“逐渐混合”模型^[13]。对于 G、J 流分别为 $N_2 + H_2O$, $CO_2 + H_2O$ 的计算结果与[9]按二维 Navier-Stokes 方程得出的解满意地相符。按此模型考察了初始条件及混合区型线对小信号增益的影响。又由于我们感兴趣的只是混合区外的增益, 而上述计算表明, 混合长度对此并无明显影响, 故又提出更加简化的“瞬时混合”模型^[14], 即设两股流在喷管出口处立即均匀混合, 往后就当作等截面的一股非平衡流, 按一维定常流守恒方程和弛豫方程组求解, 这样能更快地算得结果, 有利于大量计算。按此模型计算分析了流速、温度、组分等对增益的影响。

3. 带化学反应的两股平行流的二维简化方法 考虑到激光器中激活粒子种类较多, 难以采用通常“火焰片近似”模型^[15]所用的级数展开法求解, 而且“火焰片近似”以及上述准一维的混合模型又都需由其他途径确定其中引入的混合长度。因此, 我们按二维层流压缩边界层方程, 采用一种隐式有限差分格式, 对两股平行流的扩散混合、化学反应问题进行了计算^[16], 可以比直接求解二维 Navier-Stokes 方程简便得多而又无需混合长度的假设, 求得有混合区 (包括有、无化学反应) 和无混合区之间的两条界面曲线。用此方案研究了连续波 HF 化学激光器中气流速度、温度以及化学反应及其速率系数等对激活态 HF 浓度和小信号增益的影响^[17]。

IV. 对与非平衡流相互作用的辐射场的处理

为研究产生强辐射的激光器性能而研究辐射、放电、化学反应及各种弛豫起重要作用的非平衡流问题, 必须认真处理其中的辐射场。早期计算腔中辐射场的分布时考虑的是在真空中没有激活介质的情况^[18]。

[19]计算了激活腔中辐射场的三维分布。我们作了以下工作:

1. 对已有差分法作适当校正, 使其能在更广泛范围内适用 我们发现[19]的计算方法, 相当于在各差分格点的微小范围内也引进把各相邻传播面都当作均匀球面的不恰当假设。如不对此加以校正, 特别是对于较小耦合度的腔体, 就会得不到稳定的解。因而, 采用空腔中的“衍射分布”与“均匀球面波分布”的耦合度之间建立单参量经验公式^[20]的类似方法对此作了校正, 从而能在各种耦合度都易于得到稳定的解^[21]。

2. 谐振腔中辐射能量密度的计算 谐振腔中辐射能量密度通常是由往返光束按“光强叠加”求得。对于激光这种强相干光, 原则上只能按“场强叠加”计算。我们对同一个器件分别用两种叠加方式对比计算, 结果表明: 无论是总光强还是饱和增益系数都有显著的差别。这反映腔中辐射能量密度和饱和增益都需按场强叠加计算。但输出辐射场的位相和振幅分布几乎完全一样, 相应的输出功率也十分相近, 表明按光强叠加能基本正确地算得输出辐射场和功率^[22]。

3. 严格推导出辐射场计算的常用方程, 积分法计算激活腔的探讨 在介电系数并非常量的激活介质中, 作为通常计算场分布的基础的波动方程并未得到证明, 更不能导出通常的 Fresnel-Kirchhoff 衍射方程而使积分法失去基础。现有计算都是采用差分法, 但差分法只

能按光束传播的路线逐点进行。对于复杂的腔形结构,例如重要的 Z 型折叠正支共焦不稳定腔,只能采用相应的中空拉长腔模拟,两者显然有很大差别。因此,我们严格地从 Maxwell 方程出发,考虑到气体介质复折射率的实部是常量且约等于 1,而虚部的不均匀性仅仅是因增益系数的不均匀性引起的,并且具体估计了有关项的量级,得到^[23]:①证明在非均匀激活气体介质中,电场强度仍遵从类似的波动方程,但其中的复折射率不是常量。②在此方程的基础上采用通常的经典场论方法,结合对有关参量在实际器件中量级的估计,给出了激活气体介质中电场强度有 1% 精确度的积分表达式,相当于考虑到激活介质增益的惠更斯原理。由此可导出各种计算场分布的方法,使它们建立在较为稳固的基本原理之上,并可估计计算的精度,给出近似的条件,而且原则上可据以作积分计算。③按参量变化的大小将积分面粗分为几大区,在各大区内将参量当作常量,再按位相差的大小分小区,并按 Cornu 螺线积分的办法,在通常的机器上能容易地实现积分。基本上解决了用积分法计算激活腔的问题。

4.对垂直于光轴的各截面上辐射场采用均匀分布的简化假设在计算输出功率时的适用性当不具体研讨光束质量和输出模式而仅考虑输出功率时,为了避免辐射场传播方程的复杂计算,大大简化问题,假设辐射场在光轴各截面上均匀分布。但按这种假设所得结果的可靠程度如何?我们按均匀分布假设提出了一种适用于 $(n-1)$ 程折叠腔的可由简单代数式表达的粗估计算公式^[24],用它计算了文献报道的几组实验数据(这些数据较全面,具体,又有按辐射场分布计算的结果),同时我们又按严格的辐射场分布计算了这些数据^[21,22]。结果表明,无论在单程腔或“Z”型折叠腔,高耦合度或低耦合度,按粗估公式算得的输出功率都跟实验数据和相应的按场分布计算的结果很好相符,因而能够具体表明:在计算输出功率时,辐射场在垂直于光轴各截面上均匀分布的假设确有足够可靠的适用性。

V. 横流、电激励 CO₂ 激光器的模拟计算方案

考虑到文献上已有计算方案^[26-28]都不能恰当地模拟常用各种类型结构的放电区,也没有具体分析所选稳定振荡条件的适用性,且所用模型仅限于一维,我们作了如下工作:

1.提出简单适用的放电区模型 我们模拟实际器件,构造一个一维流动、准二维放电的简单计算模型^[29],能对器件光腔区与各种类型放电区内的特性作准二维的模拟计算。在合理地选择 E/N 之后,能使算得的小信号增益峰值与实验一致,并得到不同结构的放电区内小信号增益的二维分布,其基本形状也能与实测相似。

2.提出模拟横流放电激光器输出功率的简便计算方法 采用上述简单的放电区模型,在方程中加入垂直光轴各截面上均匀分布的辐射项,并分别情况采用适当的稳定振荡条件,得到一套适用的计算腔中饱和增益和输出功率的简便方案^[30]。按此方案计算分析了介质在不同流速条件下,放电区长度、电子密度、腔镜长短、腔镜中心位置、输出耦合度等对输出功率的影响和变化规律,并从提高器件输出功率的角度,提出设计与改进器件的一些可行的建议^[31]。

3.提出一套模拟横流放电激光器效率的简便计算方法 具体定义并计算确定了流动放电激光器的总效率 $\bar{\eta}_{EI}$, 输入电能转换成激光上能态振动能的效率 $\bar{\eta}_{EV}$, 激光上能态振动能转换成输出光能的效率 $\bar{\eta}_{VI}$, 并在不同流速、不同电流条件下,计算了放电区长度、电子密度、电极与光腔相对位置、耦合度等因素对 $\bar{\eta}_{EI}$, $\bar{\eta}_{EV}$, $\bar{\eta}_{VI}$ 的不同影响和变化规律,并从综合提高器件输出功率和各种效率的角度,对器件设计提出了一些相应的可行建议^[32]。

VI. 辐射、放电与非平衡流（流动的激活介质）相互作用的一些规律

腔中辐射场、放电和流动激活介质的饱和增益的相互影响是随腔体结构、辐射场分布状态、介质特性及其流动状态等因素而变化的，其变化规律还可反映激光器内基本的物理机制。现有文献对激光器中饱和增益这种重要特性，除有一些在简化条件下的近似解析表达外，还没见到关于它的变化规律的具体描述与分析。我们对 N_2-CO_2 体系激光器的实际腔体，按严格的方程作数值模拟计算所得的结果，分析总结出如下一些规律：

1. 流动激活介质饱和增益系数分布 $G(x)$ 随光强分布 $I(x)$ 的基本变化规律^[33] ①在 $I(x)$ 随 x 骤增的区域， $G(x)$ 骤降。②在 $I(x)$ 基本不变的区域， $G(x)$ 随 x 呈负指数曲线单调下降，而且 $I(x)$ 值越大，下降越陡。③在 $I(x)$ 随 x 骤降的区域， $G(x)$ 有相应的回升。

2. 对给定的不同光强 I ，流动激活介质饱和增益随电激励条件变化的规律 ①气流进入放电区，小信号增益由零开始随 x 迅速增长。②在光腔与放电重叠区内 $G-x$ 曲线随光强 I 的不同而不同：a. 当 I 较小时， G 持续上升，但随着 I 的增大， G 随 x 增加的梯度减小。b. 当 I 增大至一定程度时， G 随 x 的变化相继出现一低谷和高峰。c. 当 I 较强时， G 较快下降而趋于某一稳定值。d. 当 I 极强时， G 极快下降，不出现稳定值。③激活气体流出放电区后， $G(x)$ 随 $I(x)$ 变化的规律与[33]无放电区时的相同。

以上规律还都从介质布居数反转的大小是随着体系中微观动力学机制（即有、无泵浦，有、无辐射场，及其强度大小，各种弛豫传能和辐射传能，及其速率大小等）的不同和变化情况而引起上、下激光能级能量转换供应的缓、急、充、匮而发生变化的情况，作了适当的注释^[33,30]，并据此提出了高能流动激光器光腔设计的一些意见^[25]。

3. 其他条件相同时小信号增益 G_0 和饱和增益 G 随介质流速 u 的变化规律 从 G_0-x 曲线可见：当 u 较小时，在电激励区内， G_0 随 x 较陡地上升并达到一个稳定值，直至流出电激励区后随 x 较陡地下降。当 u 增加时， G_0 在电激励区内随 x 的上升和流出电激励区后随 x 的下降都渐缓，对于一定的电激励区长度，随着 u 的增加， G_0 的峰值下降且沿流动方向移动，在电激励区内 G_0 的稳定区将缩短直至消失，而且当 u 增加到某恰当的数值时，可使介质在流出电激励区之后保持一段稳定。从 $G-x$ 曲线可见，当 u 增大时，曲线的类型趋于向 I 减小的方向变化，而且对于镜片位置较多地处于电激励区内的光腔结构，这种变化更为显著。这些都反映出介质流速的重要作用，且都可用非平衡介质的流速及与其所受泵浦的速率、各种传能速率之间竞争、消长作用的微观动力学机制予以解释。

近10年来，我们在研制大功率激光器的过程中，把流体力学与激光物理相结合，在布居数反转的非平衡流及其与强辐射相互作用的模拟计算方面作了一些工作，已有一套基本适用于研究各类流动激光器的模拟计算方法和程序，对这类布居数反转的非平衡流的一些基本特性和规律作了较系统的分析研究。现正考虑结合实际应用从提高气压、连续调频，重复脉冲，以及使用其他介质体系等方面进一步扩展其研究范围。

参 考 文 献

- 1 Lavenda B. H., Thermodynamics of Irreversible Processes, The Macmillan Press (1978).
- 2 Degroot S. R., Mazur P., 非平衡态热力学, 陆全康译, 上海科技出版社 (1981).
- 3 Hurler I. R., Hertzberg A., Phys. Fluids, 8 (1965): 1601.
- 4 Басов Н. Г., и др., ЖТФ, 38, 12 (1968): 2031—2041; 41, 1 (1970): 173—180.

- 5 Anderson J. D., *AIAA J.*, **8**, 3 (1970) : 545; **8**, 12 (1970) : 2280; AD-718805 (1970) ; AD-755878 (1971) .
- 6 严海星, 激光, **8**, 6 (1981) : 1-8.
- 7 —, 陈丽吟, 力学学报, **4** (1978) : 274-287.
- 8 李树山, 激光, **6**, 7 (1979) : 10-18.
- 9 陈丽吟, 楚泽湘, 第5届全国激光学术报告会, 广州 (1980) .
- 10 Kothari A., Anderson J. D., AIAA Paper 79-0009.
- 11 Emanuel G., in Handbook of Chemical Lasers (eds., R. N. F. Gross, J. F. Bott), Ch. 8, Wiley & Sons (1976) .
- 12 俞刚, 邬传保, Seventh Int. Nathiaguli Summer College Report (1982) .
- 13 严海星, 第4届国际激光会议, 美国 (1981) .
- 14 —, 徐纪华, 全国计算物理学会成立大会, 北京 (1982) .
- 15 Mirels H., et al, *AIAA J.*, **11**, 2 (1973) : 156.
- 16 陈海韬, 周学华, 力学学报, **16**, 2 (1984) : 151-157.
- 17 周学华, 陈海韬, 中国激光, **11**, 9 (1984) : 627; 周学华, 陈丽吟, 陈海韬, *Laser and Particle Beams*, 将发表.
- 18 Fox Li, *IEEE J.*, QE-2, 12 (1966) : 774-783.
- 19 Rensch D. B., et al, *Appl. Opt.*, **13** (1974) : 2546.
- 20 Siegman, *Laser Focus*, **7**, 5 (1971) : 42.
- 21 吴中祥, 物理学报, **29**, 3 (1980) : 380-382.
- 22 —, 同上, **29**, 3 (1980) : 392-394.
- 23 —, 激光, **9**, 7 (1982) : 429-433.
- 24 —, 物理学报, **28**, 3 (1979) : 426-429.
- 25 —, 第1届全国谐振腔讨论会, 天津 (1982) .
- 26 Nighan W. L., et al, *Appl. Phys. Letters*, **14**, 8 (1969) : 240-243; Bullis, R. H., *AIAA J.*, **10**, 4 (1972) : 407-414.
- 27 Cool T. A., *J. Appl. Phys.*, **40** (1969) : 3563; Hassan, H. A., et al., AIAA, 9th Aerospace Science Meeting (1971) : 25-27.
- 28 Rmandillo E. A., et al., *J. Phys. D. Appl. Phys.*, **13**, 2 (1980) : 321-328.
- 29 陈丽吟, 楚泽湘, 陈海韬, 中国激光, **11**, 5 (1984) : 257-262.
- 30 —, —, 吴中祥, 光学学报, **5**, 2 (1985) : 135-141.
- 31 楚泽湘, 陈丽吟, 吴中祥, 中国激光, 即将发表.
- 32 徐纪华, 陈丽吟, 楚泽湘, 吴中祥, 光学学报, **5**, 12 (1985) : 1098-1103.
- 33 吴中祥, 严海星, 激光, **7**, 3 (1980) : 5-8.

THE SIMULATED CALCULATION OF NON-EQUILIBRIUM FLOW WITH POPULATION INVERSION FOR STUDING THE PROPERTIES OF GAS FLOW LASERS

Wu Zhong-xiang

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

Abstract

In order to study the properties of gas flow lasers, the research work combining fluid mechanics with laser physics for imitative calculating the properties of non-equilibrium flow with population inversion, in which radiation, discharge, chemical reaction and various relaxations play important roles, has been rapidly developed recently. The results studied by the Institute of Mechanics, Academia Sinica, in recent ten years on the calculations of quasi-one-dimensional non-

equilibrium fluid, the simplified models for calculating mixed non-equilibrium fluid, the dealing with the radiation field interacted with non-equilibrium fluid, the calculation scheme imitating the transverse flow discharged CO_2 laser, the interaction rules of non-equilibrium fluid with radiation and discharge and the micro-kinetics mechanism in this sort of fluid are emphatically introduced in this paper.

Keywords *non-equilibrium flow; population inversion; lasers*

第 4 届全国断裂学术会议

会议由中国航空学会、中国力学学会、中国机械工程学会和中国金属学会联合召开, 1985年11月2—5日在西安举行。全国100个单位的255名代表参加会议。宣读论文228篇, 书面交流61篇, 特邀大会报告4篇, 共293篇。这些论文已收入“第4届全国断裂学术会议论文集”(共8册)。

四篇特邀报告分别介绍了第6届国际断裂会议动态, 损伤容限及耐久性设计思想的发展前景及面临的研究课题, 我国压力容器缺陷评定规范以及断裂力学在压力容器设计及寿命评估中的实际应用。八个分组会宣读论文的内容极为广泛, 涉及断裂力学的工程应用, 断裂测试方法和技术, 断裂机制, 弹塑性断裂, 断裂力学计算方法, 复合型断裂, 应力腐蚀开裂, 动态断裂, 结构破坏危险性分析等许多方面。会议自始至终充满了热烈的学术气氛。

这次会议反映了预定的重点——断裂学科的工程应用。近些年来断裂学科在我国许多工程领域中取得了较大进展, 断裂研究的丰硕成果已在我国航空、航天、材料、机械、兵器、机车、压力容器等许多工程领域获得了广泛的应用。我国断裂力学与疲劳的测试技术水平, 如白光散斑、光弹法、散光法、密栅云纹法、光塑性方法等都有很大的提高, 有的达到比国外更高的精度。表面裂纹的理论分析和疲劳裂纹扩展规律, 氢脆机制, 球墨铸铁断裂机制, 弹性及弹塑性断裂力学的理论分析与有限元计算方法, 以及裂纹尖端伤的研究等方面得到了进一步的发展。介质材料也逐步扩大到考虑损伤、时间效应等更复杂的本构模型。在蠕变裂纹扩展的研究方面提出了新的参数。动态裂纹的研究开始受到注意。以概率断裂力学为基础的结构可靠性分析已取得了进展, 并将受到越来越多科研工作者的重视。

按照各学会轮流主办的原则, 下届断裂学术会议将由机械工程学会主办, 初步确定第5届全国断裂学术会议于1988年举行。

西北工业大学 林富甲