第 22 卷第 8 期
2010 年 8 月

强 激 光 与 粒 子 束
HIGH POWER LASER AND PARTICLE BEAMS

Vol. 22, No. 8
Aug., 2010

文章编号: 1001-4322(2010)08-1875-06

主流无载气 N_2-氧碘化学激光配气方式的数值优化*

吕俊明[1], 姜宗林[2], 袁湘江[1], 王 强[1]

(1. 中国航天空气动力技术研究院, 北京 100074; 2. 中国科学院 力学研究所 高温气体动力学重点实验室, 北京 100190)

摘 要: 针对主流无载气、副流以氮气为载气的氧碘化学激光(COIL), 应用求解 3 维多组分化学反应流方程的数值方法, 对流场和物理化学的耦合过程进行细致研究, 对副流载气变化带来的问题及性能提升的手段、特别是合理的配气方式进行深入分析。结果表明: 传统的在亚声速段进行喷流的配气方式不适用于主流无载气 N_2-COIL 系统, 必须采用超声速段射流方式; 合理的流量配比条件下, 超声速段射流方式 COIL 光腔位置处增益可达 1.5% cm^{-1}; N_2-COIL 流场边界层厚度明显减小, 拓宽了增益的有效分布区域。

关键词: 氧碘化学激光; 主流无载气; 氮气; 增益系数; 超声速段射流; 边界层

中图分类号: O354.3 文献标志码: A doi: 10.3788/HPLPB20102208.1875

针对氧碘化学激光(COIL)集成的研究, 控制系统的总体积、降低起飞总重量是最主要的内容之一。使用主流无载气、排气选择性吸附的循环 COIL 是一种新概念的系统集成思路。主流少用或不用载气, 可以省去扩压器等末端设备, 代之以按照组分进行选择性吸附的系统部件, 通常由分子筛(沸石)组成, 构造出循环工作系统, 避免高总压 COIL 对压力恢复以及大流量负荷的要求。另外, 选择性吸附系统的低压环境也适应了单重态氧发生器的低压环境。氧和碘的回收与循环利用大大提高了系统的经济性能, 非常适合作为车载或机载等机动激光集成系统的解决方案。由于吸附装置中使用的沸石分子筛只能有效吸附氮气和氧气, 因此要求 COIL 必须以氮气为载气。另一方面, 从成本角度考虑, 氮气比氦气价格低廉许多, 使用氮气将提高系统的效费比, 因此以氮气取代氦气作为 COIL 载气的研究相继展开[1-5]。目前的研究主要集中在实验领域, 得到了高输出功率与较好的性能演示, 但对于系统内部物理与化学过程耦合的发展情况尚未掌握, 也无法通过参数的详细分布探讨内在的运行机理。因此, 本文利用数值模拟方法的优势[6], 通过对完整的混合喷管进行细致的 3 维流场与化学反应过程模拟, 研究主流无载气 N_2-COIL 各项参量的分布规律, 提出可能的优化途径并证明其合理性, 对提高 COIL 工作效率、完善对循环 COIL 的认识都有重要意义。

1 物理模型与计算方法

1.1 物理模型

物理模型参考 RADICL 狭缝喷管, 如图 1 所示, 尺寸来自于文献[7]。其中喉道位置为 $x = 1.888$ cm, 亚声速区域射流大孔(Φ0.081 28 cm)中心位于 $x = 0.728$ cm, $z = 0$ cm 处, 小孔(Φ0.040 64 cm)中心位于 $x = 1.028$ cm, $z = 0.054$ cm 处; 超声速区域射流大孔(Φ0.081 28 cm)中心位于 $x = 2.0$ cm, $z = 0$ cm 处, 小孔(Φ0.040 64 cm)中心位于 $x = 2.2$ cm, $z = 0.054$ cm 处。考虑喷管上下壁面和射流喷孔完全对称, 计算区域在竖直方向上选取一半。横向上喷孔为重复性阵列设置, 故在合理节约计算资源的考虑下, 将模型在横向上划分到最小单

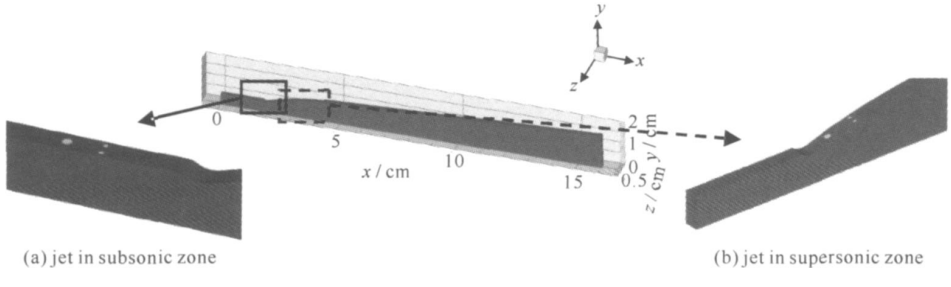

Fig. 1 Schematic of computational model of RADICL nozzle

图 1 RADICL 狭缝喷管简化计算模型

* 收稿日期: 2009-12-10; 修订日期: 2010-03-24

作者简介: 吕俊明(1981—), 男, 博士, 从事化学反应流数值研究; junminglv@gmail.com。

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

元,即半个大孔和一个小孔,虽简化了原周期性边界条件,但对结果影响不大,总的计算网格数为 351 × 61 × 31。

1.2 控制方程与数学模型

COIL 系统运行在低压低密度环境,雷诺数为 10^2 ~ 10^3 量级,流动具有复杂的 3 维特性,因此应用 3 维层流 N-S 方程描述流动过程,考虑对流、粘性耗散和分子扩散。

化学反应采用基元反应模型,考虑 I_2, I_2^*, I, I^*, $O_2(^1\Delta)$, $O_2(^1\Sigma)$, $O_2(^3\Sigma)$, H_2O, Cl_2 和 N_2 共 10 种组分,21 个基元反应[8]。

采用考虑浓度驱动机制和压力驱动机制的 Ramshaw-Dukowicz 多组分扩散输运公式,其中扩散系数通过等效双元扩散模型计算得到。

1.3 数值方法

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[9],包括分子扩散、粘性效应和热传导项的耗散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

模拟中主流为 $O_2(^1\Delta)$, $O_2(^3\Sigma)$, H_2O 和 Cl_2 的混合物,分别是单重态氧、基态氧、水蒸气和氯气,摩尔配比为 0.67∶1.0∶0.107∶0.16。副流为 I_2 和 N_2 的混合物,摩尔配比参考不同流量配比。具体参数见表 1,其中下标 p 代表主流,s 代表副流。

表 1 模拟采用的计算条件

Table 1 Computational condition applied in the simulation

$\dot{n}_{O_2(^1\Delta)}$: $\dot{n}_{I_2}$	n_{I_2} : n_{N_2}	p_p/kPa	T_p/K	M_p	p_s/kPa	T_s/K	M_s
25	1∶37.3	5.5	315	0.177	12	319	1.0
50	1∶87.2	5.5	315	0.177	12	319	1.0
15	1∶18.7	5.5	315	0.177	40	319	1.0

2.2 基本参考物理量的定义

I_2 分解率、I 泵浦率以及 $O_2(^1\Delta)$ 生成率的计算公式为

$$\eta_d = \frac{\rho_I + \rho_{I^*}}{\rho_{I_2} + \rho_{I_2^*} + \rho_I + \rho_{I^*}} \tag{1}$$

$$\eta_p = \frac{\rho_{I^*}}{\rho_I + \rho_{I^*}} \tag{2}$$

$$\eta_s = \frac{\rho_{O_2(^1\Delta)}}{\rho_{O_2(^1\Delta)} + \rho_{O_2(^1\Sigma)} + \rho_{O_2(^3\Sigma)}} \tag{3}$$

激光功率与小信号增益系数有重要的关系,具体表达式为

$$g = \sigma\left([I^*] - \frac{1}{2}[I]\right) = \frac{A\lambda^3}{8\pi}\sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}}\,\frac{7}{12}\left([I^*] - \frac{1}{2}[I]\right) \tag{4}$$

式中: 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 为玻耳兹曼系数; T 为绝对温度。

2.3 亚声速段射流

图 2 为氧碘流量配比为 25 的结果(各参量的分布曲线组中,单条曲线代表不同的横向位置处的流向或纵向分布),可见碘分子完全分解,单重态氧产率与泵浦率达到 35% 和 55%。碘在喷口附近快速完全分解,在此区域形成 4.0% cm^{-1} 的高增益。随后由于激发态碘原子释能以及单重态氧产率下降,在喷管恒压区增益下降为 0.4% ~ 1.0% cm^{-1}。

为充分利用高增益区域,提高氧碘流量配比到 50 以延缓化学反应速度[10]。图 3 显示碘的分解反应仍然在喷口附近迅速启动,在短距离内被完全分解。进入喉道下游段后,单重态氧产率维持在 50% 左右,泵浦率平均达到 70%。增益系数在恒压区内为 0.5% ~ 1.0% cm^{-1},与氧碘流量配比为 25 时大致相同。喷口附近增益下降到 3.0% cm^{-1}。

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

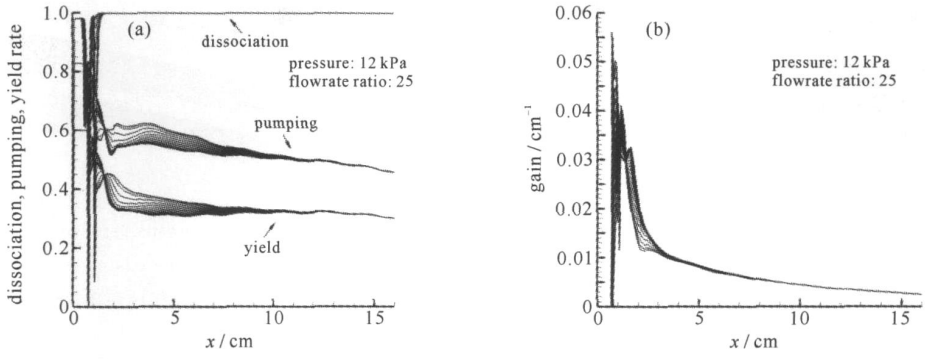

Fig. 2　Distribution of yield, dissociation, pumping rate and gain at $j = 30$ gridline along x

图 2　氧碘流量配比为 25 时产率、分解率、泵浦率和增益系数在 $j = 30$ 的流向分布

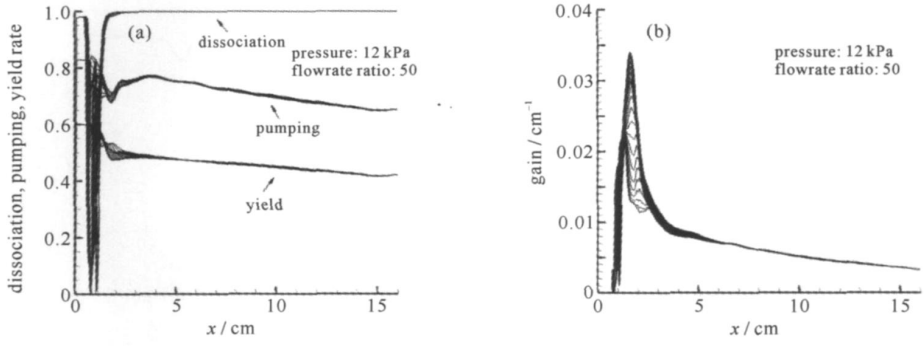

Fig. 3　Distribution of yield, dissociation, pumping rate and gain at $j = 30$ gridline along x

图 3　氧碘流量配比为 50 时产率、分解率、泵浦率和增益系数在 $j = 30$ 的流向分布

由于流动速度降低, 分解反应在喷孔处全部完成, 在喷管恒压区内主要是基态碘原子与激发态碘原子间的相互反应。氧碘流量配比进一步增加可以得到更高的泵浦率, 但碘原子数将进一步减小, 抑制增益升高。因此, 在单重态氧一定时改变氧碘流量配比无法提高亚声速段射流方式下系统的增益性能。在以氮气为载气的 COIL 体系中分解反应受限不再是影响增益生成的主要因素[10], 亚声速段射流方式已经不再适用, 其造成激射介质在亚声速区域富集, 光腔位置处无法得到高增益, 应考虑在超声速段进行射流。

2.4　超声速段射流

图 4(a) 是射流小孔对称面(xy 平面) 上的速度矢量图, 图 4(b) 是 $x = 3.0$ cm 处的涡量分布图, 可见射流轨迹达到 $y = 0$ 竖直对称面附近, 穿透深度足够。

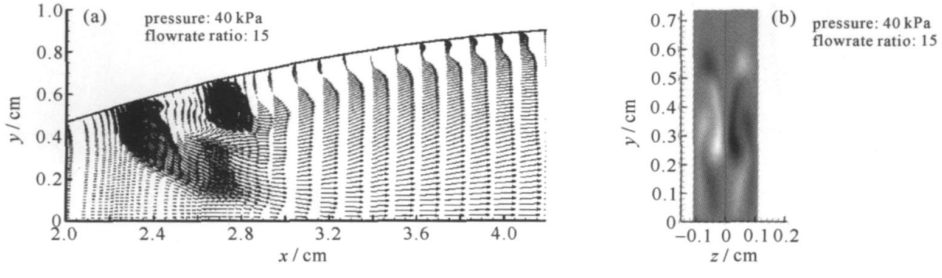

Fig. 4　Velocity vectors at the symmetric plane of the small orifice and vortices distribution at $x = 3.0$ cm

图 4　氧碘流量配比为 15 时小孔对称面上的速度矢量图与 $x = 3.0$ cm 的涡量图

对密度进行 y 向梯度计算, 得到图 5 所示的模拟纹影图, 显示了密度梯度剧烈变化的位置, 斜激波结构在喷管喉道下游 8 cm 长度内明显可见。

图 6 中的泵浦率波动正是斜激波所造成的。产率在喷管中大于 30%, 高于单重态氧阈值产率, 分解率曲线迅速上升并达到 100%, 表现出流动速度降低的影响。在喷管下游各项参数的横向与流向分布趋于均匀。

$$0.76\exp(401.4/T) = \frac{[I(^2P_{1/2})][O_2(^3\Sigma)]}{[I(^2P_{3/2})][O_2(^1\Delta)]} \tag{5}$$

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

式(5)是平衡态下 I 与 I^* 浓度之间的相互关系。图 6(b)显示在流动方向由于化学反应放热,温度不断升高,说明平衡系数降低造成上述单重态氧阈值产率上升以及泵浦率降低。

图 7(a)显示增益系数沿流向逐渐降低,同样受斜激波影响出现波动。在 $x = 6$ cm 处,增益值为 1.5% cm^{-1} 左右,碘虽在短距离内被快速完全分解,产生的高增益仍可加以利用。流场下游段增益不断下降,直到喷口处的 0.6% cm^{-1}。增益的纵向分布见图 7(b),表现出少许的纵向与横向波动,平均在 1.2% cm^{-1} 以上。以氮气为载气的 COIL 系统在近壁面附近的填充性能明显增强,原因在于雷诺数的变化。雷诺数计算公式为

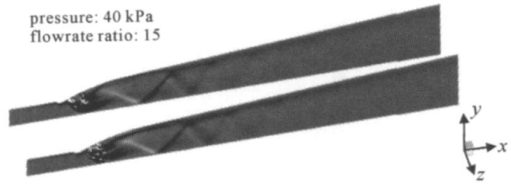

Fig. 5 Distribution of density gradient in y direction at the symmetric plane of both large and small orifices

图 5 氧碘流量配比为 15 时大小孔对称面上的密度梯度(y 向)分布图

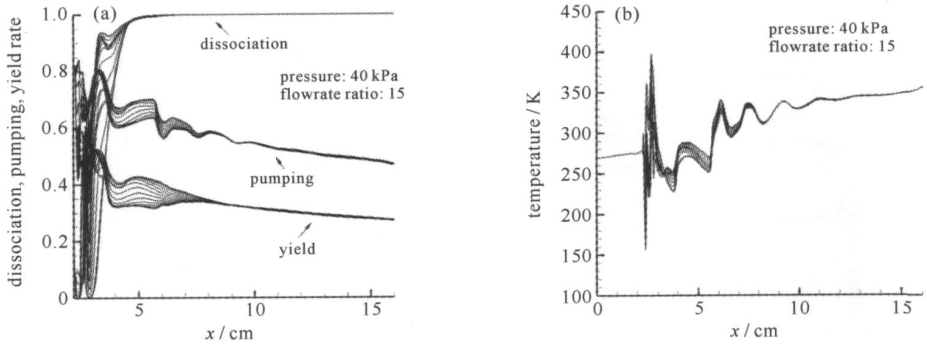

Fig. 6 Distribution of yield, dissociation, pumping rate and temperature at $j = 21$ gridline along x

图 6 氧碘流量配比为 15 时产率、分解率、泵浦率和温度在 $j = 21$ 的流向分布

$$Re = \rho v L/\mu \propto \sqrt{\frac{\gamma p^2 W}{R_0 T}} L/\mu \tag{6}$$

式中:ρ 为密度;v 为速度;L 为特征长度;μ 为粘性系数;γ 为比热容比;p 为压力;W 为分子量;R_0 为气体常数。与氦气相比,氮气分子量上升,Re 大约增大 2.65 倍,边界层厚度变小。

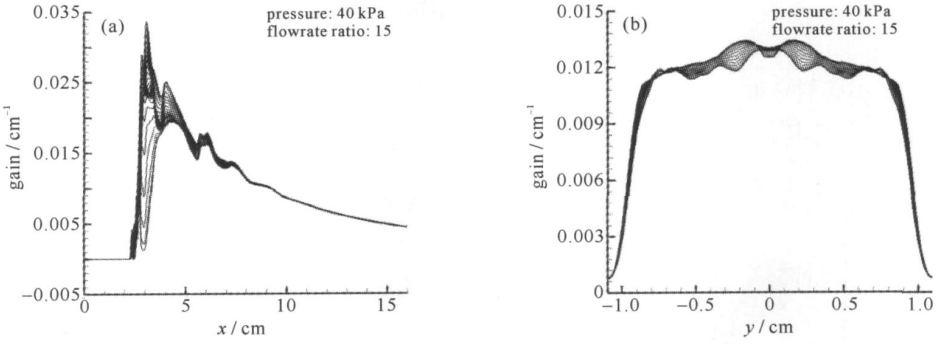

Fig. 7 Gain distribution at $j = 21$ gridline along x and at $i = 250$ gridline along y

图 7 增益系数在 $j = 21$ 沿流向的分布和在 $i = 250$ 的纵向分布

图 8(a)是根据 I 浓度计算得到的平均混合效率沿流向的分布,计算公式为

$$\eta_{mix} = \frac{\int_{-H/2}^{H/2} x_I(y)\,dy}{(x_I)_{max} H} \tag{7}$$

式中:x_I 为 I 原子的浓度,其正比于 I_2 的浓度;H 为此流向位置喷管的纵向高度。喷口附近的混合效率较低,通过喉道进入喷管后缓慢上升到 50% 左右。进入恒压区后,混合效率平均在 75% 以上。

增益纵向与横向分布的相对标准差见图 8(b),计算公式为

$$\overline{g}_i = \sum_{k=1}^{k_{max}-1} \sum_{j=1}^{j_0-1} 0.25(g_{i,j,k} + g_{i,j+1,k} + g_{i,j,k+1} + g_{i,j+1,k+1}) \frac{(y_{i,j+1,k} - y_{i,j,k})(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k})}{(y_{i,j_0,k} - y_{i,1,k})(z_{i,j,k_{max}} - z_{i,j,1})} \tag{8}$$

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

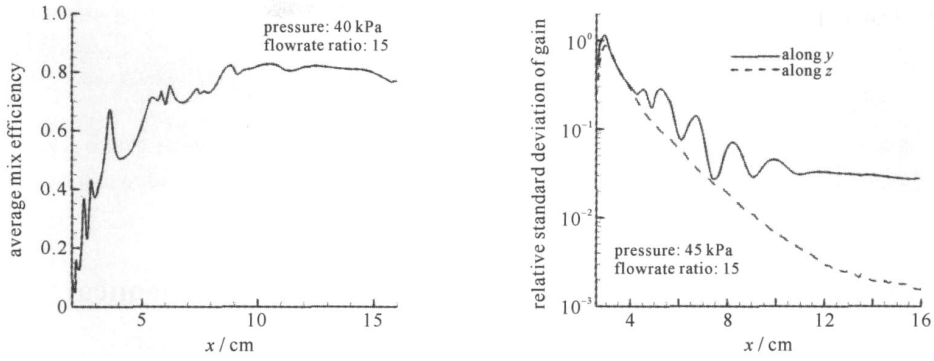

Fig. 8　Mix efficiency along x and standard deviation of gain along y and z

图 8　混合效率与增益分布相对标准差

$$g_{avg} = \sum_{i=i_0}^{i_{max}-1} 0.5(\bar{g}_i + \bar{g}_{i+1}) \frac{(x_{i+1,j,k} - x_{i,j,k})}{(x_{i_{max},j,k} - x_{i_0,j,k})} \tag{9}$$

式(9) 中 g_{avg} 表示增益平均值, 此处公式皆以网格大小为权求得平均值。

$$\bar{g}_{i,k} = \sum_{j=1}^{j_0-1} 0.5(g_{i,j,k} + g_{i,j+1,k}) \frac{(y_{i,j+1,k} - y_{i,j,k})}{(y_{i,j_0,k} - y_{i,1,k})} \tag{10}$$

$$\delta_{y_{i,k}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{j_0-1} 0.5[(g_{i,j,k} - \bar{g}_{i,k})^2 + (g_{i,j+1,k} - \bar{g}_{i,k})^2] \frac{(y_{i,j+1,k} - y_{i,j,k})}{(y_{i,j_0,k} - y_{i,1,k})}} \tag{11}$$

$$\bar{\delta}_{y_i} = \sum_{k=1}^{k_{max}-1} 0.5(\delta_{y_{i,k}} + \delta_{y_{i,k+1}}) \frac{(z_{i,j,k+1} - z_{i,j,k})}{(z_{i,j,k_{max}} - z_{i,j,1})} \tag{12}$$

式中: δ 代表相对标准差。z 向求解公式与 y 向类似。图 8 显示横向分布标准差逐渐减小, 分布均匀性不断加强, 3 维效应几乎消失。纵向分布的标准差在喷管前部出现跳跃, 在 $x = 10$ cm 后逐渐稳定, 在 0.04~ 0.05 之间, 与文献[10] 得到的结果相比较小, 说明纵向分布的均匀性可以达到要求。

3　结　论

本文以求解 3 维 N-S 方程并耦合化学反应与扩散方程的计算流体力学方法, 模拟了主流无载气式氧碘化学激光使用氮气为载气的混合与反应过程。得到以下结论: 亚声速段射流方式不适用于 N_2-COIL, 必须采用在超声速段进行射流的配气方式; 喷管中流动马赫数的降低与温度的升高造成单重态氧阈值产率上升, 泵浦率沿流向降低; 载气变更后边界层厚度明显减小, 拓宽了增益的有效分布区域; 合理的流量配比条件下, 光腔处增益可以达到 1.5% cm^{-1} ~ 2.0% cm^{-1}, 且纵向与横向分布均匀。

参考文献:

[1] McDermott W E, Pchelkin N R, Benard D J, et al. An electronic transition chemical laser[J]. *Appl Phys Lett*, 1978, **32**: 469-470.

[2] Yang T T, Bhowmik A, Burde D, et al. 20 kW nitrogen diluent chemical oxygen-iodine laser, high-power laser[C]//Proc of SPIE. 2002, **4760**: 537-549.

[3] Furman D, Barmashenko B D, Rosenwaks S. An efficient supersonic chemical oxygen-iodine laser operating without buffer gas and with simple nozzle geometry[J]. *Appl Phys Lett*, 1997, **70**(18): 2341-2343.

[4] 房本杰, 桑凤亭, 陈方, 等. 以氮气为载气COIL 的设计与实验[J]. 强激光与粒子束, 2003, **15**(12): 1148-1150. (Fang Benjie, Sang Fengting, Chen Fang, et al. Design and experimental results of 2 kW COIL with nitrogen buffer gases. *High Power Laser and Particle Beams*, 2003, **15**(12): 1148-1150)

[5] 房本杰, 陈方, 张岳龙, 等. 以氮气为载气的千瓦级 COIL 的初步实验研究[J]. 强激光与粒子束, 2002, **14**(3): 337-340. (Fang Benjie, Chen Fang, Zhang Yuelong, et al. Experimental investigation on kilowatts COIL with SPJSOG and nitrogen buffer gases. *High Power Laser and Particle Beams*, 2002, **14**(3): 337-340)

[6] 吕俊明, 胡宗民, 王春, 等. 氧碘化学激光器超声速段射流工作方式性能的数值研究[J]. 强激光与粒子束, 2009, **21**(9): 1305-1309. (Lü Junming, Hu Zongmin, Wang Chun, et al. Numerical study on performance of COIL with supersonic jet in supersonic section. *High Power Laser and Particle Beams*, 2009, **21**(9): 1305-1309)

[7] Madden T J. Aspects of 3-D chemical oxygen-iodine laser simulation[C]//Proc of SPIE. 2003, **5120**: 363-375.

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

[8] Paschkewtiz J, Shang J, Miller J, et al. An assessment of COIL physical property and chemical kinetic modeling methodologies[R]. AIAA Paper-2000-2574, 2000.

[9] Jiang Zonglin, Takayama K, Chen Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications[J]. *Comp Fluid Dynamics Journal*, 1995, **4**(2): 137-150.

[10] 吕俊明,王春,姜宗林. COIL 基于小信号增益系数的最佳流量配比选择[J]. 强激光与粒子束, 2008, **20**(10): 1593-1596. (Lü Junming, Wang Chun, Jiang Zonglin. Optimization of flow rate ratio of primary to secondary flow in COIL based on gain distribution. *High Power Laser and Particle Beams*, 2008, **20**(10): 1593-1596)

Numerical optimization of jet location in N_2- chemical oxygen iodine laser without primary buffer gas

Lü Junming[1], Jiang Zonglin[2], Yuan Xiangjiang[1], Wang Qiang[1]

(1. *China Academy of Aerospace Aerodynamics, Beijing* 100074, *China;*

2. *Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100190, *China*)

Abstract: 3-D Navier-Stocks equation with multi species and chemical reaction process was applied with CFD method on the chemical oxygen iodine laser(COIL) model using nitrogen as diluents gas to investigate the detailed flow field and the coupling between physical and chemical process, especially the appropriate mixing technique. It is found that mixing by jet in the subsonic section is inapplicable to the N_2-COIL without primary buffer gas; jet in supersonic is necessary and with the appropriate flow rate ratio, the small signal gain could reach 1.5% cm^{-1} in the position of cavity; the efficient area of gain is widened since the thickness of boundary layer is reduced as the result of mixture weight increase.

Key words: chemical oxygen iodine laser; without primary buffer gas; nitrogen; gain; jet in supersonic section; boundary layer

© 1994-2011 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net