

连续波 DF 化学激光器的数值模拟研究 ——不同燃料和稀释剂的性能差异

华卫红 姜宗福 赵伊君

(国防科技大学应用物理系 长沙 410073)

提要 采用有限差分技术和压缩比例计算方法,对分别以 H_2 和 C_2H_4 作燃料、以 He 和 N_2 作稀释剂的燃烧驱动连续波 DF 激光器进行了数值模拟,给出了 DF 化学激光器燃烧室的平衡化学组分、光腔内平均小信号增益沿流场分布、激射谱线的强度分布、激光器功率和效率。计算结果表明:以 C_2H_4 作燃料、以 He 作稀释剂的 DF 化学激光器具有较长的可调节激活区,激光器的化学效率高,并且其激射谱线的强度分布更为集中。

关键词 连续波 DF 激光器,数值模拟,小信号增益,激活区

1 引言

从 1964 年报道化学激光以来,许多物理、化学家对化学激光所涉及的基础理论及技术问题进行了大量的系统研究^[1],燃烧驱动连续波(CW)HF/DF 激光器是其中被研究得最为系统的化学激光之一。有关这类激光器的基础理论问题已基本解决。目前亟待解决的是这类激光器在工程实用化过程中所遇到的众多技术难题,其中包括高腔压运转的实现,高功率条件下的气动窗口等。这些技术问题的研究需要理论和实验的紧密结合,理论研究为实验方案的提出、实验装置的设计提供了有意义的指导,实验测量到的技术参数又反过来改进理论研究的模型。随着电子计算机技术的发展,数值模拟已成为理论研究的一个有效手段,美国和俄罗斯科学家在这方面做了大量的工作。美国的 BLAZE 计算程序^[2]能够给出非稳腔激光器的性能和光束质量等重要参数,但没有考虑光腔入口流场的非均匀性。由于喷管结构对反应气体的混合速率影响较大,与化学激光器的性能直接相关,最近俄罗斯科学家发展了一套更细致的模拟程序,首次考虑了喷管与光腔流场之间的相互作用,对平面平行腔化学激光器的性能进行了研究^[3,4],该程序作适当修改之后,就可用来模拟不同燃料、不同稀释剂的 DF/HF 化学激光器的运转情况。本文是在俄罗斯化学激光数值模拟程序的基础上,用 $C_2H_4-NF_3-D_2$ 反应体系替换了 $F_2-H_2-D_2$ 反应体系,对国内目前正在实验中的一种 DF 化学激光器进行了全面系统的数值模拟,研究了在使用不同燃料和不同稀释剂条件下激光器性能的变化。

2 DF 化学激光器结构

燃烧驱动型 CW DF 化学激光器的结构如图 1 所示,主要包括燃烧室、喷管组件、光腔和

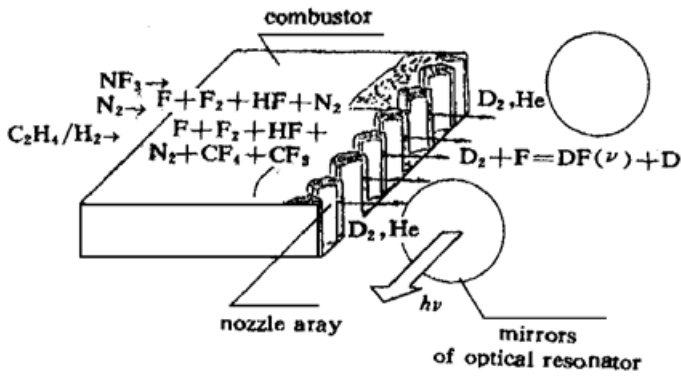


图 1 DF 化学激光器结构图

Fig. 1 Sketch of the DF chemical laser

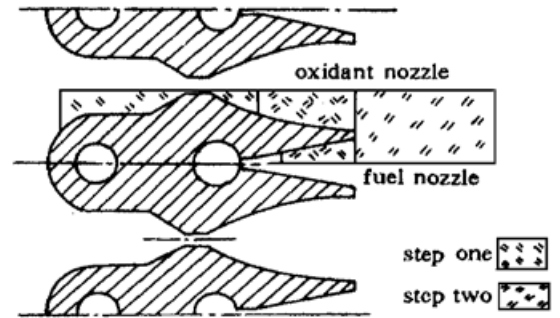


图 2 喷管结构简图和计算区域

Fig. 2 Sketch of nozzle arrays and the field of calculation

真空排气系统等 4 个部分。燃烧室的主要作用在于通过一定的化学反应产生 F_2 分子,并由反应放出的热解离 F_2 分子产生 F 原子。燃烧后反应生成物的成分,特别是 F 原子的产生效率,对激光器的性能具有至关重要的影响。我国在 1996 年以前一般采用产生 F 原子效率较高的 H_2 作燃料,而从我们了解到的情况知道,国外在 高能 DF 激光器中采用的是产生 F 原子效率并不高的 C_2H_4 作燃料。那么 C_2H_4 到底有什么优越性呢?此外,对于 He 和 N_2 两种经常采用的惰性稀释剂,早期的电弧加热超音速扩散型 DF/HF 激光器的实验和理论研究表明,以 N_2 作稀释剂时所产生的 DF 激光的功率仅为对应 HF 功率的 75%。但是改用 He 作稀释剂的实验,从两种介质中可以抽取出同样多的功率^[5]。这就是说,对于以 N_2 作稀释剂的电弧加热型 DF 化学激光器,如果用稀释剂 He 代替稀释剂 N_2 ,激光器的输出耦合功率可以提高 1.33 倍。那么,对于以 H_2 和 C_2H_4 作燃料的燃烧驱动 DF 化学激光器是否也有相同的结论呢?本文将对分别以 H_2 和 C_2H_4 作燃料、以 N_2 和 He 作稀释剂的 DF 化学激光器的性能进行研究,喷管组件的结构如图 2 所示,它是由氧化剂喷管和燃料喷管交替排列而成的,其中氧化剂喷管和燃料喷管都是楔型的拉瓦尔喷管。燃烧室反应后含有 F 原子的混合气体经氧化剂喷管注入光腔,而 D_2 及稀释剂则由燃料喷管注入。喷管组件的作用之一是提供有效激射的环境,将高温、高压的燃烧室与低温、低压的光腔隔开;作用之二是提高氧化剂气流和燃料气流的速度,使之达到超音速,以便拉长激活区的长度。光腔为氧化剂射流和燃料射流提供了反应空间,本文采用法布里-珀罗光腔模型,它与非稳腔除功率、效率有所不同之外,激光器的其它性能均相同^[6],比如激活区起始位置、谱线强度分布等等。

3 计算方法

为了便于比较,我们将所研究的 DF 激光器分为 4 类,如表 1 所示。表 1 中的代码 a-1 表

表 1 DF 化学激光器的分组

Table 1 Classification of DF chemical lasers

diluent	fuel	
	H_2	C_2H_4
N_2	a-1	b-1
He	a-2	b-2

示以 H_2 作燃料、以 N_2 作稀释剂, $b-2$ 表示以 C_2H_4 作燃料、以 He 作稀释剂等等。本文中所讨论的不同种类的稀释剂仅限于氧化剂喷管, 燃料喷管中所采用的稀释剂均为 He , 这样做是为了便于同实验结果进行比较。

3.1 燃烧室中平衡组分的计算

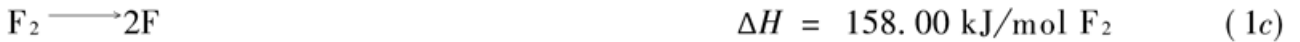
燃烧室中 $\text{H}_2/\text{C}_2\text{H}_4$ 与过量的 NF_3 混合, 发生强烈的放热反应, F_2 被解离, 以 H_2 作燃料的放热反应为



以 C_2H_4 作燃料的放热反应为



F_2 的解离反应为



由(1a)可知, 以 H_2 作燃料, 燃烧后灼热的混合气体由 F , F_2 , HF , N_2 以及稀释剂等组成。由(1b)可知, 以 C_2H_4 作燃料, 燃烧后灼热的混合气体由 F , F_2 , HF , N_2 , CF_4 以及稀释剂等组成。

我们采用最小自由能法来计算燃烧室中的平衡组分。每千克混合物的吉卜斯自由能为

$$g = \sum_{j=1}^n \mu_j n_j \quad (2)$$

其中 n_j 为 j 组分的摩尔质量比, μ_j 为 j 组分的每千克摩尔的化学势, 根据完全气体假设有

$$\mu_j = \begin{cases} \mu_j^0 + RT \ln(n_j/n) + RT \ln P_{\text{atm}} & (j = 1, \dots, m) \\ \mu_j^0 & (j = m + 1, \dots, n) \end{cases} \quad (3)$$

μ_j^0 的数值可以从 JANAF 的热力学数据表上取得^[7], $j = 1$ 到 m 为气体组分, $j > m$ 为凝结相组分。利用质量平衡作为约束条件, 根据化学平衡自由能达到最小的平衡条件, 由拉格朗日方法就可以求得温度、压力确定的热力学状态下的平衡组分。

由于燃烧前后温度变化比较大, 燃烧室的平衡组分就不能由温度、压力所确定的热力学状态来计算, 假设燃烧过程是等压绝热的, 我们就可以用由焓 h_0 、压力 P_0 确定的热力学状态来计算, 即

$$h = h_0 \quad P = P_0 \quad (4)$$

其中 h, P 分别为混合物的焓和压力, h_0, P_0 分别为反应物的焓和压力。而

$$h = \sum_{j=1}^n n_j (H_T^0)_j \quad (5)$$

这里的 $(H_T^0)_j$ 为 j 组分的标准焓, 标准焓值可以从 JANAF 表上获取^[7]。

3.2 喷管及光腔流场的计算

考虑到喷管流场与光腔流场之间的相互作用, 喷管流场和光腔流场的计算可以分两步进行: 氧化剂喷管和燃料喷管的流场计算和光腔流场的计算(包括氧化剂喷管和燃料喷管的超音速部分)。选择两相邻喷管对称面之间区域作为计算单元, 计算区域如图 2 所示。由第一步计算得到的氧化剂喷管和燃料喷管的流场参数, 将作为第二步光腔流场计算的初始条件^[8,9]。

3.2.1 喷管流场的计算

DF 激光器中的氧化剂喷管和燃料喷管都是 LAVAL 喷管, 具有典型的跨音速流场, 我们用平面对称二维 Navier-Stokes 方程组来描述喷管中的多组分混合气体。控制方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho V}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V V) + \nabla P - \nabla \cdot \tau = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\rho H - P)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V H) + \nabla \cdot q - \nabla \cdot (\tau \cdot V) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho C_K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V C_K) + \nabla \cdot J_K - \sum_{s=1}^{N_r} \omega_{Ks} = 0 \quad (K = 1, \dots, N) \quad (9)$$

其中 N 为混合气体的组分数, 方程采用压缩比例方法(Compressible Scaling Method)求解^[3,4], CS 方法通过调节时间偏导系数矩阵中的比例因子, 消除了方程在 M_0 趋近于 0 时的病态特性, 是求解跨音速流场的有效方法。

3.2.2 光腔流场的计算

C_2H_4 与 NF_3 燃烧后, 混合气体经氧化剂喷管注入光腔同由燃料喷管注入光腔的 D_2 和 He 混合, F 原子同 D_2 发生泵浦反应, 生成振动激发态 DF 分子, 形成粒子数反转, 产生受激辐射。假设 DF 各振动态分子是独立的化学成分, 每个振动能级上的转动粒子数满足平衡分布, 辐射发生在增益系数最大的振转能级上, 且每个振动能级仅有一条谱线。光腔中多组分混合气体的化学非平衡过程及受激辐射过程可以用有激射的二维 Navier-Stokes 方程组来描述^[9], 只要以方程(10)代替方程(8), 增加方程(11)即可:

$$\frac{\partial (\rho H - P)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V H) + \nabla \cdot q - \nabla \cdot (\tau \cdot V) + \sum_{K=1+N}^{N_V+1+N} \alpha_K I_K = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho C_K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V C_K) + \nabla \cdot J_K - \sum_{s=1}^{N_r} \omega_{Ks} - \left[\frac{m_{HF}}{h N_A} \right] \cdot \left[\frac{\alpha_K I_K}{\gamma_K} - \frac{\alpha_{K-1} I_{K-1}}{\gamma_{K-1}} \right] = 0 \quad (11)$$

($K = N + 1, N + N_V + 1$)

其中 N_V 为 DF 分子的最高振动能级。化学反应受扩散速率限制, 以 C_2H_4 作燃料的 DF 激光器, 其化学反应动力学模型与以 H_2 作燃料的略有不同, 主要是增加了 CF_4 , CF_3 和 CF_2 分子对振动激发态 DF 分子的碰撞去激活反应。

4 计算结果

4.1 不同燃料和稀释剂对燃烧室化学平衡组分的影响

由(1)式可知, 以 H_2 作燃料燃烧所产生的热能是 $142 N_{NF_3}^\circ$ kJ/s, 而以 C_2H_4 作燃料燃烧所产生的热能是 $370 N_{NF_3}^\circ$ kJ/s, 其中 $N_{NF_3}^\circ$ 表示 NF_3 的摩尔流率。即在 NF_3 的摩尔流率相同的条件下, 以 C_2H_4 作燃料燃烧所产生的热能是以 H_2 作燃料燃烧的 2 倍多。由于燃烧室的关键作用在于产生尽可能多的 F 原子, 理论计算结果表明根据(1)式中所给的 H_2 和 NF_3 以及 C_2H_4 和 NF_3 的摩尔比并不能产生最高浓度的 F 原子, 经过大量的计算我们得到了混合气体中 F 原子的

含量较高的 H_2 和 NF_3 以及 C_2H_4 和 NF_3 的最佳摩尔比, 如表 2 所示。表 3 给出了四种计算条件

表 2 计算得到的各组最佳配比

Table 2 Calculated optimal mixture ratio in different conditions

	H_2	C_2H_4	NF_3
$a-1, a-2$	1		1.4
$b-1, b-2$		1	7.2

下燃烧后混合气体的温度、平均分子量和各组分的摩尔比。由表 3 可见, 用 C_2H_4 作燃料的混合气体温度要比用 H_2 作燃料的略高一些; 以 He 作稀释剂的混合气体温度又比以 N_2 作稀释剂的要高。高温有利于 F_2 分子的分解, 但由于用 C_2H_4 作燃料, 反应后生成的 CF_4 消耗了部分 F 原子, 因此混合物中的 F 原子含量要比用 H_2 作燃料低。

表 3 混合气体的特性参数

Table 3 Characteristics of mixing gas ($P=1.87$ atm component units: molar ratio)

	F	F_2	HF	N_2	He	CF_4	CF_3	molecular weight	temperture/K
a-1	0.2743	0.0009	0.3544	0.3704				22.712	1928
a-2	0.2745	0.0007	0.3544	0.1051	0.2653			16.339	2120
b-1	0.1202	0.0001	0.1193	0.7008		0.0596		29.553	1987
b-2	0.1210		0.1192	0.0796	0.6206	0.0594	0.0002	14.629	2419

4.2 不同燃料对 DF 化学激光器性能的影响

图 3 和图 4 给出了在以 N_2 作稀释剂的条件下, 不同燃料对 DF 化学激光器性能的影响, 图 3 比较了两种激光器的平均小信号增益。图 3 (a), (b), (c) 分别对应于 $V=1-V=0$, $V=2-V=1$, $V=3-V=2$ 的三种不同振动-转动跃迁。由图 3 可见, 以 C_2H_4 作燃料的激光器, 其激活区长度约是以 H_2 作燃料的激光器的两倍, 小信号增益的峰值也略低于以 H_2 作燃料的激光器。这一结果表明, 以 C_2H_4 作燃料燃烧的 DF 化学激光器有利于实现高腔压运转。因为在高腔压条件下, 激活区会大大缩短, 只有在低腔压条件下具有足够长的激活区, 才能保证在高腔压运转条件下仍有一定的输出功率。图 4 给出了两种不同燃料激光器的激射谱线强度分布。图 4 (a), (b), (c) 分别对应于 $V=1-V=0$, $V=2-V=1$, $V=3-V=2$ 的三种不同振动-转动跃迁。由图 4 可见, 以 H_2 和 C_2H_4 作燃料的激光器的较强跃迁都集中在转动量子数 $J=8, 9$ 的谱线上, 其中以 C_2H_4 作燃料的激光器的激射谱线比较集中, 而以 H_2 作燃料的激光器的激射谱线则相对比较分散, 且激射跃迁多位于转动量子数较高的谱线上。

4.3 不同稀释剂对 DF 化学激光器性能的影响

图 5 比较了采用不同稀释剂的 DF 化学激光器的激光辐射强度, 图 5 (a), (b) 分别对应于

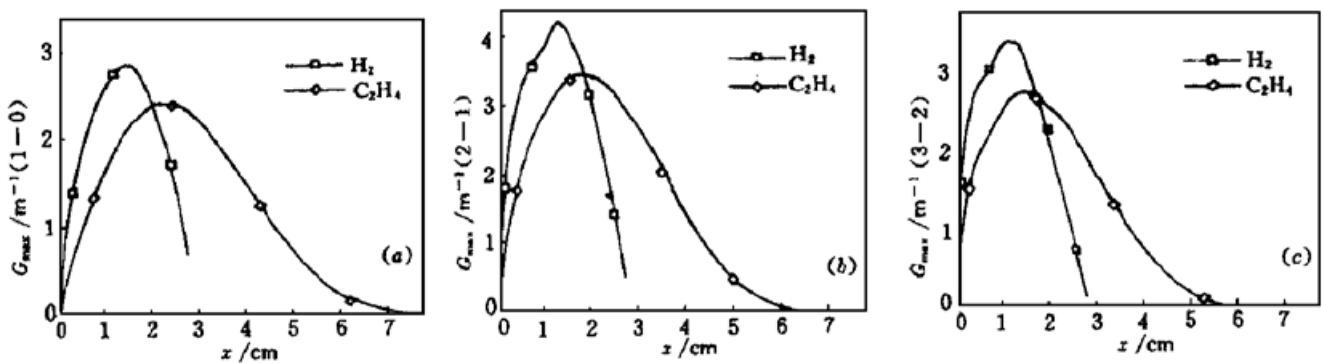


图 3 不同燃料的小信号增益

(a) $V=1-V=0$ 跃迁的最大小信号增益(a-1, b-1);

(b) $V=2-V=1$ 跃迁的最大小信号增益(a-1, b-1); (c) $V=3-V=2$ 跃迁的最大小信号增益(a-1, b-1)

Fig. 3 Small signal gain (SSG) of different fuels

(a) maximum SSG of $V=1-V=0$ lasing band (a-1, b-1);

(b) maximum SSG of $V=2-V=1$ lasing band (a-1, b-1); (c) maximum SSG of $V=3-V=2$ lasing band (a-1, b-1)

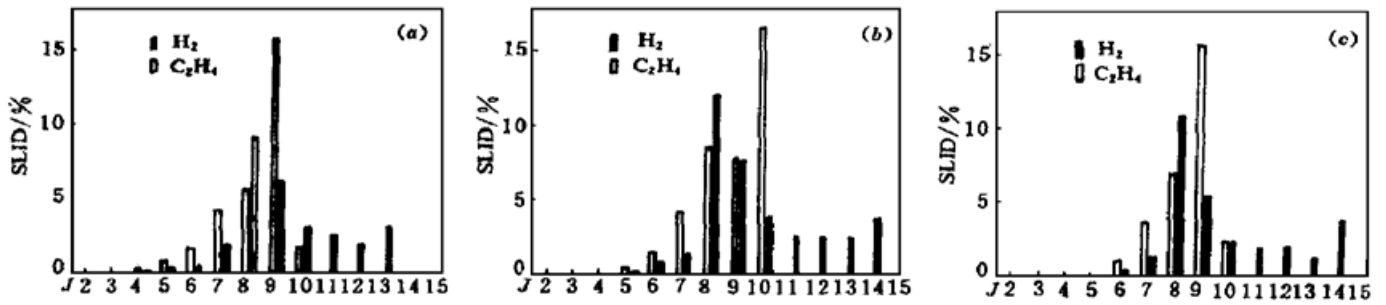


图 4 不同燃料的谱线强度分布

(a) $V = 1 - V = 0$ 跃迁的谱线强度分布(a-1, b-1);(b) $V = 2 - V = 1$ 跃迁的谱线强度分布(a-1, b-1); (c) $V = 3 - V = 2$ 跃迁的谱线强度分布(a-1, b-1)

Fig. 4 Spectral line intensity distribution (SLID) of different fuels

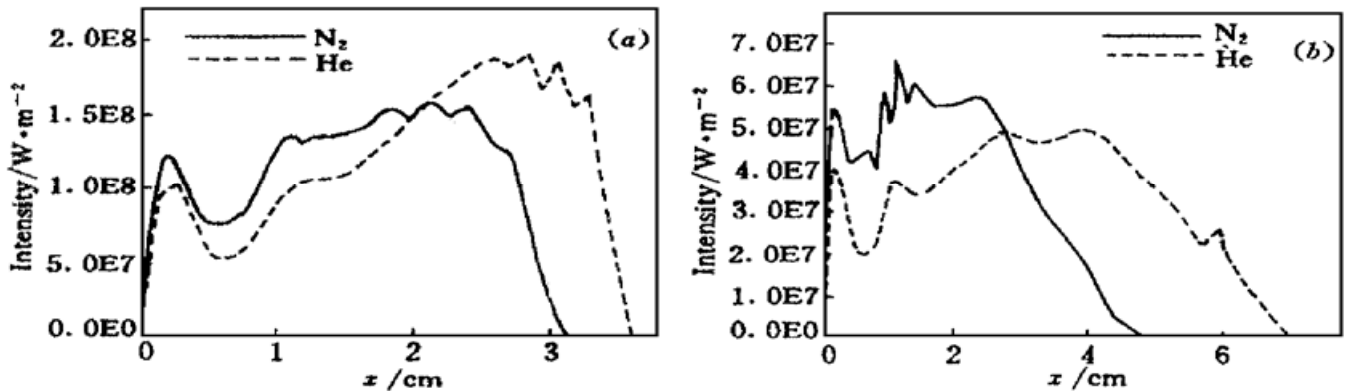
(a) SLID of $V = 1 - V = 0$ lasing band (a-1, b-1);(b) SLID of $V = 2 - V = 1$ lasing band (a-1, b-1); (c) SLID of $V = 3 - V = 2$ lasing band (a-1, b-1)

图 5 光腔内平均辐射强度沿流场的分布

(a) 以 H_2 作燃料 (a-1, a-2); (b) 以 C_2H_4 作燃料 (b-1, b-2)

Fig. 5 Radiation intensity distribution along the flow field in the optical cavity

(a) H_2 is used as fuel (a-1, a-2); (b) C_2H_4 is used as fuel (b-1, b-2)

以 H_2 作燃料和以 C_2H_4 作燃料的激光器。由图可见, 对于以 He 作稀释剂的激光器, 其激活区长度均比以 N_2 作稀释剂的激光器的激活区长, 其中以 H_2 作燃料的激光器激活区增加了 0.6 cm, 以 C_2H_4 作燃料的激光器激活区长度增加了约 2 cm, 激活区长度增加的大小不仅与光腔入口射流的马赫数大小有关, 而且与稀释剂的比例及混合气体各组分的碰撞去激活速率有关。He 和 N_2 对振动激发态的 $DF(v)$ 分子的去激活速率差异较大, 一般地对于反应 $DF(v) + He - DF(v-1) + He$, 其速率常数为 $2 \times 7.8 \times 10^{-7} v T^5$, 对于反应 $DF(v) + N_2 - DF(v-1) + N_2$, 其速率常数为 $(4.1 \times 10^{12}/T + 3.2 \times 10^4 T^2) v$, 其中 v 为振动量子数^[11]。以 $T = 300$ K, $v = 2$ 为例, 可以求得 $k_{He} = 7.58 \times 10^6$, $k_{N_2} = 3.3 \times 10^{10}$ 。 N_2 的去激活速率常数比 He 大得多, 因此以 N_2 作稀释剂的 DF 激光器其激活区长度比以 He 作稀释剂要短。

4.4 不同燃料和稀释剂对激光器的功率和效率的影响

表 4 给出了 DF 化学激光器在使用不同燃料和稀释剂条件下的功率和效率。表 4 的计算结果表明, 对于不同燃料的 DF 化学激光器, 无论采用哪种稀释剂, 以 C_2H_4 作燃料的激光输出耦合功率都比以 H_2 作燃料的要低, 但激光器的化学效率比较高; 对于不同稀释剂的 DF 化学

激光器, 无论采用哪种燃料, 以 He 作稀释剂的激光输出耦合功率均比以 N₂ 作稀释剂的要高, 但提高幅度不如电弧加热型 DF 化学激光器, 约提高 1.1 倍, 相应的化学效率也有不同程度的下降。

表 4 输出功率和化学效率

Table 4 Output power and chemical efficiency

	a-1	a-2	b-1	b-2
output/(10 ⁵ W)	8.316	9.957	4.18	5.66
efficiency/%	9.298	9.197	13.14	11.41

5 结 论

通过对分别以 H₂ 和 C₂H₄ 作燃料、以 N₂ 和 He 作稀释剂的燃烧驱动连续波 DF 化学激光器的喷管及光腔流场的数值模拟, 全面比较了使用不同燃料和不同稀释剂条件下的激光器性能, 给出了以 H₂ 和 C₂H₄ 作燃料、以 N₂ 和 He 作稀释剂的 DF 化学激光器光腔流场的气动特性、小信号增益和激射谱线的强度分布。计算结果表明: 尽管以 H₂ 作燃料时 F 原子的产生率和激光功率比以 C₂H₄ 作为燃料时要高, 但以 C₂H₄ 作燃料时激光器的化学效率高, 且其激活区长度比以 H₂ 作燃料时要长得多, 这对实现激光器的高腔压运转是十分有利的, 只有实现 DF 化学激光器的高腔压运转, 才有可能将其应用于国防。此外, 计算结果还表明采用 N₂ 和 He 两种不同稀释剂, DF 化学激光器的输出耦合功率并无明显变化。这主要是由于无论采用哪种气体作稀释剂, 燃烧驱动的 DF 激光器燃烧室中的反应产物都含有一定量的 N₂。就燃烧驱动连续波 DF 激光器而言, 以 He 作稀释剂时的最显著的优点是其激活区长度可以通过改变 He 的质量流量进行调节, 特别是对于以 C₂H₄ 作燃料的激光器, 效果尤为明显。而以 N₂ 作稀释剂时却很难做到这一点^[10]。因此以 He 作稀释剂对于实现高腔压运转是极为有利的。综合以上的计算结果得到, 以 C₂H₄ 作燃料、以 He 作稀释剂的 DF 化学激光器在实现激光器的高腔压、高效率运转方面有较大的优越性。

参 考 文 献

- 1 R. W. F. Gross, J. F. Bott. Handbook of Chemical Lasers. Beijing: Science Press. 1987, 338~ 358 (in Chinese)
- 2 Robert E. Waldo, W. J. Schafer. Advanced cw hydrogen fluoride chemical laser performance. *SPIE*, 1993, **1871**: 252~ 264
- 3 Yu. E. Egorov, M. A. Rotinn, M. Kh. Strelets *et al.*. Navier-Stokes simulation of supersonic combustion in CW chemical laser with account of upwind influence of cavity processes on nozzle array flow. *Numerical Methods in Thermal Problems* —, 1991, Pt. 2: 1185~ 1195
- 4 M. L. Shur. Compressibility scaling method for arbitrary mach number Navier-Stokes simulation of internal reactive gas mixture flow. p1526~ 1536, 7th, Int. Conf. Numer. Meth. in Laminar and Turbulent Flow, 7, Pineridge Press, 1991
- 5 D. J. Spencer, H. Mirels, D. A. Durran. Performance of cw HF chemical laser with N₂ or He diluent. *J. Appl. Phys.*, 1972, **43**(3): 1151~ 1157
- 6 L. H. Sentman. Chemical laser power spectral performance: a coupled fluid dynamic, kinetic, and physical optics model. *Appl. Opt.*, 1978, **17**(14): 2244~ 2249

- 7 Anon., JANAF thermochemical tables, 2nd ed., U. S. Standard Reference Data System NSRDS-NBS 37, 1971
- 8 Weihong Hua, Zongfu Jiang, Yijun Zhao. Nozzle design in cw hydrogen fluoride chemical laser. *High-power Lasers SPIE*, 1996, **2889** : 135~ 140
- 9 Hua Weihong, Jiang Zongfu, Zhao Yijun. Numerical study of the 3-slot cw HF chemical laser. *Chinese Journal of Lasers* (中国激光), 1997, **A24**(3) : 221~ 227 (in Chinese)
- 10 Zongfu Jiang, Weihong Hua, Yijun Zhao. The effect on the cw hydrogen deuterium fluoride chemical laser with different diluents. *High-power Lasers SPIE*, 1996, **2889** : 141~ 146

Numerical Simulation of CW DF Chemical Lasers

——Performance of Different Fuels and Diluents

Hua Weihong Jiang Zongfu Zhao Yijun

(Department of Applied Physics, National University of Defence Technology, Changsha 410073)

Abstract Finite-difference technology and compressible scaling method (CSM) are used to the simulation of the combustion driven CW DF chemical lasers. Different fuels (H_2 and C_2H_4) and different diluents (He and N_2) are calculated. The components of mixing gas in the combustor, small signal gain, line intensity distribution of optical cavity, output power and chemical efficiency of lasing are given. The results showed that: the lasing zone of the DF chemical laser is longer and much easy to adjust when C_2H_4 is used as fuel and He as diluent, the chemical efficiency is higher, and the line intensity distribution is more converged.

Key words CW DF chemical laser, numerical simulation, combustor, lasing zone