

超音速化学氧碘激光器能量提取对流场影响的数值研究

贾淑芹 怀 英 吴克难 金玉奇 桑凤亭

(中国科学院大连化学物理研究所中国科学院化学激光重点实验室, 辽宁 大连 116023)

摘要 超音速化学氧碘激光器(SCOIL)是一个集气体流动过程、化学反应过程和光学过程相互耦合的复杂系统。在激光能量提取过程中,光能的输出会导致流动增益介质各组分浓度及气动特性的改变。利用计算流体力学软件耦合傍轴波动方程求解程序,实现了三维 Navier-Stokes 流场控制方程与波动光学方程的全三维耦合计算,研究了出光过程中超音速流场及化学反应过程的变化。结果表明,此计算方法有效解析了能量提取过程对激光器流场、化学场诸参量的动态影响,光能提取过程促使气流中的单重态氧不断地提供抽运能量而被更快地消耗;在不同的提取效率下,腔内温度在光能提取前后的变化情况不同。

关键词 激光器;化学氧碘激光器;数值仿真;能量提取

中图分类号 TN248.5 文献标识码 A doi: 10.3788/CJL201239.0402001

Numerical Study of Effects of Power Extraction on Flow Fields in Supersonic Chemical Oxygen Iodine Lasers

Jia Shuqin Huai Ying Wu Kenan Jin Yuqi Sang Fengting

(Key Laboratory of Chemical Lasers, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Dalian, Liaoning 116023, China)

Abstract Supersonic chemical oxygen iodine laser is a complex process including flow, chemical reactions and lasing. In process of power extraction, output of laser has a direct influence on flow fields and species, which will affect beam quality and power of lasers. Influence of power extraction on inner flow field of the laser has been numerically investigated based on computational fluid dynamic coupling procedures of paraxial wave function. Numerical results show that as power extraction process takes place, consumption of singlet delta oxygen is enhanced since pumping reaction is accelerated, concentration of iodine molecule is elevated, and changing direction of intracavity temperature via power extraction process depends on extraction efficiency. Intracavity temperature arises in high extraction efficiency cases and decreases in low extraction efficiency cases. Computational method in this paper provides an effective tool for research and development of chemical oxygen iodine lasers.

Key words lasers; chemical oxygen iodine laser; numerical simulation; power extraction

OCIS codes 140.1340; 140.1550; 140.3460

1 引 言

超音速化学氧碘激光器(SCOIL)是直接把化学能转化为激光能的系统^[1]。SCOIL工作时,谐振腔内的光场与超音速流动的气体增益介质发生相互作用。其中,光能的提取对流场内介质组分的分布以及相互间的化学反应产生影响,同时引起流场温度、

压强等气动参量的变化,进而会影响到激光光束质量和功率水平等重要指标。因此,分析光能提取过程对 SCOIL 内流场气动参量及介质组分的动态影响,对进一步理解 SCOIL 内的物理和化学过程,以及改进有关元器件设计具有重要意义。

在 SCOIL 中,光能提取过程涉及到谐振腔内的

收稿日期: 2011-11-02; 收到修改稿日期: 2011-12-28

基金项目: 国家自然科学基金(20903087)资助课题。

作者简介: 贾淑芹(1984—),女,博士研究生,主要从事化学激光器方面的研究。E-mail: jiashuqin@dicp.ac.cn

导师简介: 桑凤亭(1942—),男,研究员,主要从事化学激光器方面的研究。E-mail: sft@dicp.ac.cn

光场振荡以及增益介质的流动和抽运传能过程。因此,研究光能提取过程对流场的影响,首先需要实现 SCOIL 流场与光场的实时耦合计算,以便动态地反映两者之间的相互作用。目前,国内学者大多在不考虑功率提取的情况下,对 SCOIL 内流场的相关特性进行研究,并取得一定进展^[2~6]。例如, Huai 等^[2]采用大涡模拟方法研究了增强 SCOIL 内混合的措施,吕俊明等^[3]研究了 SCOIL 超声速段射流情况下喷管内的流动及混合情况,薛社生等^[4]模拟了 SCOIL 内超音速流动过程中的水气凝结效应等。国外学者针对 SCOIL 的功率提取过程开展了理论和数值仿真方面的研究^[7~9]。Hager 等^[7]利用 Fabry-Perot 谐振腔模型描述 SCOIL 的增益饱和过程,对功率提取过程进行了理论研究,但该方法以温度、密度等流动参量不变为前提,并未考虑流场的动态变化影响,Buggeln 等^[8]基于 MINT 软件实现了流场与光场的耦合计算,研究了 SCOIL 内的混合和功率提取过程,但该研究是假定光强在沿光轴方向不同横截面上的分布不变,并非严格意义上的全三维计算。本文突破了国内以往诸多在非出光情况下对 SCOIL 的设计分析研究,在前期工作的基础上^[10,11],编写了相关程序,实现了三维 Navier-Stokes 流场控制方程与傍轴波动方程在谐振腔内的全三维耦合计算,基于数值计算结果,分析了在出光过程中,SCOIL 内的流动和化学反应过程。研究了光能提取所导致的 SCOIL 内流场的动态变化,解析了介质组分和流场气动参量在光能提取前后的衍变情况。

2 控制方程

典型的 SCOIL 运行在低温低压的流场环境。气体增益介质的多种组分在喷管内传输的同时进行混合并开始化学反应。SCOIL 利用喷管将增益介质加速后射入光腔区域,利用谐振腔实现激光能的提取和输出,从而完成化学能到光能的转化。喷管和光腔区域的流动过程,包含有激波和边界层脱离等复杂的三维湍流流场结构。为了准确模拟 SCOIL 内的流动和化学过程,采用了三维可压缩 Navier-Stokes 方程、能量方程以及组分输运方程的守恒形式,在直角坐标系下表示为

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \Phi}{\partial x} + \frac{\partial \rho v \Phi}{\partial y} + \frac{\partial \rho w \Phi}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S_{\text{chem}} + S_{\text{rad}}, \quad (1)$$

式中 ρ 为密度, u 、 v 和 w 分别代表了 x 、 y 和 z 三个方向上的速度分量, Φ 为通用变量,可以代表速度、能量、组分浓度等求解变量, Γ 为扩散系数, S_{chem} 为化学反应源项, S_{rad} 为辐射通量源项。由于 SCOIL 通过激发态碘原子 $I^* (^2P_{1/2})$ 向基态碘原子 $I (^2P_{3/2})$ 的跃迁实现受激辐射,因此在能量方程以及 $I^* (^2P_{1/2})$ 和 $I (^2P_{3/2})$ 的组分输运方程上添加了 S_{rad} 进行修正^[8],表示为

$$S_{\text{rad}} = \begin{cases} -\frac{W_1 g \bar{I}}{N_A h \nu}, & \text{excited iodine atoms} \\ \frac{W_1 g \bar{I}}{N_A h \nu}, & \text{ground-state iodine atoms} \\ -g \bar{I}, & \text{energy equation} \end{cases} \quad (2)$$

对于其他控制方程, S_{rad} 为零。(2)式中 g 为增益,满足 $g = \sigma [c [I^* (^2P_{1/2})] - 0.5c [I (^2P_{3/2})]]$, $\sigma = 1.6 \times 10^{-16} / \sqrt{T}$ 为受激发射截面^[1], $c [I^* (^2P_{1/2})]$, $c [I (^2P_{3/2})]$ 代表 $I^* (^2P_{1/2})$ 和 $I (^2P_{3/2})$ 的粒子数密度。 W_1 为碘原子的摩尔质量, $h\nu$ 是波长为 $1.315 \mu\text{m}$ 的光子摩尔能量 (90956 J/mol), \bar{I} 代表光腔内的双向总光强。

利用傍轴波动方程描述谐振腔内的光场分布^[11],其表达式为

$$\frac{j}{2k} \left(\frac{\partial^2 u^+}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^+}{\partial y^2} \right) + \frac{g}{2} u^+ \mp \frac{\partial u^+}{\partial z} = 0, \quad (3)$$

式中 k 为波数, $u^+ (x, y, z)$ 代表谐振腔内正、反方向传播的光场复振幅。双向总光强 \bar{I} 则满足 $\bar{I} = |u^+|^2 + |u^-|^2$ 。

3 数值方法

流场三维 Navier-Stokes 方程的求解利用计算流体软件 FLUENT 完成,将辐射通量源项 S_{rad} 对应不同控制方程以函数的形式编译程序。通过 FLUENT 的用户自定义功能进行函数的加载和调用,实现光场与流场的耦合计算。

光学傍轴波动方程采用快速傅里叶变换方法求解^[11,12],流场内化学反应产生的增益在光场传输过程中沿光轴方向虚拟为不同的增益面,当光场在腔内往返传播时,依次经过这些增益面。光场每经过一个增益面时,根据增益分布计算放大后的光场,相邻两个增益面之间的传播则按照自由空间传播计算。

要实现三维 Navier-Stokes 方程与傍轴波动方程的耦合求解,流场与光场的数据传递是需要解决

的重要问题。光场和流场的计算方法对网格的要求不同,在光场求解中需要根据光斑大小和波长等确定均匀的网格,而流场计算则需要近壁区设置比较细密的网格。因此在流场和光场的求解中采取不同的网格大小和布局,两者之间的信息交换通过二维插值算法实现。利用自编程序实现光场的求解以及计算流体软件的数据传递。

根据二维喷管的对称性,选取半个喷管通道及相应的光腔部分作为计算区间,如图 1 所示。其中 x 为气体流动方向, y 为光轴方向, z 为喷管高度方向。喷管高度为 0.037 m,沿气流方向的光腔长度为 0.05 m,沿光轴方向增益区长度为 0.4 m,其他尺寸见图中标注。光学谐振腔为虚共焦非稳腔,腔镜口径为 0.04 m。数值计算采用有限体积方法进行空间离散,其中 xz 向(光腔切面方向)采用均匀网格, xy 向(喷管膨胀面)采用边缘加密网格以反映壁面影响。

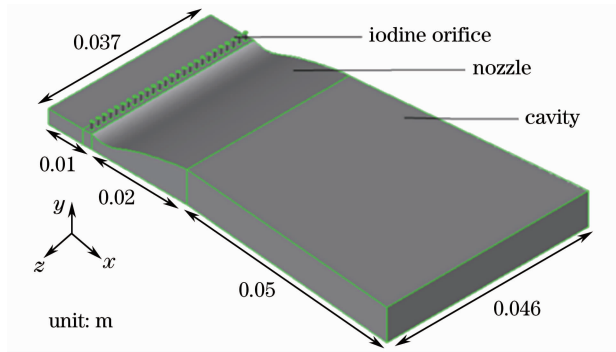


图 1 计算区间

Fig. 1 Computational domain

计算中,主流为单重态氧、基态氧、水蒸气、氯气和氦气的混合气,副流为碘和氦气的混合气,流场边界条件采用压力匹配条件,具体设置见表 1,化学反应采用层流有限率法模型,根据 Arrhenius 定律计算反应速率,21 个反应动力学过程参见文献[13]。

表 1 边界条件

Table 1 Boundary conditions

	Primary flow			Secondary flow			
Temperature /K	250			400			
Pressure /Pa	4666			18665			
Species	$O_2(^3\Sigma)$	$O_2(^1\Delta)$	H_2O	Cl_2	He	$I_2(^1\Sigma)$	He
Mass fraction /%	22	30	8	15	25	45	55

4 计算结果与讨论

通过光场与流场的耦合计算,得到归一化输出光强、小信号增益及饱和增益分别如图 2、3 所示。

可以看出,输出光强为典型的环形光斑,流动方向上游的输出光强高于下游,与小信号增益沿流动方向逐渐下降的趋势一致。图 3 中小信号增益沿流动方向下降的原因主要为单重态氧的不断消耗,如图 4 所示,下游区域的抽运反应速率降低,导致粒子数反

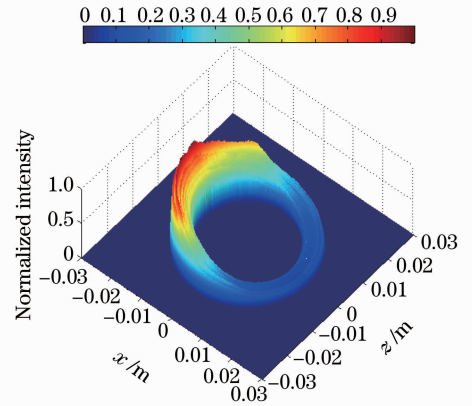


图 2 近场输出归一化光强

Fig. 2 Normalized output intensity distribution of near-field

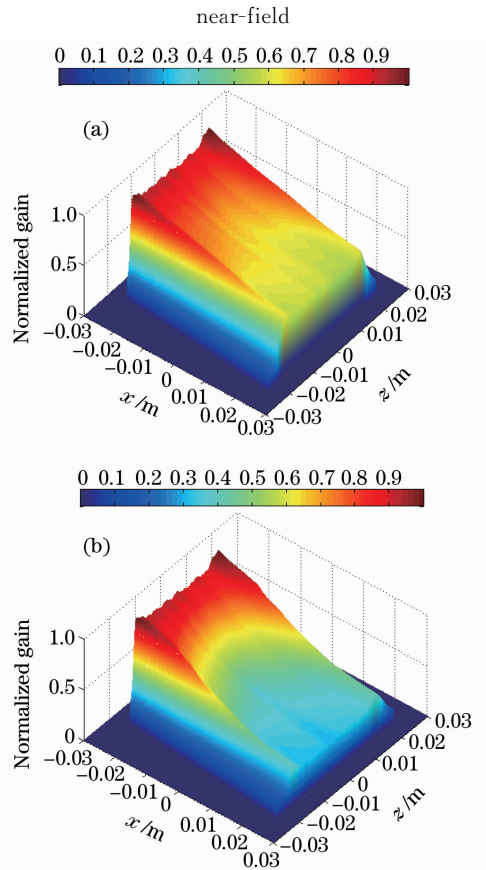


图 3 功率提取前后光腔内平均增益在光腔切面方向上的分布。(a)小信号增益;(b)饱和增益

Fig. 3 Averaged gain at cavity cross-section before and after power extraction. (a) Small signal gain; (b) loaded gain

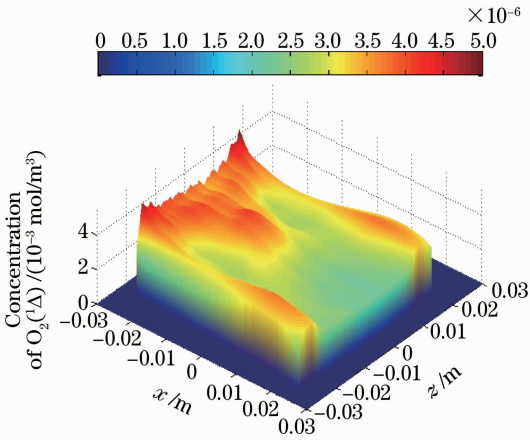


图 4 光能未被提取时的单重态氧浓度
Fig. 4 Concentration of $O_2(^1\Delta)$ without power extraction

转程度降低。图 3(b)中饱和增益分布呈现出与圆形光斑对应的凹陷,符合增益饱和效应的物理过程。沿流动方向小信号增益是下游的 1.43 倍,与所在实验室以往对小信号增益进行测量的 1.125

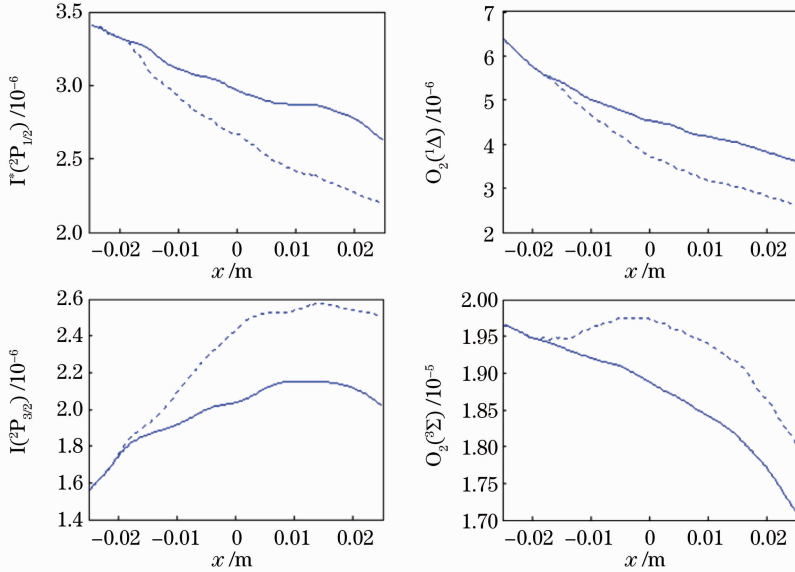
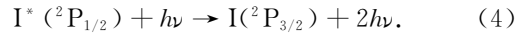


图 5 增益介质在功率提取前(实线)后(虚线)沿流动方向的平均浓度
Fig. 5 Averaged concentration of gain mediums before (solid line) and after (dotted line) power extraction along flow direction before and after power extraction

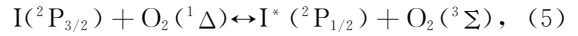
SCOIL 增益介质中的碘原子来源于副流中碘分子的解离,图 6 为光能提取前后碘分子沿流动方向的分布情况。数值计算结果揭示出,碘分子到达光腔入口($x = -0.02$ m)时并未完全解离,直至光腔上游($x = -0.01$ m)处才解离完全。光腔内碘分子浓度在光能提取后上升,其原因在于,光能提取降低了 $O_2(^1\Delta)$ 的浓度,使得 $O_2(^1\Delta)$ 对碘分子的解离反应速率降低,从而导致与提取前相比碘分子的浓

度^[14],以及文献[15]中 1.1 倍的测量结果相比稍微偏大,主要是由于仿真采用的碘与氯气的流量比值偏大,导致增益集中在流动方向的上游以及输出光斑上下游的差距^[14]。

饱和增益和小信号增益分布之间的差异,体现了光能提取对流动介质带来的影响。图 5 对比了光能提取前后增益介质中 $I^*(^2P_{1/2})$ 、 $I(^2P_{3/2})$ 、 $O_2(^1\Delta)$ 、 $O_2(^3\Sigma)$ 等组分浓度沿流动方向的分布。可见,随着光能提取, $I^*(^2P_{1/2})$ 的浓度明显下降, $I(^2P_{3/2})$ 的浓度则明显增加,这表明 $I^*(^2P_{1/2})$ 通过受激辐射跃迁为 $I(^2P_{3/2})$:



同时,由于 $I^*(^2P_{1/2})$ 的能量直接来源于 $O_2(^1\Delta)$ 的近共振传能抽运反应,



因此光能提取过程将促使气流中的 $O_2(^1\Delta)$ 不断地提供抽运能量而被消耗,而抽运反应产物 $O_2(^3\Sigma)$ 的浓度则相应升高。

度升高。

为了分析光能提取对气动参量的影响,比较了在以上条件和在更高提取效率情况下,温度沿流动方向的变化情况,如图 7 和图 8 所示。可见,在不同的提取效率下,光腔内温度在能量提取前后的变化情况并不相同。这是因为,SCOIL 光腔内的温度升高主要是由化学反应放热引起的,而主要放热反应包括近共振传能抽运反应(5),水蒸气对 $O_2(^1\Delta)$ 的

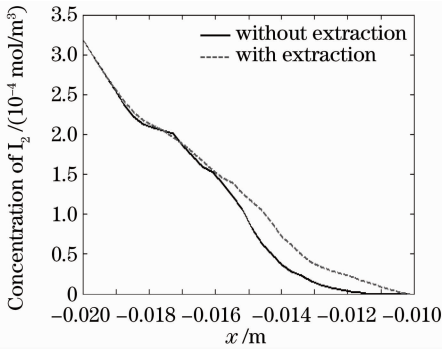
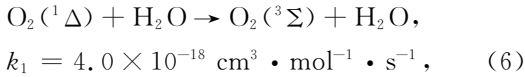
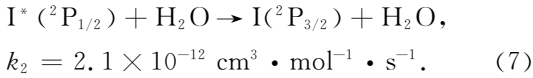


图 6 碘分子在光能提取前后的平均浓度
Fig. 6 Averaged concentration of iodine molecular before and after power extraction

淬灭反应



以及水蒸气对 $\text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$ 的淬灭反应^[16]



当存在光能提取时,一方面,受激辐射促进了近共振传能反应的加速进行,使得 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 与 $\text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$ 之间 279 cm^{-1} 的能级差以热量的形式释放到流场,加剧了流场内温度的升高;另一方面,由于辐射作用引起光腔内 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 和 $\text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$ 的浓度降低,这将会减弱淬灭反应的程度,降低淬灭反应放热对温度升高的影响。光腔内温度的升高是两种放热效应的综合结果,在图 7 所示提取效率较低的情况下,抽运反应的放热效应在整个光腔区域内占主导地位,因此光能提取后温度升高;而在图 8 中因提取效率较高,在上游区域抽运反应放热更为剧烈,导致光能提取后上游温度升得更高,同时 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 消耗更为迅速,但在下游区域,却由于 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 已经接近耗尽,淬灭反应显著减弱,使得温度反而降低。由于流场温度与其他流动参量(如速度、压强等)存在相互关联,因

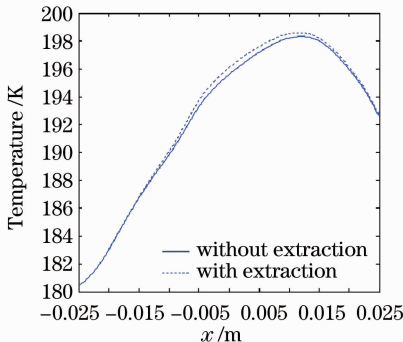


图 7 光腔内平均温度沿流动方向的变化
Fig. 7 Averaged temperature along flow direction

此这些流动参量也会相应地变化,其中压强的变化趋势与温度相同,速度的变化趋势则与温度相反。

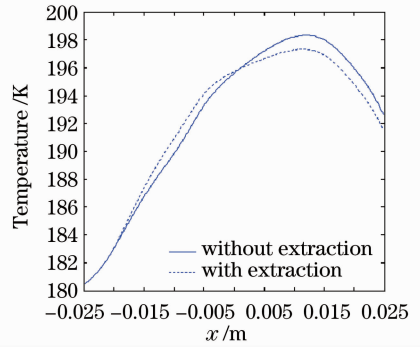


图 8 提取效率提高后,光腔内平均温度沿流动方向的变化

Fig. 8 Averaged temperature along flow direction in higher extraction efficiency boundary conditions

5 结 论

利用计算流体软件耦合傍轴波动方程求解程序,实现了对 SCOIL 出光过程中超音速流动过程及化学反应过程的数值研究,解析了光能提取过程对 SCOIL 内流场及化学场的动态影响。结果表明,光能提取过程将促使气流中的 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 不断地提供抽运能量而被更快地消耗;光能提取会导致碘分子的浓度升高;在不同的提取效率下,腔内温度在光能提取前后的变化情况并不相同,提取效率较低时整个光腔内的温度升高,而提取效率较高时上游温度升高而下游温度降低。利用所建立的耦合计算方法和仿真平台,可以有效地解析出激光器的增益饱和和效应,分析能量提取过程中各介质组分和气动参量的衍变。

参 考 文 献

- Sang Fengting, Jin Yuqi, Duo Liping. Chemical Laser and Application[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2006
桑凤亭, 金玉奇, 多丽萍. 化学激光及其应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006
- Huai Ying, Jia Shuqin, Jin Yuqi. Analysis and optimization of mixing process with large eddy simulation: an application to SCOIL[J]. *AIAA Paper*, 2009, **4066**: 1~9
- Lü Junming, Hu Zongmin, Wang Chun *et al.*. Numerical study on performance of COIL with supersonic jet in supersonic section [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2009, **21**(9): 1305~1309
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
- Xue Shesheng, Li Shouxian, Shu Xiaojian. Numecial simulation of COIL supersonic flows with vapor condensation [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2007, **19**(11): 1802~1806
薛生, 李守先, 束小建. COIL 超声速流动的水气凝结效应数

- 值模拟[J]. 强激光与粒子束, 2007, **19**(11): 1802~1806
- 5 Wang Jie, Weng Chunsheng, Yin Yanhua *et al.*. Numerical simulation of flow field at entrance of nozzle bank in chemical laser[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2011, **48**(10): 93~98
王 杰, 翁春生, 尹燕华 等. 化学激光器喷管阵列入口流场的数值模拟[J]. 激光与光电子学进展, 2011, **48**(10): 93~98
- 6 Li Liucheng, Duo Liping. Simulations of chemical atomic iodine generator based on NCl_3/I_2 [J]. *Chinese J. Lasers*, 2010, **37**(11): 2838~2843
李留成, 多丽萍. 基于 NCl_3/I_2 体系的化学发生碘原子源数值模拟研究[J]. 中国激光, 2010, **37**(11): 2838~2843
- 7 G. D. Hager, C. A. Helms, K. A. Truesdell *et al.*. A simplified analytic model for gain saturation and power extraction in the flowing chemical oxygen-iodine laser [J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1996, **32**:1525~1536
- 8 R. C. Buggeln, S. Shamroth, A. I. Lampson *et al.*. Three-dimensional(3-D) Navier-Stokes analysis of the mixing and power extraction in a supersonic chemical oxygen iodine laser(COIL) with transverse I_2 injection[J]. *AIAA Paper*, 1994, **2435**: 1~18
- 9 T. T. Yang. Chemical oxygen iodine laser performance modeling [J]. *AIAA Paper*, 1997, **2384**: 1~28
- 10 Jia Shuqin, Huai Ying, Jin Yuqi *et al.*. Coupling simulation of flow and optical fields in supersonic chemical oxygen-iodine lasers [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2009, **46**(9): 59~63
贾淑芹, 怀 英, 金玉奇 等. 超音速化学氧碘激光器流场与光场耦合仿真的研究[J]. 激光与光电子学进展, 2009, **46**(9): 59~63
- 11 Wu Kenan, Jia Shuqin, Huai Ying *et al.*. Coupled simulation of flow and optical power extraction in chemical oxygen-iodine lasers [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2011, **23**(8): 2005~2010
吴克难, 贾淑芹, 怀 英 等. 化学氧碘激光内流动与光能提取耦合仿真[J]. 强激光与粒子束, 2011, **23**(8): 2005~2010
- 12 E. A. Sziklas, A. E. Siegman. Mode calculations in unstable resonators with flowing saturable gain. 2: fast Fourier transform method[J]. *Appl. Opt.*, 1975, **14**(8): 1874~1889
- 13 J. Paschkewitz, J. Shang, J. Miller *et al.*. An assessment of COIL physical property and chemical kinetic modeling methodologies[C]. Presented at 31st AIAA Plasmadynamics and Lasers Conference, Denver, CO, 19~22 June, 2000
- 14 Duo Liping, Sang Fengting, Yang Boling *et al.*. The experimental study of the two dimensional distribution of the small signal gain for supersonic chemical oxygen iodine laser[J]. *Chinese J. Lasers*, 1997, **A24**(4): 289~292
多丽萍, 桑风亭, 杨柏龄 等. 超音速化学氧碘激光器小信号增益二维分布的实验研究[J]. 中国激光, 1997, **A24**(4): 289~292
- 15 R. F. Tate, B. S. Hunt, C. A. Helms *et al.*. Spatial gain measurements in a chemical oxygen iodine laser (COIL) [J]. *IEEE J. Quantum Electron.*, 1995, **31**(9): 1632~1636
- 16 Du Yanyi, Shu Xiaojian, Li Shouxian. Effects of heat release from near-resonant energy transfer on chemical oxygen-iodine laser[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(7): 1224~1227
杜燕贻, 束小建, 李守先. 近共振传能放热对氧碘化学激光器性能的影响[J]. 光学学报, 2007, **27**(7): 1224~1227

栏目编辑: 宋梅梅