

文章编号: 1001-3806(2007)04-344-04

## 氧碘化学激光器射流数值模拟方法研究

张黎, 叶正寅\*, 王刚

(西北工业大学 翼型叶栅空气动力学国防科技重点实验室, 西安 710072)

**摘要:** 为了研究氧碘化学激光器喷流流场流动情况, 采用数值方法求解二维可压缩非定常 Navier-Stokes 方程及组分连续方程, 空间离散格式为 AUSM+up 格式, 用四步龙格-库塔方法作显式时间推进, 湍流粘性系数使用  $k-\epsilon$  两方程湍流模型进行求解。假设混合气体为热力学完全而热值非完全气体, 化学反应模型采用有限速率反应模型。使用一种松弛迭代的方法来处理化学源项的刚性问题。计算了一个标准算例, 结果与美国 GASP 程序计算结果符合良好。对氧碘化学激光器流场进行了二维数值模拟, 研究了该激光器中激发态氧初始产额、水蒸气含量以及不同喷管数目对增益分布的影响。结果表明, 除水和增加激发态氧初始产额都可使小信号平均增益增大, 采用两个碘喷管比采用一个碘喷管能够获得更大的小信号平均增益。

**关键词:** 激光器; 氧碘化学激光器; 喷流; AUSM+up 格式;  $k-\epsilon$  两方程湍流模型

**中图分类号:** TN248.5 **文献标识码:** A

### Numerical simulation of COIL injection

ZHANG Li, YE Zheng-Yin, WANG Gang

(National Key Laboratory of Aerodynamic Design and Research, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract** In order to study the injection field of a chemical oxygen iodine laser (COIL), the injection flows in supersonic COIL were simulated by solving the Reynolds averaged Navier-Stokes equations and species continuity equations based on four-stage Runge-Kutta time-stepping scheme on structured viscous mesh. The simulations were carried out with AUSM+up scheme employing the  $k-\epsilon$  turbulence model. The finite rate reaction model was employed with thermodynamic perfect gas properties for chemical reaction. The stiffness problem of chemical source was overcome by a relaxation iterative scheme. Transverse  $\text{He-I}_2$  injection test case was simulated with this method. The results were in good agreement with the result of AeroSoft's GASP. The supersonic COIL flows with  $\text{He-I}_2$  injection were also simulated. The distribution of the mass fraction and averaged small signal gain were calculated. The results showed that the averaged small signal gain increased with the increasing of  $\text{O}_2(^1\Delta)$  yields or with the decreasing of the water vapor. The averaged small signal gain of a COIL with two spouts is bigger than that of a COIL with one spout.

**Key words** lasers; chemical oxygen iodine laser; injection flows; AUSM+up schemes;  $k-\epsilon$  two equations turbulence model

### 引 言

氧碘化学激光器 (chemical oxygen iodine laser, COIL) 诞生已有 20 余年。它以波长短、效率高、光纤传输性能好等诸多优点, 受到各国专家的关注和重视。这些优点也为化学氧碘激光用于材料切割和焊接或反导弹武器<sup>[1]</sup>应用创造了很好的条件。

COIL 中流动非常复杂, 其入口静压低、气体分子量小以及管道尺寸小的特点使流动雷诺数很低, 因而

边界层厚, 湍流影响大。氧碘化学激光器中的组分超音速混合流动存在的这些复杂现象, 给流动的数值模拟造成诸多难题, 比如组分较多造成控制方程庞大, 混合过程中化学反应会引起数值求解的刚性问题等等。这些问题给方程的耦合求解带来了极大的难度, 对流动参数的精确模拟一直是国内外研究的一大难点。国外较早地开展了对由雷诺平均 Navier-Stokes 方程、湍流模型、化学物理方程构成的联合的数值模拟研究, 数值模拟了亚音速和超音速气流的混合特性、增益和激光特性, 数值计算与实验相结合分析了激波、漩涡、湍流、反应释放热和固壁邻域边界层对气流混合特性和激光发射过程的影响等等。我国学者也对氧碘化学激光器中流动进行了一些计算研究<sup>[2-6]</sup>, 分析了多种因素对激光器性能的影响。

作者在参照了国内外有关工作经验基础上, 通过

基金项目: 教育部高等学校优秀青年教师教学科研奖励计划资助项目

作者简介: 张黎 (1980-), 男, 博士研究生, 主要从事流体力学的研究。

\* 通讯联系人。E-mail: yezy@nwpu.edu.cn

收稿日期: 2006-05-18 收到修改稿日期: 2006-07-06

求解二维可压缩非定常 N-S 方程及组分连续方程对氧碘化学激光器中的湍流流动进行了数值模拟。采用了文献 [7] 中提供的一个标准算例对本文中方法进行了验证, 计算结果与文献中的结果符合良好。并数值研究了 COIL 中  $O_2(^1\Delta)$  初始产额、水蒸气含量已以及不同喷管数目对增益分布的影响, 得出了有用的结论。

## 1 控制方程

二维可压缩非定常 N-S 方程及组分扩散方程<sup>[6]</sup> 直角坐标系下的积分形式为:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_V \rho dS + \oint_{\partial V} F(Q) \cdot n dL = \oint_{\partial V} G(Q) \cdot n dL + \iint_V D dS \quad (1)$$

式中,  $Q = [\rho u, \rho v, \rho e_0, \rho \omega_1, \dots, \rho \omega_N]^T$ ,  $D = [0, 0, 0, 0, \dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_N]^T$ ,  $F(Q)$  为无粘通量,  $G(Q)$  包括粘性通量及扩散项,  $D$  为源项。  $t$  为时间,  $S$  为网格面积,  $L$  为网格边长,  $\rho$  为气体总密度,  $u, v$  表示速度,  $e_0$  表示总能,  $n$  表示投影到 3 个方向的分量,  $\Omega$  和  $\partial\Omega$  为积分域,  $\rho_1, \dots, \rho_N$  为组分气体密度,  $\dot{\omega}_1, \dots, \dot{\omega}_N$  是化学源项, 下标  $i$  和  $N$  表示第  $i$  和第  $N$  个组分。

另外, 热力学混合气体状态方程为:

$$p = \rho R_u T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad (2)$$

式中,  $p$  为压强,  $T$  为温度,  $M_i$  为第  $i$  个组分气体分子量,  $R_u$  为通用气体常数,  $Y_i$  为第  $i$  个组分的质量分率。

方程中的各热力学参数及输运系数求法参见文献 [8]。

## 2 有限反应速率模型

氧碘化学激光器中参加化学反应的粒子组分繁多, 反应复杂, “标准的” COIL 反应系统的反应数多达 53 个。作者采用了 10 组分 12 反应通道化学反应模型<sup>[9]</sup>, 10 组分 12 反应通道模型基本上能够反映 53 个反应系统的浓度变化情况, 又相对比较简单, 有利于简化计算。

质量生成/损耗率为:

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{r=1}^n (v_{r,i}'' - v_{r,i}') \times \left\{ K_{f,r}^* \prod_{j=1}^{j_{r,f}} \left[ \frac{\rho_j}{M_j} \right]^{v_{r,j}'} - K_{b,r}^* \prod_{j=1}^{j_{r,b}} \left[ \frac{\rho_j}{M_j} \right]^{v_{r,j}''} \right\} \quad (3)$$

式中,  $v_{r,i}'$  和  $v_{r,i}''$  为反应物和生成物的化学当量计算系数, 下标  $r$  表示第  $r$  个反应,  $i$  表示第  $i$  个组分,  $j$  表示第  $j$  个组分。化学反应的正反应速率  $K_{f,r}^*$  由文献 [7] 中给出, 平衡常数  $K_{eq,r}^*$  以及逆反应速率  $K_{b,r}^*$  由如下公式求

得, 其中下标  $f$  表示向前,  $eq$  表示平衡,  $b$  表示向后:

$$K_{eq,r}^* = \exp \left[ \frac{\Delta S_{f,i}^0}{R} - \frac{\Delta H_{f,i}^0}{RT} \right] \left( \frac{p_0}{R_u T} \right)^{\Delta n} \quad (4)$$

$$K_{b,r}^* = \frac{K_{f,r}^*}{K_{eq,r}^*} \quad (5)$$

式中,  $p_0 = 1.01 \times 10^5$  Pa (参考压强),  $\Delta n$  为从反应物到生成物的分子改变量。  $\Delta S_{f,i}^0$  为熵,  $\Delta H_{f,i}^0$  为焓,  $R$  为气体常数。

## 3 方程求解

### 3.1 空间离散和时间推进<sup>[10]</sup>

结合生成的结构网格, 采用格心格式的有限体积法离散方程。对无粘通量采用 AUSM+up 格式进行离散, AUSM+up 格式是 LDU 提出并改进的一种迎风型空离散格式, 把无粘通量分为对流项和压力项分别进行分裂处理。粘性项和扩散项采用中心格式进行离散。用四步龙格-库塔显式时间推进方法来求解方程, 同时采用当地时间步长、隐式残值光顺等加速收敛措施。

为了比较准确地模拟湍流流动, 本文中采用  $k-\varepsilon$  两方程模型来计算湍流粘性系数<sup>[11]</sup>。

### 3.2 求解温度的特殊处理<sup>[8]</sup>

由于数值计算是采用逐步迭代求解的方法求守恒量, 因此, 守恒量不能用来直接代入求压力的解析关系式。本文中通过求解守恒方程得到内能以后, 要再进行迭代求解来得到温度, 进而由状态方程求得压强。温度的求解采用了 Newton-Raphson 迭代法:

$$T^{k+1} = T^k - \frac{F(T^k) - e}{F'(T^k)} \quad (6)$$

式中,  $e$  为内能。

$$F(T^k) = \sum_{i=1}^N Y_i \left[ H_i - \frac{R_u T}{M_i} \right] \quad (7)$$

$$F'(T^k) = \sum_{i=1}^N Y_i \left[ c_{p,i} - \frac{R_u}{M_i} \right] \quad (8)$$

式中,  $H_i$  为组分的焓值,  $c_{p,i}$  是组分比定压热容。

### 3.3 化学源项刚性问题的处理

为了克服化学源项刚性问题, 加速计算收敛, 本文中采用了一种松弛方法<sup>[12]</sup>。基本思想是通过计算组元浓度的相对变化, 用以代替控制组元密度的变化:

$$\delta Y_i = \frac{\delta \rho_i - Y_i \delta \rho}{\rho} \quad (9)$$

### 3.4 增益系数

小信号增益系数计算公式为<sup>[2]</sup>:

$$G = \frac{7}{12} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{A}{4\pi} \frac{\lambda}{\Delta V} \times \left\{ n [I^2 P_{1/2}] - \frac{g [I^2 P_{1/2}]}{g [I^2 P_{3/2}]} \times n [I^2 P_{3/2}] \right\} \quad (10)$$

式中,  $A$  表示 Einstein 系数;  $\lambda$  是 COIL 的波长;  $\Delta V$  是 Doppler 加宽;  $n$  是每一种物质的数密度;  $g$  表示每一种物质的简并度;  $I(^2P_{1/2})$  和  $I(^2P_{3/2})$  分别表示基态碘原子和激发态碘原子。

### 4 算例和结果分析

#### 4.1 I<sub>2</sub>-He 横向喷流验证算例

作为验证算例, 对 I<sub>2</sub>-He 副流以接近音速的射流形式横向注入压音速的纯 He 气流进行了数值模拟, 该算例在一定程度上反映了氧碘化学激光器中喷流区域的真实流动情况。

图 1 是 111×81 的计算网格。其中下表面是管道

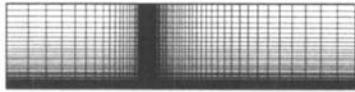


Fig 1 111×81 grid

固壁以及喷口, 网格在靠近壁面以及喷口附近做了适当加密。喷流速度接近音速, 温度  $T = 288\text{K}$ , 压强  $p = 28728\text{N/m}^2$ 。组分密度  $\rho_{\text{He}} = 0.047480\text{kg/m}^3$ ,  $\rho_{\text{I}_2} = 0.034737\text{kg/m}^3$ 。主流密度  $\rho_{\text{He}} = 0.015368\text{kg/m}^3$ , 温度  $T = 300\text{K}$ , 压强  $p = 9576\text{N/m}^2$ , 自由来流马赫数为 0.8。壁面采用无滑移条件, 非催化壁。计算域的上部采用自由流条件。

图 2 是喷口附近的流线分布, 图中可以看出, 高速喷出的副流在喷口后部区域引起了明显的分离。

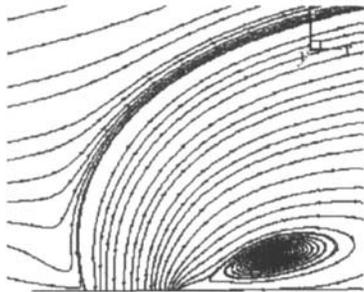


Fig 2 Stream traces

图 3 中给出喷口附近网格点  $j = 2$  处的碘分子的质量分数, 本文中计算结果与文献值<sup>[7]</sup>作了比较, 文

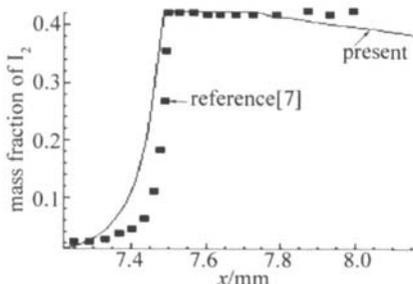


Fig 3 Iodine mass fraction (Fick's law)

献值是美国 GASP 程序的计算结果。从图中可见, 计算值和文献值符合良好, 基本反映了副流中碘分子喷

入主流后的分布情况。

#### 4.2 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ) 初始产额及水蒸气含量对增益分布的影响

采用文献 [7] 中的计算条件做为基准条件, 在此基础上改变 O<sub>2</sub>(<sup>1</sup>Δ) 初始产额以及水蒸气含量, 然后将计算结果进行对比。此外, 还计算比较了分别采用一个碘喷口和两个碘喷口的 COIL 流场参数。表 1 中给出了不同计算条件下的主流组分质量分数配比。

Table 1 Inflow mass fraction

	O <sub>2</sub> ( <sup>1</sup> Δ)	He	O <sub>2</sub>	Cl <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
benchmark (two spouts)	0.228	0.238	0.328	0.176	0.03
no water	0.228	0.268	0.328	0.176	0
more O <sub>2</sub> ( <sup>1</sup> Δ) yields	0.3	0.196	0.328	0.176	0.03
one spout	0.228	0.238	0.328	0.176	0.03

图 4 是 169×81 的计算网格, 为了减少计算量, 只对管道的上半部分进行了数值模拟, 相应地采用了对称边界条件。

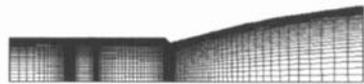


Fig 4 169×81 grid

图 5 是基准状态下 COIL 碘喷管附近的流线分布, 副流在喷管附近卷起了两个较大的旋涡, 这

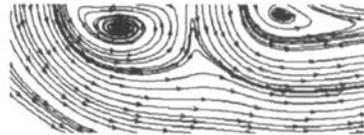


Fig 5 Stream traces

促进了副流和主流的混合。图 6 是基准状态下 COIL 流场的无量纲温度云图, 可以看到在主流和副流交界



Fig 6 Temperature contour

面温度明显高于流场其它地方, 说明在这里发生了剧烈的化学反应并放出了大量的热。而到了管道下游, 由于气体的急剧膨胀到很高的速度而造成了压力下降, 可以看到这里的温度明显较低。图 7~ 图 9 是不

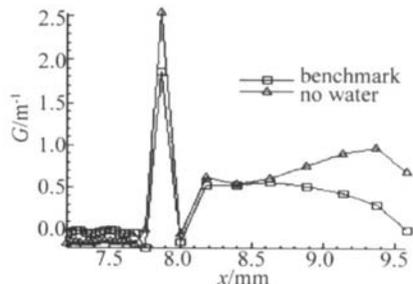


Fig 7 Average gain for benchmark and no water

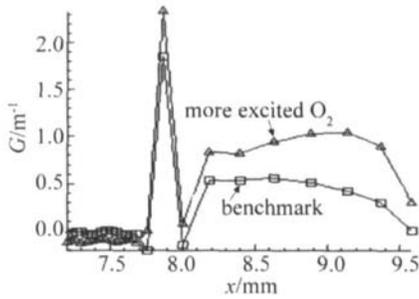


Fig 8 Average gain for benchmark and more  $O_2(^1\Delta)$

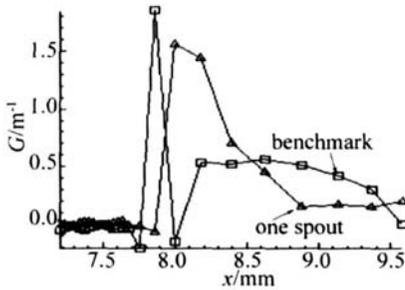


Fig 9 Average gain for benchmark and one spout

同计算状态下碘喷管附近的小信号平均增益分布, 通过比较发现, 除水和增加  $O_2(^1\Delta)$  初始产额都使平均增益增大, 这与文献 [2] 中所得出的结论是一致的。此外, 采用两个碘喷管获得的平均增益也大于只用一个喷管的情况, 这可能是由于第 2 个喷管的喷流对前面的喷流起了一个“气垫”的作用, 使前面的喷流更靠近激光器管道中心, 与主流混合得更好。

## 5 结 论

(1) 通过将计算结果和文献值 [2,7] 进行比较, 说明本文中所采用的数值求解方法对于求解 COIL 中的喷流反应流场是适用的, 计算结果具有较高的可信度。在本文中方法的基础上, 还可以根据需要加入其它计算模块, 这对于处理实际工作中所遇到的特殊问题非常重要, 是采用一般商业软件进行 COIL 数值模拟所无法比拟的。

(2) 氧碘化学激光器中的增益分布受到主流来流中的水蒸气以及  $O_2(^1\Delta)$  等组分含量的影响, 除水和

增加  $O_2(^1\Delta)$  初始产额都可使平均增益增大。

(3) 在本文中的计算条件下, 采用两个碘喷管和采用一个碘喷管相比能够获得更大的小信号平均增益。

## 参 考 文 献

- [1] LOU Q H, ZHOU J WANG Zh J Analysis of high-power fiber laser weapons [J]. *Laser Technology*, 2003, 27(3): 161~165 (in Chinese).
- [2] WU B D, LU L, JIANG Z L *et al* Computation of mixing flow field of COIL with FLUENT software [J]. *High Power Laser and Particle Beams* 2005, 17(2): 181~185 (in Chinese).
- [3] DUO L P, YANG B L, SANG F T *et al* The computational simulation of two dimensional small signal gain of a COIL [J]. *High Power Laser and Particle Beams* 1999, 11(2): 134~138 (in Chinese).
- [4] ZHANG B A, CHEN Y Sh, LI Sh X *et al* 2.5 dimension simulation on the supersonic CW COIL [J]. *Chinese Journal of Computational Physics* 1997, 14(2): 207~216 (in Chinese).
- [5] LI Sh X, LU G H, WEI D *et al* A numerical simulation on mixing phenomena in coil [J]. *High Power Laser and Particle Beams* 1999, 11(5): 535~537 (in Chinese).
- [6] ZHANG L, LIU J WANG G *et al* A numerical simulation of the nonequilibrium flows in COIL [J]. *Journal of Northwest Polytechnical University* 2005, 23(3): 369~372 (in Chinese).
- [7] EPPARD W M, MCGRORY W D, GODFREY A G. Recent advances in numerical techniques for the design and analysis of COIL systems [A]. 31st AIAA Plasmadynamics and Laser Conference [C]. Denver the American institute of Aeronautics and Astronautics 2000. 1~15.
- [8] MILLER J H, SHANG J S MADDEN T J Parallel computation of chemical oxygen/iodine laser flow fields [A]. 32nd AIAA Plasmadynamics and Laser Conference [C]. California the American institute of Aeronautics and Astronautics 2001. 1~12.
- [9] PASCHKEWITZ J, SHANG J, MILLER J An assessment of COIL physical property and chemical kinetic modeling methodologies [A]. 31st AIAA Plasmadynamics and Laser Conference [C]. Denver the American institute of Aeronautics and Astronautics 2000. 1~16.
- [10] WANG G. Grid generation technology, high efficiency and high accuracy algorithms [D]. Xi'an Northwest Polytechnical University 2004. 48~75 (in Chinese).
- [11] ABD R Evaluation of two equation turbulence models for predicting transitional flows [J]. *International Journal of Engineering Science* 1993, 31(2): 831~840.
- [12] OU Y Sh W, XIE Zh Q High temperature nonequilibrium air flow [M]. Beijing National Defense Industry Press, 2001. 131~132 (in Chinese).