

文章编号: 1001-246X(2010)06-0854-07

# 基于混合发展的超声速段射流式 COIL 的数值优化

吕俊明<sup>1</sup>, 胡宗民<sup>2</sup>, 姜宗林<sup>3</sup>, 王 强<sup>1</sup>

(1. 中国航天空气动力技术研究院, 北京 100074; 2. 新加坡国立大学, 新加坡 119077;

3. 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:** 应用 CFD 技术, 发展三维多组分化学反应流计算程序, 对采用超声速段射流方式的氧碘化学激光进行数值模拟, 考察分解率与增益等参考变量的详细三维分布. 计算结果说明, 超声速区域的高速流动以及混合效率降低使 COIL 无法在有限空间内完成整个运转流程; 提高碘含量以加快反应速度的手段导致主流无法提供足够的载能介质, 无法形成合理增益. 在不改变喷管长度的前提下, 提出主流无载气方式的探索, 结果证明了超声速段射流方式采用无载气主流配置的可行性与优势, 通过减小气流速度保证混合与化学反应在光腔上游完成, 在合理的流量配比下光腔位置处可得到  $1.3\% \text{ cm}^{-1}$  的增益峰值.

**关键词:** 氧碘化学激光; 主流无载气; 增益系数; 超声速段射流

中图分类号: O354.3

文献标识码: A

## 0 引言

氧碘化学激光 COIL (Chemical Oxygen-Iodine Laser) 1977 年由美国空军武器实验室首次研制成功<sup>[1]</sup>, 其利用亚稳态的单重态氧  $\text{O}_2(^1\Delta)$  与基态碘原子之间的近共振传能过程产生激发态碘原子  $\text{I}^*$  作为增益介质 ( $\text{O}_2(^1\Delta) + \text{I} \rightarrow \text{I}^* + \text{O}_2(^3\Sigma)$ ),  $\text{I}^*$  受激辐射产生近红外激光束 ( $\text{I}^* + h\nu \rightarrow \text{I} + 2h\nu$ ), 输出波长  $\lambda \approx 1.315 \mu\text{m}$ , 是目前已实现的化学激光系统中唯一能够利用电子跃迁而不是振动跃迁释能出光的.

氧碘化学激光广泛采用的运作方案是利用超声速喷管进行混合与反应, 通过超声速膨胀过程降低腔内介质温度, 从而降低单重态氧阈值以实现粒子数反转, 同时使腔压维持在低水平. 部分实验和数值计算结果都表明, 若在喷管超声速段、水蒸汽基本凝结位置的下游喷碘进行混合, 则可通过调整喷碘位置降低水蒸汽凝结过程的负面作用<sup>[2]</sup>. 另外, 传统的亚声速段射流方式 COIL, 光腔位于喷管下游, 混合发生在亚声速区域, 故须适当抑制分解反应, 确保其在光腔上游附近进行完全, 以便在超声速区达到增益峰值, 即需要低碘含量的配比条件<sup>[3]</sup>. 这样不仅无法有效利用载能介质, 也不利于形成高增益. 因此, 综合以上几种原因, 在喷管超声速段进行碘射流是一种较为理想的混合方式.

文 [4] 针对超声速段射流方式进行了初步研究, 证明其确实有利于提高激光器性能, 文 [5] 也有类似的结论, 但大量实验的表现却不能使人满意<sup>[6]</sup>. 鉴于试验获得信息的平均性与有限性, 很难对这一问题进行深入、详细的分析. 本文利用数值模拟方法的优势, 通过对完整的混合喷管以及谐振腔模型, 采用三维 N-S 方程、基元化学反应模型以及二元等效扩散模型, 进行细致的三维流场与化学反应过程的模拟与研究, 探讨造成超声速段射流式氧碘化学激光实际性能不佳的可能原因, 并提出优化建议, 对提高 COIL 工作效率以及完善对超声速段射流方式工作状态的认识都有重要意义.

## 1 模型与计算方法

### 1.1 物理模型与计算模型

物理模型参考 RADICL (Research Assessment Device Improvement Chemical Laser) 狭缝喷管, 模型尺寸来自于文 [7], 射流喷孔改在超声速区域, 见图 1 所示. 大孔 ( $\Phi = 0.08128 \text{ cm}$ ) 中心位于  $x = 2.0 \text{ cm}$ ,  $z = 0 \text{ cm}$

收稿日期: 2009-11-27; 修回日期: 2010-02-03

基金项目: 国家高技术发展计划项目与大连化学物理研究所联合基金资助项目

作者简介: 吕俊明 (1981-), 男, 博士, 从事化学反应流数值研究.

处,小孔 ( $\Phi = 0.04064 \text{ cm}$ ) 中心位于  $x = 2.2 \text{ cm}$   $z = 0.05 \text{ cm}$  处. 因考虑到喷管上下壁面和射流喷孔完全对称,故计算区域在竖直方向上只选取一半,对称面处取对称条件. 横向上模型喷孔为重复性阵列设置,故在合理节约计算资源的考虑下,在横向上也将模型划分到最小单元,即半个大孔和一个小孔,边界取对称条件. 这样虽简化了靠近小孔边界的原周期性条件,但对结果影响不大. 整个计算区域的网格总数为  $350 \times 60 \times 30$ .

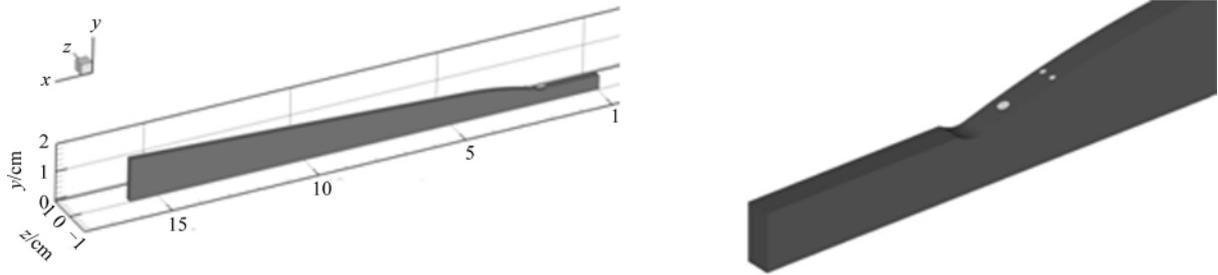


图 1 RADICL 狭缝喷管简化计算模型

Fig. 1 Computational model of a RADICL nozzle

### 1.2 控制方程与数学模型

COIL 系统运行在低压低密度环境, Reynolds 数为  $10^2 \sim 10^3$ , 流动具有复杂的三维特性, 因此本文应用三维层流 N-S 方程描述流动过程, 考虑对流、粘性耗散和分子扩散. 在直角坐标系下三维可压缩层流 N-S 方程可写为

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = \frac{\partial D_i}{\partial x_i} + S_c \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1)$$

其中  $U$  为守恒型独立变量,  $F_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 分别为  $x, y, z$  方向的对流量,  $D_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 分别为  $x, y, z$  方向的耗散通量,  $S_c$  为化学反应源项. 具体为

$$\begin{aligned} U &= [\rho_1 \quad \rho_2 \quad \dots \quad \rho_{ns} \quad \rho u_1 \quad \rho u_2 \quad \rho u_3 \quad \rho e]^T, \\ F_i &= [\rho_1 u_i \quad \rho_2 u_i \quad \dots \quad \rho_{ns} u_i \quad \rho u_i u_1 + \delta_{i,1} p \quad \rho u_i u_2 + \delta_{i,2} p \quad \rho u_i u_3 + \delta_{i,3} p \quad (\rho e + p) u_i]^T, \\ D_i &= [\rho_1 v_{D_{1,i}} \quad \rho_2 v_{D_{2,i}} \quad \dots \quad \rho_{ns} v_{D_{ns,i}} \quad \tau_{i,1} \quad \tau_{i,2} \quad \tau_{i,3} \quad u_j \tau_{i,j} + q_i]^T, \\ S_c &= [\dot{\omega}_1 \quad \dot{\omega}_2 \quad \dots \quad \dot{\omega}_{ns} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T. \end{aligned}$$

在上述方程中,  $\rho = \sum_1^{ns} \rho_{sp}$  代表总密度,  $\rho_{sp}$  ( $sp = 1, \dots, ns$ ) 代表各组分密度.  $u_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 表示  $x, y, z$  三个方向的速度分量,  $e$  和  $p$  分别代表总能与混合气体的压力.  $v_{D_{sp,i}}$  代表第  $sp$  种组分气体在  $x_i$  方向的扩散速度.  $\tau$  和  $q$  是粘性应力和热传导项,  $\dot{\omega}_{sp}$  表示第  $sp$  种组分气体的变化率. 组物性参数包括粘性系数、热传导系数以及比热、比焓等热力学参数采用温度多项式拟合的方法得到.

化学反应采用基元反应模型, 考虑  $I_2, I_2^*, I, I^*, O_2(^1\Delta), O_2(^1\Sigma), O_2(^3\Sigma), H_2O, Cl_2, He$  共 10 种组分, 21 个基元反应, 详见表 1<sup>[8]</sup>.

在低压环境下, 准确的分子扩散模型对于计算结果的正确性是至关重要的. 由于 COIL 中碘、氧、氦等原子质量差别很大, 故本文采用考虑浓度驱动机制和压力驱动机制的 Ramshaw-Dukowicz 多组分扩散运输公式, 其中扩散系数通过等效二元扩散模型计算而得. 具体方程为

$$\begin{aligned} \rho_{sp} D_{sp} &= -\gamma_t \left[ G_{sp}^x - \frac{\rho_{sp}}{\rho} \sum_{i=1}^{ns} G_i^x \right] - \gamma_t \left[ G_{sp}^p - \frac{\rho_{sp}}{\rho} \sum_{i=1}^{ns} G_i^p \right], \\ G_{sp}^x &= w_{sp} D_{sp} \nabla \chi_{sp}, \quad G_{sp}^p = w_{sp} D_{sp} (\chi_{sp} - \rho_{sp}/\rho) \nabla p/p, \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $w$  和  $\chi$  分别代表组分的分子量及摩尔浓度,  $\gamma_t$  代表总摩尔浓度,  $D_{sp}$  代表组分  $sp$  的平均扩散系数.

### 1.3 数值方法

上节所述三维 N-S 方程所对应的空间半离散差分方程表述为

$$\frac{\Delta U}{\Delta t} = -CONV_{i,j,k}^n + VISC_{i,j,k}^n + S_c^n,$$

其中  $CONV$  为对流项, 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<sup>[9]</sup>,  $VISC$  为耗散项, 包括分子扩散、粘性效应和热传导项, 采用中心差分格式离散.

表 1 COIL 化学反应计算采用的 21 个基元反应

Table 1 21 reactions in COIL chemical computation

	Reaction equations	Rates/cm <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup>
1	$O_2(^1\Delta) + O_2(^1\Delta) \rightarrow O_2(^1\Sigma) + O_2(^3\Sigma)$	$2.7 \times 10^{-17}$
2	$O_2(^1\Sigma) + H_2O \rightarrow O_2(^1\Delta) + H_2O$	$6.7 \times 10^{-12}$
3	$O_2(^1\Delta) + O_2(^3\Sigma) \rightarrow O_2(^3\Sigma) + O_2(^3\Sigma)$	$1.6 \times 10^{-18}$
4	$O_2(^1\Delta) + H_2O \rightarrow O_2(^3\Sigma) + H_2O$	$4.0 \times 10^{-18}$
5	$O_2(^1\Delta) + Cl_2 \rightarrow O_2(^3\Sigma) + Cl_2$	$6.0 \times 10^{-18}$
6	$O_2(^1\Delta) + He \rightarrow O_2(^3\Sigma) + He$	$8.0 \times 10^{-21}$
7	$I_2 + O_2(^1\Sigma) \rightarrow 2I + O_2(^3\Sigma)$	$4.0 \times 10^{-12}$
8	$I_2 + O_2(^1\Sigma) \rightarrow I_2 + O_2(^3\Sigma)$	$1.6 \times 10^{-11}$
9	$I_2 + O_2(^1\Delta) \rightarrow I_2^* + O_2(^3\Sigma)$	$7.0 \times 10^{-15}$
10	$I_2 + I^* \rightarrow I + I_2^* \delta$	$3.8 \times 10^{-11}$
11	$I_2^* + O_2(^1\Delta) \rightarrow 2I + O_2(^3\Sigma)$	$3.0 \times 10^{-10}$
12	$I_2^* + O_2(^3\Sigma) \rightarrow I_2 + O_2(^3\Sigma)$	$4.9 \times 10^{-12}$
13	$I_2^* + H_2O \rightarrow I_2 + H_2O$	$1.7 \times 10^{-11}$
14	$I_2^* + He \rightarrow I_2 + He$	$9.8 \times 10^{-12}$
15	$I + O_2(^1\Delta) \rightarrow I^* + O_2(^3\Sigma)$	$7.8 \times 10^{-11}$
16	$I^* + O_2(^3\Sigma) \rightarrow I + O_2(^1\Delta)$	$1.0277 \times 10^{-10} \cdot e^{(-401.4/T)}$
17	$I + O_2(^1\Delta) \rightarrow I + O_2(^3\Sigma)$	$1.0 \times 10^{-15}$
18	$I^* + O_2(^1\Delta) \rightarrow I + O_2(^1\Sigma)$	$1.1 \times 10^{-13}$
19	$I^* + O_2(^1\Delta) \rightarrow I + O_2(^1\Delta)$	$1.1 \times 10^{-13}$
20	$I + I^* \rightarrow I + I$	$1.6 \times 10^{-14}$
21	$I^* + H_2O \rightarrow I + H_2O$	$2.0 \times 10^{-12}$

## 2 计算结果与讨论

### 2.1 计算条件

本文的模拟中主流采用  $O_2(^1\Delta)$ ,  $O_2(^3\Sigma)$ ,  $H_2O$ ,  $Cl_2$  的混合气, 为基态氧、单重态氧、水蒸汽和氯气, 分别采用氦气作为载气 (Case 1 和 Case 2) 和无载气 (Case 3) 两种工况, 摩尔配比分别为 1:1.5:0.16:0.24:19.72 和 1:1.5:0.16:0.24  $Ma$  不同以保持单重态氧流量不变. 副流为  $I_2$  和 He 的混合气, Case 1 和 Case 2 射流采用声速条件, Case 3 射流采用压力匹配条件, 以避免斜激波影响, 与主流方向成  $45^\circ$  角, 摩尔配比参考不同流量配比. 具体参数见表 2, 其中下标 p 代表主流, s 代表副流.

表 2 模拟采用的计算条件

Table 2 Computational conditions in simulation

	$\dot{n}_p : \dot{n}_s$	$n_1 : n_{He}$	$p_p / \text{kPa}$	$T_p / \text{K}$	$M_p$	$P_s / \text{kPa}$	$T_s / \text{K}$	$M_s$
1	5	1:104	9.961 7	315	0.35	60	319	1.0
2	8	1:182	9.961 7	315	0.35	60	319	1.0
3	15	1:31	9.961 7	315	0.17	5	319	2.5

### 2.2 参数量定义

$I_2$  分解率 (Dissociation)、I 泵浦率 (Pump) 以及  $O_2(^1\Delta)$  生成率 (Yield) 的计算公式如下:

$$\eta_{\text{diss}} = \frac{\rho_{I_2} + \rho_{I_2^*}}{\rho_{I_2} + \rho_{I_2^*} + \rho_{I_1} + \rho_{I_1^*}}, \quad \eta_{\text{pump}} = \frac{\rho_{I^*}}{\rho_{I_1} + \rho_{I_1^*}}, \quad \eta_{\text{yield}} = \frac{\rho_{O_2(^1\Delta)}}{\rho_{O_2(^1\Delta)} + \rho_{O_2(^1\Sigma)} + \rho_{O_2(^3\Sigma)}}.$$

在氧碘化学激光的光学谐振腔中,  $I^*$  达到粒子数反转后的激射发生在最大增益跃迁线, 故激光功率与小信号增益系数有重要的关系. 其具体的表达式如下:

$$g = \sigma([I^*]) - \frac{1}{2}[I] = \frac{A\lambda^3}{8\pi} \sqrt{\frac{m}{2\pi k_b T}} \frac{7}{12} \left( [I^*] - \frac{1}{2}[I] \right), \quad (5)$$

其中  $A$  为爱因斯坦自发辐射系数;  $\lambda$  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;  $k_b$  为玻尔兹曼系数;  $T$  为绝对温度.

### 2.3 Case 1: 亚声速段射流条件下的最佳流量配比

有载气条件下, 参考文 [10] 结果, 在喷管构型及单重态氧流量相同的条件下, 最佳流量配比大约为 8. 在此条件下得到  $j=25$  网格线上各参量沿流向的变化规律, 如图 2, 其中各分布的每条曲线代表不同的横向位置, 即不同的  $k$  方向网格点. 可见单重态氧产率沿流向逐渐减少至 50%, 泵浦率则维持于 75% 上下, 说明载能介质供给充足, 数值与变化规律均可比于亚声速段射流条件下的最佳流量配比算例. 分解率仅缓慢加速至 20%, 在喷管中部及上游十分低, 造成增益系数不到  $0.5\% \text{ cm}^{-1}$ , 增长缓慢.

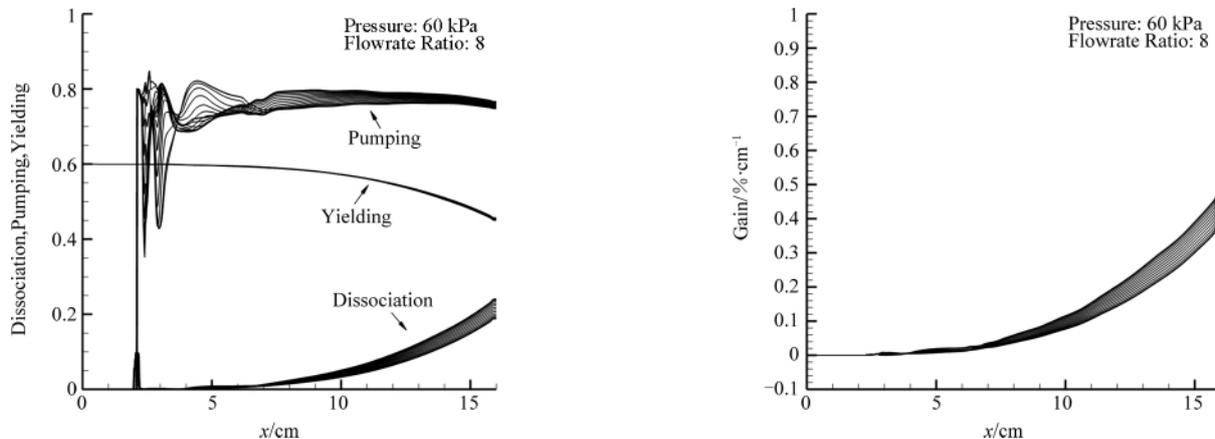


图 2 分解率、泵浦率、产率及增益沿流向在  $j=25$  网格线的分布

Fig. 2 Distribution of dissociation, pump, yield rate and gain along  $x$  at  $j=25$

亚声速段射流条件下的最佳流量配比并未产生合理的增益分布, 这种流量配比在化学反应完全的条件下是合理的, 但此处出现了时间与空间的不匹配现象, 推测其原因主要是由于超音速段射流方式导致混合效率不高, 并且混合区域主流速度显著加快, 都导致混合过程占据的流向空间拉长, 混合时间加长, 化学反应起始及完成位置被推后.

### 2.4 Case 2: 提高碘含量条件

在混合时间与占据的空间长度不变的条件下, 通过链式反应机制加快化学反应进程、提高整个进程运行速度, 结果如图 3 所示. 分解率得到显著提高, 上升到 40%, 并体现出明显的加速现象, 说明碘含量的提高确实使反应得到加速, 增益系数因而达到  $0.5\% \sim 0.8\% \text{ cm}^{-1}$  的峰值大小. 但碘含量的提高增加了载能介质的消耗, 单重态氧产率沿流向逐渐减少至 10%, 泵浦率相应呈逐渐减小的变化规律, 最终下降到 35%, 导致增益出现负值.

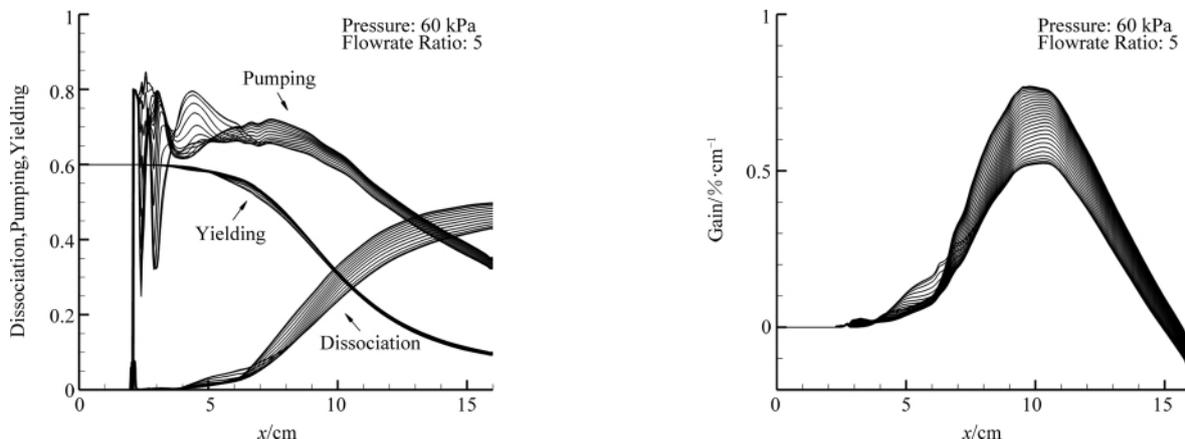


图 3 分解率、泵浦率、产率及增益沿流向在  $j=25$  网格线的分布

Fig. 3 Distribution of dissociation, pump, yield rate and gain along  $x$  at  $j=25$

减小流量配比可加速分解反应,但造成载能介质不足,无法形成合理增益.在喷口下游分解速度并未迅速提高,说明混合效果不好的影响依旧存在,造成喷管长度的相当一部分空间未有效利用.说明性能难以提高的主要矛盾在于超声速剪切流动的混合变差与流速增高以及载能介质供给不足,在不考虑单重态氧发生器改进与新的高效增混方式的条件下,降低流速成为较易实现的手段之一.

### 2.5 Case 3: 主流无载气方式

图 4 所示为主流有、无载气条件下流向速度分量的分布图.无载气时由于省去摩尔量占大部分的载气 He,造成平均分子量上升,混合气体声速减小.虽为保持单重态氧流量不变,主流马赫数降至 0.17,但流向速度依旧在超声速段明显减小,  $\mu \approx 650 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ,与有载气情况相比减小将近 1 倍,为混合过程与化学反应提供了时间保障.

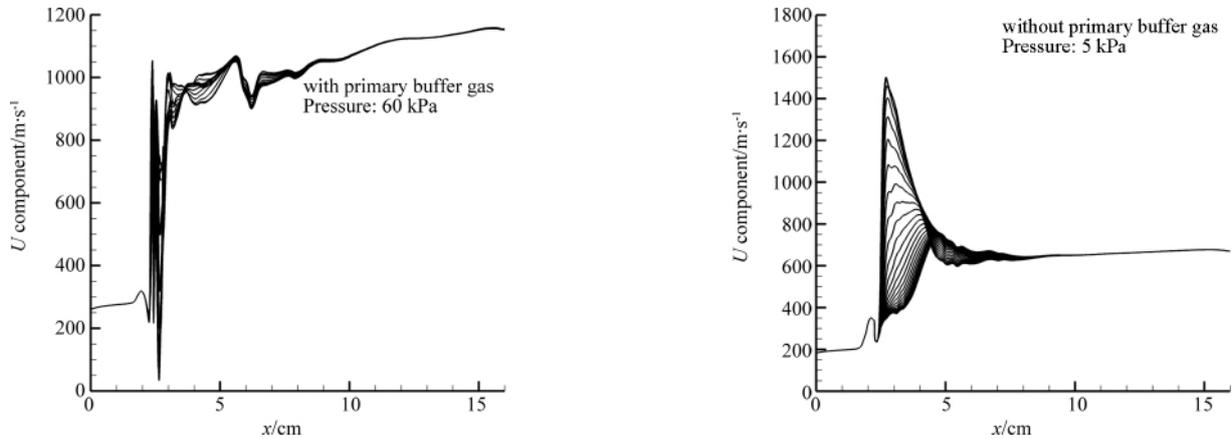


图 4 有、无载气条件下流向速度分量在  $j = 25$  网格线沿流向的分布

Fig. 4 Distribution of  $U$  component of velocity along  $x$  axis at  $j = 25$  with and without primary buffer gas

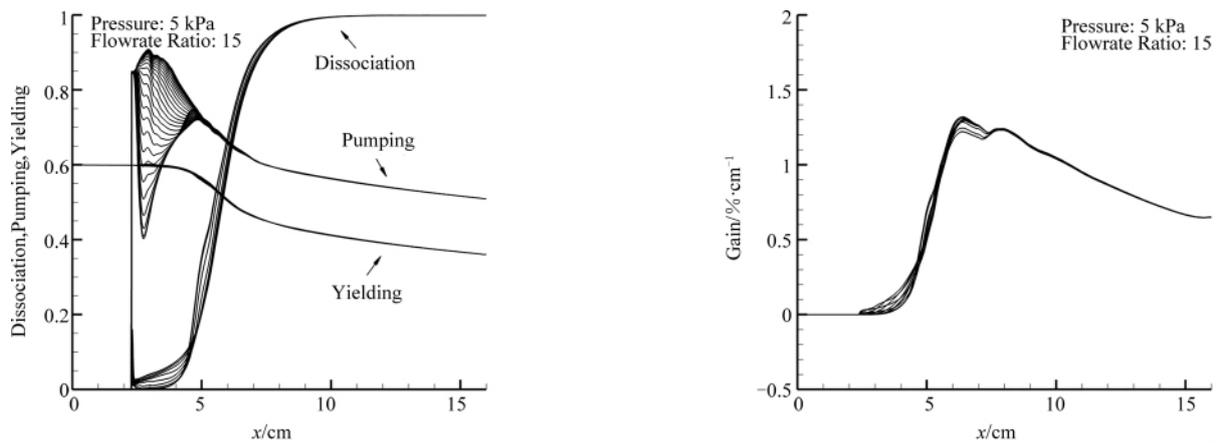


图 5 分解率、泵浦率、产率及增益沿流向在  $j = 25$  网格线的分布

Fig. 5 Distribution of dissociation, pump, yield rate and gain along  $x$  at  $j = 25$

图 5 是主流无载气条件下流量配比为 15 时得到的产率、分解率、泵浦率和增益系数沿流向的分布.可见分解反应由于混合不佳所导致的缓慢变化阶段沿流向的距离变短,随后快速上升到 100%.产率在分解反应快速进行后下降至 45%,随后缓慢下降至 40%.泵浦率相应下降到 65%后缓慢下降至 55%.缩短混合过程占据的喷管流向长度空间后,化学反应过程所需的的空间得到保障,使增益峰值达到  $1.3\% \text{ cm}^{-1}$ ,喷管下游的增益沿流向变化不剧烈.

图 6 根据 I 密度计算得到了平均混合效率沿流向的分布,计算公式如下:

$$\eta_{\text{mix}} = \frac{\int_{-H/2}^{H/2} \chi_1(y) dy}{(\chi_1)_{\text{max}} H}, \quad (6)$$

其中  $\chi_1$  为 I 原子密度, 正比于  $I_2$  密度  $H$  为流向位置处喷管的纵向高度. 可见压力匹配条件下的混合效率只有声速射流的一半, 大约为 40%. 说明此射流方式仍有提高的潜力, 优化射流与混合方式将是下一步工作的重点之一.

### 3 结论

本文以求解三维 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, 模拟了氧碘化学激光在超音速段射流方式下的混合与化学反应过程. 得到以下结论: 超声速段射流方式下, 混合与反应区中气流速度加快及混合效率不高增加了混合时间, 延长了混合发展阶段占据的喷管流向距离, 致使系统进程无法运行完整、增益不理想. 为达到合理增益, 要求化学反应加快进行, 即需提高碘含量, 但主流无法提供足够载能介质成为限制瓶颈. 说明传统以氦气为载气的单重态氧供给系统, 不适宜采用超声速段射流方式. 采用主流无载气方式可使主流速度减慢, 为混合过程提供充足时间, 促使化学反应完全进行. 结果证明, 在合理的流量配比条件下, 使用主流无载气方式的 COIL, 光腔位置处的增益峰值可达  $1.3\% \text{ cm}^{-1}$ , 沿流向分布基本均匀, 有效提高增益利用率与系统化学效率.

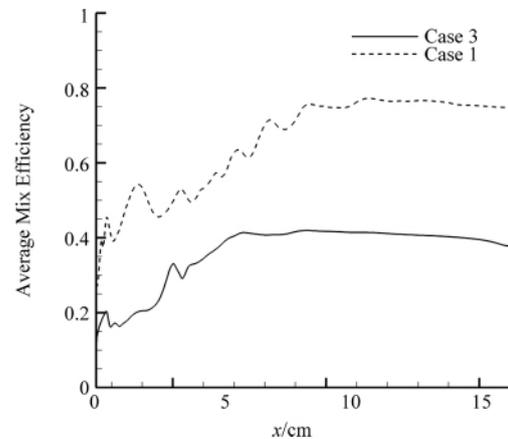


图 6 混合效率与增益分布相对标准差

Fig. 6 Average mix efficiency along flow direction

### 参 考 文 献:

- [ 1 ] McDermott W E, Pchelkin N R, Benard D J, Bousek R R. An electronic transition chemical laser [J]. Appl Phys Lett, 1978, **32**:469 - 470.
- [ 2 ] Carroll D L, Solomon W C, King D, et al. Advanced mixing nozzle concepts for COIL [C]//Proceeding of the International Conference on Lasers, 2000:69 - 77.
- [ 3 ] Lv Junming, Wang Chun, Jiang Zonglin. Numerical study on gain distribution in COIL: flow rate ratio of primary and secondary flow [J]. Chinese J Comput Phys, 2009, **26**(4): 414 - 420.
- [ 4 ] Lv Junming, Hu Zongmin, Wang Chun, Jiang Zonglin. Numerical study on performance of COIL with supersonic jet in supersonic section [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2009 **21**(9): 1305 - 1309.
- [ 5 ] Madden T J, Hager G D, Lampson A I, et al. A comparison of subsonic and supersonic mixing mechanism for the chemical oxygen-iodine laser (COIL) using computational fluid dynamics (CFD) simulation [C]//Proceeding of SPIE, 1999, **3612**:135 - 146.
- [ 6 ] Hirata T, Endo M, Shinoda K, et al. Novel mixing nozzles for supersonic chemical oxygen iodine laser [C]// Proceeding of SPIE, 2003, **5120**:410 - 419.
- [ 7 ] Madden T J. Aspects of 3-D chemical oxygen-iodine laser simulation [C]// Proceeding of SPIE, 2003, **5120**:363 - 375.
- [ 8 ] Paschkewitz J, Shang J, Miller J, Madden T. An assessment of COIL physical property and chemical kinetic modeling methodologies [R]. AIAA Paper 2000 - 2574, 2000.
- [ 9 ] Jiang Z L, Takayama K, Chen Y S. Dispersion conditions for non-oscillatory shock capturing schemes and its applications [J]. Comp Fluid Dynamics Journal, 1995, **4**:137 - 150.
- [ 10 ] Lv Junming, Wang Chun, Jiang Zonglin. Optimization of flow rate ratio of primary to secondary flow in COIL based on gain distribution [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2008 **20**(10): 1593 - 1596.

## Optimization of COIL with Jet in Supersonic Section Based on Mixing Process

LV Junming<sup>1</sup>, HU Zongmin<sup>2</sup>, JIANG Zonglin<sup>3</sup>, WANG Qiang<sup>1</sup>

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

*2. National University of Singapore, 119077, Singapore;*

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

**Abstract:** Three-dimensional algorithms solving laminar Navier-Stokes equations coupled with chemical reaction and transportation equations are developed. Detailed flow field and distribution of yield, dissociation and pumping rates and small signal gain are obtained which cannot easily be got in experiments. The reason that experimental results are not as good as that in theories is analyzed. Furthermore, a better way to operate the system is suggested. It is shown that the mixing and chemical process in a nozzle of limited length is not complete due to the high speed in supersonic mixing zone and low mixing efficiency. Higher iodine concentration for speeding up chemical reaction causes insufficient of singlet oxygen, so as an unreasonable gain. A primary flow without buffer gas is claimed necessary and essential to reduce flow velocity and assure mixing process and chemical reaction accomplished before arriving the cavity. With an appropriate flow rate ratio, a small signal gain can reach  $1.3\% \text{ cm}^{-1}$ .

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