

О ДИФФУЗИОННЫХ ЗАДАЧАХ, ВОЗНИКАЮЩИХ В ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ ЛАЗЕРОВ

*Н. Г. Преображенский*

(Новосибирск)

Произведена последовательная редукция системы линейных уравнений многокомпонентной конвективной диффузии с учетом особенностей соответствующих лазерных установок. Записан критерий осуществления чисто диффузионного режима. Указан метод диагонализации матрицы коэффициентов диффузии, сводящий многокомпонентную задачу к серии однокомпонентных. Обсуждены особенности суперпозиции релаксационных мод. На примере фтористоводородного усилителя диффузионного типа рассмотрено влияние угловой асимметрии частиц на выходную мощность излучения.

1. Уточнение кинетики процессов, определяющих параметры различных газодинамических и химических лазеров (см. обзоры [1-3]), часто связано с необходимостью учета диффузионных характеристик неравновесного потока. Реализовано и значительное количество лазерных систем, для которых диффузионный перенос атомов и молекул является доминирующим кинетическим процессом [4,5].

Используемые упрощенные оценки «диффузионных вкладов» во времена релаксации, а также в другие параметры, непосредственно определяющие коэффициент усиления, мощность и к.п.д. лазеров, могут приводить к существенному огрублению результатов расчета [6] или даже к качественному противоречию с данными эксперимента [7]. В данной работе рассмотрены линейные краевые задачи диффузии, учет особенностей решения которых необходим. Эти задачи допускают либо прямое аналитическое, либо несложное численное решение, благодаря чему приводимые результаты могут быть использованы для уточнения модельных теорий лазеров, подобных [8-10].

2. В рамках феноменологического описания колебательной релаксации объединенных в «блоки» уровней основных лазерных компонентов (например, в приближении Ландау — Теллера [8] и условия устойчивости Куранта — Фридрихса — Леви [11]) можно исходить из следующей системы линейных уравнений конвективной диффузии:

$$(2.1) \quad \frac{\partial n_i}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla n_i - \sum_{k=1}^p D_{ik} \nabla^2 n_k + \alpha_i n_i = 0, \quad \mathbf{v} = \sum_{i=1}^p n_i \mathbf{v}_i.$$

Здесь  $\mathbf{v}$  — вектор средней скорости потока,  $\alpha_i$  — диссипативные коэффициенты,  $D_{ik}$  — коэффициенты диффузии, которые с хорошим приближением можно считать скалярными величинами, связанными друг с другом соотношениями Онзагера.

Укажем критерий, позволяющий выделить чисто диффузионный режим работы лазера. Если  $l_{\parallel}$  и  $l_{\perp}$  — характерные продольный и поперечный размеры лазерного канала (точнее, той его части, в которой процесс диф-

фузии играет заметную роль), то требуемый критерий можно сформулировать в виде условия

$$(2.2) \quad t_c \geq 10t_d, \quad t_c = l_{\parallel} / v, \quad t_d = l_{\perp}^2 / \langle D_{ik} \rangle$$

где  $t_c$  и  $t_d$  — времена конвекционного и диффузионного прохождения частицы. Вводя для потока числа Шмидта  $Sc$  и Рейнольдса  $Re$ , можно переписать (2.2) в виде

$$(2.3) \quad Sc Re \lesssim 0.1 l_{\parallel} / l_{\perp}$$

Обратное неравенство соответствует быстропроточному режиму [12]. Этот случай, равно как и промежуточный [13], не рассматривается.

Кроме пренебрежения на основании (2.3) вторым членом дальнейшее формальное упрощение (2.1) можно осуществить заменой переменных

$$(2.4) \quad m_i = n_i e^{\alpha_i t}$$

Тогда вместо (2.1) имеем

$$(2.5) \quad \frac{\partial m_i}{\partial t} = \sum_{k=1}^p D_{ik}^* \nabla^2 m_k,$$

$$(2.6) \quad D_{ik}^* = D_{ik} e^{(\alpha_i - \alpha_k) t}$$

Литературные данные (см., например, [3, 6, 10]) позволяют провести сравнительную оценку величин  $t_d$  и разностей  $(\alpha_i - \alpha_k)$ , фигурирующих в экспоненте (2.6). Оказывается, что значительное число практически интересных ситуаций характеризуются соотношением

$$(2.7) \quad |\alpha_i - \alpha_k| < t_d^{-1}$$

т. е. с достаточной степенью точности можно не принимать во внимание различия диссипативных коэффициентов в многокомпонентной задаче и исходить из системы уравнений

$$(2.8) \quad \frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_{k=1}^p D_{ik} \nabla^2 n_k - \alpha n_i$$

3. В термодинамике необратимых процессов при решении задач, описываемых уравнениями типа (2.8), стремятся с помощью различных приближений осуществить «расщепление» системы или отбрасывают недиагональные члены матрицы коэффициентов диффузии  $D_{ik}$ . Подобные приемы, как правило, трудно оправдать и их использование вносит в расчеты неконтролируемые погрешности [14, 15].

Заметим, что (2.8) преобразуется к системе  $p$  независимых уравнений диагонализацией матрицы  $\bar{D}$ . Рассмотрим вспомогательную несингулярную квадратную матрицу  $g$  с элементами  $g_{ik}$ , ранг которой совпадает с рангом матрицы  $D$ . Умножая уравнения системы (2.8) на соответствующие элементы  $g_{ij}$ , суммируя по  $i$ , а также заменяя индексы  $i$  на  $k$  в членах с однократным суммированием, находим

$$(3.1) \quad \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^p g_{kj} n_k = \text{div grad} \sum_{k=1}^p n_k \sum_{i=1}^p g_{ij} D_{ik} - \alpha \sum_{k=1}^p g_{kj} n_k, \quad j = 1, 2, \dots, p$$

Введем обозначения

$$(3.2) \quad G_j = \sum_{k=1}^p g_{kj} n_k, \quad H_j = \frac{1}{g_{kj}} \sum_{i=1}^p g_{ij} D_{ik}$$

после чего система (3.1) запишется в виде

$$(3.3) \quad \partial G_j / \partial t = H_j \nabla^2 G_j - \alpha G_j, \quad j = 1, 2, \dots, p$$

где отсутствуют зацепляющиеся члены. Элементы диагонализированной матрицы  $H_j$  находятся из условия

$$(3.4) \quad \det (D_{ik} - H \delta_{ik}) = 0$$

Решение системы уравнений (2.8) имеет вид

$$(3.5) \quad n_i = \sum_{j=1}^p g_{ij}^{-1} G_j$$

причем  $g^{-1}$  обозначает обратную матрицу.

Возвращаясь к более сложному случаю, когда неравенство (2.7) не выполняется, отметим, что было проведено исследование сходимости итерационной схемы, в соответствии с которой в (3.3) вводятся коэффициенты  $\alpha_j$  вида

$$(3.6) \quad \alpha_j = \frac{1}{G_j} \sum_{k=1}^p \alpha_k g_{kj} n_k$$

причем в первом приближении набор значений  $n_k$  находится согласно (3.5). Как правило, более двух итераций не требуется.

4. После редукции многокомпонентной задачи диффузии приходим к уравнению вида

$$(4.1) \quad \partial n / \partial t = D \nabla^2 n - \alpha n$$

где индекс  $i$  опущен. Задавая определенную геометрию системы и решая (4.1), можно получить полную релаксационную матрицу

$$(4.2) \quad Y_{mnq} = \gamma_{mnq} \exp(-t / \tau_{mnq}), \quad \sum_{m, n, q} \gamma_{mnq} = 1$$

Пусть, например, диффузия происходит в цилиндрической полости, причем  $L$  и  $R$  — длина и радиус цилиндра. Разделяя четыре аргумента  $(r, \varphi, z, t)$  функции  $n$  в (4.1) по методу Фурье, после некоторых выкладок [16] находим

$$(4.3) \quad n(r, \varphi, z, t) = \sum_m \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} C_{mn}' [K_q' \cos(q\varphi) + M_q' \sin(q\varphi)] \times \\ \times J_q(\mu_{mq} r) \cos(\nu_n z) \exp\{-[D(\mu_{mq}^2 + \nu_n^2) + \alpha] t\}$$

Здесь  $K_q'$ ,  $M_q'$ ,  $C_{mn}'$  — константы, отыскиваемые из начальных и граничных условий;  $\nu_n = (2n - 1) \pi L^{-1}$  и  $\mu_{mq}$  — корни трансцендентного уравнения

$$(4.4) \quad J_q(\mu_{mq} R) = 0$$

$J_q$  — символ функции Бесселя, а при суммировании по  $m$  должны учитываться только положительные корни уравнения (4.4). Как видно из (4.3) матричные элементы в выражении (4.2) определяются формулой

$$(4.5) \quad \tau_{mnq} = [D(\mu_{mq}^2 + \nu_n^2) + \alpha]^{-1}$$

В случае сферической геометрии решение записывается в виде

$$(4.6) \quad n(r, \theta, \varphi, t) = \sum_m \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{q=0}^{\infty} C_{mn} P_n^{(q)}(\cos \theta) [K_q'' \cos(q\varphi) + \\ + M_q'' \sin(q\varphi)] (\mu_{mn} r)^{-1/2} J_{n+1/2}(\mu_{mn} r) \exp\{-[D\mu_{mn}^2 + \alpha] t\}$$

где  $P_n^{(q)}(\cos \theta)$  — присоединенные функции Лежандра, а экспоненциальная зависимость элементов релаксационной матрицы  $Y$  определяется членами

$$(4.7) \quad \tau_{mn} = [D\mu_{mn}^2 + \alpha]^{-1}$$

которые содержат только два индекса вместо трех (вырождение).

Отметим здесь формальное сходство с задачей о продольной релаксации оптически ориентированных атомов, находящихся в ячейке с инертным или органическим ингибитором [16–18]. Как и в упомянутой задаче, в данном случае можно ожидать существенных изменений величин  $\tau_{mnq}$  и  $\gamma_{mnq}$  в (4.2) за счет отсутствия симметрии в распределении диффундирующих частиц по углу  $\varphi$ . Это должно заметно сказаться на выходных характеристиках лазера — интегральном коэффициенте усиления, мощности генерации, модовой структуре и т. п. Фактически указанный эффект наблюдался: в [19] подбором некоторого асимметричного положения водородного инжектора в дозвуковом смесительном устройстве электроразрядного лазера на молекулах HF удалось значительно улучшить его выходные параметры. Аналогичные случаи можно встретить и в исследованиях лазерных систем с химической накачкой (см. [3]).

С точки зрения записанного выше решения (4.3) асимметрия в угловом распределении диффундирующих частиц означает сохранение суммирования по индексу  $q$  и необходимость нахождения корней  $\mu_{mq}$  из (4.4) при различных значениях  $q$ . Чтобы сделать расчеты менее громоздкими, удобно воспользоваться обобщенными координатами  $x_r$ , вводимыми при рассмотрении многомерных задач теории переноса нейтронов [20]. Переход к случаю симметричного распределения частиц по  $\varphi$  соответствует тогда вырождению  $x_\varphi$  в декартову координату  $x$ .

5. Проиллюстрируем применение записанных выше общих выражений на конкретном примере. Рассмотрим расчет мощности излучения  $W$ , выходящего из проточной диффузионной системы, которая работает на молекулах HF в режиме усилителя. Пусть  $I_0$  — интенсивность излучения, входящего в усилитель. В направлении  $z$  размеры пучка считаем равными единице, а по осям  $x$  (вдоль скорости потока) и  $y$  (вдоль отрезка, ограниченного осью потока и «фронтом пламени» [4]) производим интегрирование в соответствии с формулой

$$(5.1) \quad W = I_0 \int_0^{\infty} \left[ \exp \left( \int_0^{y_0} \kappa dy \right) - 1 \right] dx$$

В приближении ламинарного фронта [21] имеем

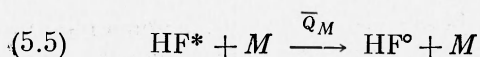
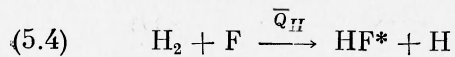
$$(5.2) \quad y_0 = A \sqrt{Dx/v}$$

где  $A$  — константа порядка единицы,  $v$  — скорость потока

$$(5.3) \quad \kappa = \chi h \omega N_0 ([HF^*] - [HF^0])$$

$\kappa$  — локальный коэффициент усиления (обозначения стандартны [22] и поэтому не поясняются), для которого, следуя модели [10], легко составить

обыкновенное дифференциальное уравнение. Важными параметрами, фигурирующими в этом уравнении, являются  $\chi I_0$ , а также величины  $Q_H$  и  $Q_M$ , имеющие смысл произведений концентраций молекул  $H_2$  и частиц  $M$  на константы скорости реакций  $\bar{Q}_H$  и  $\bar{Q}_M$  соответственно



Этими тремя величинами определяются два безразмерных отношения

$$(5.6) \quad \lambda_1 = Q_H/Q_M, \quad \lambda_2 = 2\chi I_0/Q_M$$

удобные при интерпретации различных частных решений задачи.

В результате решения уравнения для  $\kappa$ , подстановки этого решения в (5.4) и интегрирования с учетом того, что  $\kappa \lesssim 0.5$ , получим

$$(5.7) \quad W = Cb_1 \sqrt{1-b_1} \left\{ a_1 \left[ \sqrt{\xi_\varphi} - \text{Daw}(\sqrt{\xi_\varphi}) \right] - \frac{a_2}{b_2} \left[ \sqrt{\xi_\varphi} - \frac{\text{Daw}(\sqrt{b_1 \xi_\varphi})}{\sqrt{b_1}} \right] + \frac{2}{3} a_3 \xi_\varphi^{3/2} \right\}$$

Символ Daw обозначает интеграл Доусона, который табулирован и выражается через интеграл вероятности от мнимого аргумента

$$\text{Daw}(x) \equiv (\sqrt{\pi/2i}) \exp(-x^2) \Phi(ix)$$

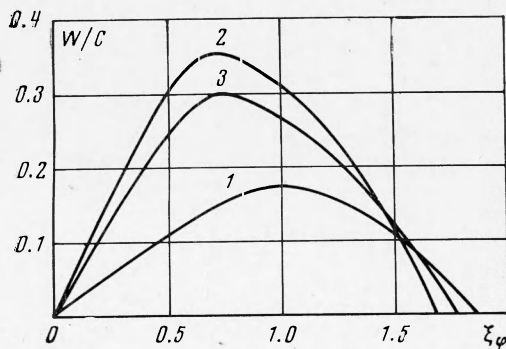
Переменная  $\xi_\varphi$  связана с обсуждавшейся выше обобщенной координатой  $x_\varphi$ , учитывающей азимутальную асимметрию потока диффундирующих молекул  $H_2$ , следующим образом:

$$(5.8) \quad \xi_\varphi = (1 + \lambda_2) \zeta_\varphi = Q_M v^{-1} (1 + \lambda_2) x_\varphi^2$$

Остальные величины, появляющиеся в (5.7), таковы:

$$(5.9) \quad b_1 = \frac{\lambda_2}{1 + \lambda_2}, \quad b_2 = \frac{\lambda_1}{1 + \lambda_1}, \quad a_1 = \frac{b_2(2-b_1)}{b_2-1}, \\ a_2 = \frac{1+b_2-b_1}{b_2-1}, \quad a_3 = b_1 - 1$$

Характерный результат расчета по формуле (5.7) представлен на фигуре. По осям отложены величины  $\xi_\varphi$  и  $W/C$  ( $C$  — константа), для простоты выбран предельный случай  $\lambda_1 \rightarrow \infty$ ; физически он соответствует пред-



положению о том, что реакция образования активных молекул (5.4) завершается в пределах «фронта пламени». Здесь  $\lambda_2$  является варьируемым параметром и для кривых 1 и 2 принимает значения 1 и 4. Эти две кривые отвечают случаю, когда нет угловой асимметрии в распределении диффундирующих частиц, т. е. для них  $x_\varphi = x$ . Для кривой 3, как и для кривой 1,  $\lambda_2 = 1$ , но снято допущение о симметричном распределении

