doi:10.11887/j.cn.202202001 http://journal.nudt.edu.cn

全隐 LU-SGS 算法在高超声速热化学非平衡流刚性问题中的应用*

蒋 浩,柳 军,王君媛,黄 伟,杜 洋
(国防科技大学 空天科学学院,湖南 长沙 410073)

摘 要:在高超声速热化学非平衡流动计算中,当地气体能量松弛时间、化学反应特征时间与流动时间推进步长量级差异过大会带来严重数值刚性问题,且在高雷诺数条件下,壁面、拐角等强干扰区网格加密使得该问题加剧,导致初始最大 CFL 数极小,收敛速度缓慢。原始 LU-SGS 算法仅考虑化学反应源项和对流项的隐式处理,通过推导黏性项 Jacobian 矩阵谱半径并采用对角近似处理,发展了热化学非平衡 FLU-SGS 和 BLU-SGS 两种全隐 LU-SGS 算法;针对高焓二维圆柱和轴对称返回舱算例,对比改进前后三种算法的收敛特性。结果表明,FLU-SGS 及 BLU-SGS 算法能够快速建立强黏性干扰和大分离流场、解决热化学非平衡复杂流计算中的刚性问题,实现初始最大 CFL 数 3 至 5 个量级的提升,加速收敛效果明显。

关键词:高超声速;热化学非平衡;数值刚性;全隐 LU-SGS 算法;收敛性
中图分类号:V211.3 **文献标志码**:A **开放科学(资源服务)标识码(OSID)**:
文章编号:1001-2486(2022)02-001-08

听语音 与作者互动 聊科研

Fully implicit LU-SGS algorithms applied to stiff problems in hypersonic thermochemical non-equilibrium flows

JIANG Hao, LIU Jun, WANG Junyuan, HUANG Wei, DU Yang
(College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: In hypersonic thermochemical nonequilibrium flow calculations, a large difference between the numerical time step and the molecular vibration relaxation time or the chemical reaction time can bring about serious numerical stiffness problems, which are exacerbated by grid refinement in strong interaction areas such as near-wall or corner. The initial maximum CFL number and convergence rate are thus limited under high Reynolds conditions. The original LU-SGS algorithm only considers the implicit treatment of the source term and convection term. Two fully implicit LU-SGS algorithms, the FLU-SGS algorithm and the BLU-SGS algorithm, were developed by deriving and implementing the diagonal approximation of the spectral radius of the viscous Jacobian matrix. The convergence speeds of the three algorithms were investigated in cases of high enthalpy two-dimensional cylinder flow and axisymmetric re-entry capsule flow. The results show that strong viscous interaction and large separation can be quickly established and 3~5 orders of increase of the maximum CFL number can be reached with FLU-SGS and BLU-SGS algorithms. Thus the newly developed algorithms are efficient in accelerating convergence in the calculation of complex thermochemical non-equilibrium flows.

Keywords: hypersonic; thermochemical non-equilibrium; numerical stiffness; fully implicit LU-SGS algorithm; convergence

下一代天地往返空天飞行器具有高马赫数、宽速域的特点,穿越空域从对流层、平流层变化到临近空间,更为复杂的飞行任务剖面给飞行器气动、结构和热防护系统设计等带来巨大挑战,在设计中必须考虑高温气体效应的影响[1]。当飞行器高速再入时,在头部脱体激波及边界层的强黏性干扰作用下,空气被加热至数千度高温,其中的氧气和氮气组分发生振动激发、离解甚至电离,成为由分子、原子、离子和电子组成的混合气体,且当流动特征时间与能量松弛、组分化学反应特征时间相互比拟时,流动被称作热化学非平衡流。美国在早期航天飞机设计中依据完全气体假设,在试飞实验中出现了配平攻角高出设计值一倍多的气动异常现象[2]。

因此,在依靠计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)工具进行高超声速飞行器气动预测时,常规的完全气体假设不再适用,必须采用考虑热化学非平衡的高温气体假设,但热化学非平衡计算存在严重的数值刚性问题,即数值计算失稳或收敛困难。其中,第一类是由源项带

* **收稿日期**:2021-11-04
基金项目:国家重点研发计划资助项目(2019YFA0405300,2019YFA0405203)
作者简介:蒋浩(1992—),男,四川茂县人,博士研究生,E-mail:jiangjeb@163.com;
柳军(通信作者),男,研究员,博士,博士生导师,E-mail:liujun@nudt.edu.cn

来的刚性,这是由于局部流场的流动特征时间可能与能量松弛、化学反应特征时间量级尺度存在极大差异,使得控制方程中相应源项的量级相差太大,进而在时间推进求解时出现收敛困难甚至发散的问题。第二类是由网格加密带来的刚性,热化学非平衡流动计算特别是热流计算对壁面网格加密要求极高,通常要求当地声速网格雷诺数小于10[3];另外,激波/边界层干扰等复杂流动要求在局部流场参数梯度较大的区域进行网格加密,这进一步加剧了网格刚性的问题。基于上述两种因素分析,热化学非平衡流程序相比完全气体程序,稳定性和鲁棒性较差,为满足稳定性限制,热化学非平衡流动计算库朗数(Courant-Friedrichs-Lewy, CFL)一般取值较小,特别在采用显式时间推进格式时,该问题极为突出[4]。为此,在热化学非平衡流实际计算中一般选用稳定性较好的隐式格式,通过预处理方法以放宽线性方程组迭代求解对时间步长的限制。

美国从20世纪80年代开始热化学非平衡CFD研究,为了解决化学反应源项的刚性问题,Bussing和Murman[5]提出将化学反应源项进行隐式处理,由于隐式项不需进行空间差分离散处理,只考虑本单元数据对本单元残差的贡献,故该算法被称作点隐式格式。在此基础上, Eberhardt和Imlay[6]提出了化学反应源项Jacobian矩阵的对角化形式,简化了化学反应源项的隐式处理。为进一步提高CFL数,有必要增加对流项的隐式处理,Yoon和Jameson[7]提出了LU-SGS(lower-upper symmetric Gauss-Seidel)算法,该算法通过正负分裂对流项Jacobian矩阵,将线性方程组左手项分解为三个子矩阵,因而避免了复杂矩阵求逆过程。LU-SGS算法最初被用于跨声速的流动求解,之后被推广到高超声速流动计算中,成为热化学非平衡流定常计算中最为通用的隐式时间推进算法。Chen和Wang[8]在完全气体LU-SGS算法基础上发展了BLU-SGS (block LU-SGS)算法,该算法在保证隐式系统对角特性的基础上,在每次更新中嵌入内迭代过程,通过内迭代过程中的上扫和下扫引入非对角块的贡献。另外,相比LU-SGS这类线性迭代求解算法,学者还研究了GMRES (generalized minimum residual)等非线性迭代求解算法[9-10],进一步提高了高超声速流动计算效率。

尽管在完全气体计算中,Tysinger[11]、曹文斌[12]等研究发现,对黏性项隐式处理可提高计算效率,然而由于高温热化学非平衡流动控制方程包含多组分及多温度,相比完全气体其控制方程变量和方程数目增多,其中黏性项Jacobian矩阵推导过程复杂,国内外高温程序对黏性项的隐式处理则较少见诸报道[4,13-15]。另外,国内赵慧勇[16]在用于燃烧计算的化学非平衡流程序中植入了考虑黏性项隐式处理的LU-SGS算法,但未考虑热非平衡效应且未对其加速特性进行讨论。

本文基于结构网格有限差分法,总结提出热化学非平衡流动计算中强数值刚性带来的收敛困难问题;给出热化学非平衡流黏性项Jacobian矩阵的推导结果,并在时间推进算法中对该部分矩阵采取对角简化形式,实现对化学反应源项、对流项、黏性项的全隐处理,将完全气体条件下的FLU-SGS及BLU-SGS算法推广到热化学非平衡流动计算中;针对高超声速热化学非平衡二维圆柱实验和轴对称返回舱实验算例,对比算法改进前后的加速收敛特性。

1　热化学非平衡流控制方程

热力学模型采用Park双温度模型[17],采用的化学反应模型为11组元(N_2、O_2、NO、NO^+、N_2^+、O_2^+、N^+、O^+、N、O、e^-)化学反应模型,化学动力学模型采用20反应Gupta模型[18]。由于三维和二维控制方程形式类似,本文仅给出直角坐标系下二维热化学非平衡守恒形式的N-S方程组:

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial y}=\frac{\partial \boldsymbol{E}_{\mathrm{v}}}{\partial x}+\frac{\partial \boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}}{\partial y}+\boldsymbol{W} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{U}=(\rho,\rho_i,\rho u,\rho v,\rho e_{\mathrm{t}},\rho e_{\mathrm{v}})^{\mathrm{T}} \tag{2}$$

其中:$\boldsymbol{E}$和$\boldsymbol{F}$是对流项;$\boldsymbol{E}_{\mathrm{v}}$和$\boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}$是黏性项;$\boldsymbol{W}$是源项;$\rho$是总密度;$\rho_i$分别为11个组元的密度;$u$和$v$是速度分量;$e_{\mathrm{t}}$和$e_{\mathrm{v}}$分别为混合气体的单位质量总能和振动能。将上述控制方程进行坐标变换,得到计算坐标系下的形式:

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{U}}}{\partial t}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{E}}}{\partial \xi}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}}{\partial \eta}=\frac{\partial \hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial \xi}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{v}}}{\partial \eta}+\hat{\boldsymbol{W}} \tag{3}$$

2　热化学非平衡流全隐LU-SGS算法

2.1　黏性项隐式处理

热化学非平衡流原始LU-SGS算法[13-15]在隐式处理方面仅考虑化学反应源项和对流项,即:

$$\frac{\hat{\boldsymbol{U}}^{n+1}-\hat{\boldsymbol{U}}^{n}}{\Delta t}=-\left(\frac{\partial \hat{\boldsymbol{E}}}{\partial \xi}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}}{\partial \eta}\right)^{n+1}+\left(\frac{\partial \hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial \xi}+\frac{\partial \hat{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{v}}}{\partial \eta}\right)^{n}+\hat{\boldsymbol{W}}^{n+1} \tag{4}$$

其中,Δt是时间步长。本文在式(4)基础上,新增对黏性项的隐式处理:

$$\frac{\hat{\boldsymbol{U}}^{n+1}-\hat{\boldsymbol{U}}^{n}}{\Delta t}=-\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}}{\partial\eta}\right)^{n+1}+\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{v}}}{\partial\eta}\right)^{n+1}+\hat{\boldsymbol{W}}^{n+1}\tag{5}$$

由于对流项仅是守恒变量的函数,将其进行线化处理,可利用时间方向上的泰勒展开:

$$\Delta\hat{\boldsymbol{E}}^{n}=\hat{\boldsymbol{A}}^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}+O(\Delta t^{2})\tag{6}$$

其中,$\hat{\boldsymbol{A}}$ 是 ξ 方向上的 Jacobian 矩阵,即 $\hat{\boldsymbol{A}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}^{n}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}^{n}}$;$O(\Delta t^{2})$是时间步长的二阶无穷小。然而,对于黏性项,其不仅是守恒变量的函数,还是守恒变量梯度的函数,该项的泰勒展开形式与对流项不同,故采用薄层近似假设,参考 Beam 和 Warming[19] 的推导,黏性项可展开为:

$$\begin{aligned}\Delta\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}^{n}&=\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}}\right)^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}+\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}_{\xi}}\right)^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{\xi}^{n}+O(\Delta t^{2})\\&=\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}}\right)^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}+\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}_{\xi}}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}\right)^{n}-\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}_{\xi}}\right)^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}+O(\Delta t^{2})\\&=(\hat{\boldsymbol{P}}-\hat{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{v},\xi})^{n}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}+\frac{\partial}{\partial\xi}(\hat{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{v}}\Delta\hat{\boldsymbol{U}})^{n}+O(\Delta t^{2})\end{aligned}\tag{7}$$

其中,$\hat{\boldsymbol{P}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}},\hat{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{v}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}_{\xi}}$。在输运系数冻结假设下,式(7)中的 $\hat{\boldsymbol{P}}-\hat{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{v},\xi}=\boldsymbol{0}$。另外,化学反应源项隐式处理采用对角近似形式。因此,式(4)的控制方程可化为离散形式:

$$\left\{\boldsymbol{I}+\theta\Delta t\left[\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{A}}^{n}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{B}}^{n}}{\partial\eta}\right)-\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{v}}^{n}}{\partial\xi^{2}}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{v}}^{n}}{\partial\eta^{2}}\right)-\mathrm{diag}\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{W}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}}\right)^{n}\right]\right\}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{n}=\Delta t\cdot RHS\tag{8}$$

类似地,$\hat{\boldsymbol{B}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}^{n}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}^{n}},\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{v}}=\dfrac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{v}}}{\partial\hat{\boldsymbol{U}}_{\eta}}$;右手项

$$RHS=-\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}}{\partial\eta}\right)^{n}+\left(\frac{\partial\hat{\boldsymbol{E}}_{\mathrm{v}}}{\partial\xi}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{v}}}{\partial\eta}\right)^{n}+\hat{\boldsymbol{W}}^{n}\tag{9}$$

其由空间离散得到,对流项离散格式采用 AUSMPW,黏性项离散格式采用二阶中心差分。

由于高超声速定常流动计算对时间精度要求不高,且黏性项 Jacobian 矩阵形式复杂,求逆需耗费大量计算时间,因此通常采用相应的矩阵谱半径进行对角近似处理,以保证左手项部分对角占优。经推导(推导过程见本文 OSID 拓展阅读资料),热化学非平衡流计算坐标系 k 方向上黏性项 Jacobian 矩阵的谱半径为:

$$\lambda=\frac{1}{Re}(k_x^2+k_y^2)\cdot\Gamma\tag{10}$$

其中,

$$\Gamma=\max\left(D_i,\frac{4\mu}{3\rho},\frac{K}{\rho C_{\mathrm{v}}},\frac{K_{\mathrm{v}}}{\sum\limits_{s=mol}\rho_i\dfrac{e_{\mathrm{v},i}\theta_{\mathrm{v},i}\mathrm{e}^{\theta_{\mathrm{v},i}/T_{\mathrm{v}}}}{(\mathrm{e}^{\theta_{\mathrm{v},i}/T_{\mathrm{v}}}-1)T_{\mathrm{v}}^{2}}}\right)$$

D_i 是组元扩散系数,K、K_{v} 分别是混合气体平动和振动热传导系数,C_{v} 是定容比热比,T_{v} 是振动温度,$e_{\mathrm{v},i}$是分子组元的振动能,$s=mol$ 代表所有的分子组元,详细定义参见文献[20]。

2.2　FLU-SGS 算法

参考原始 LU-SGS 算法,对式(8)进行近似 LU 分解,再使用一次对称 Gauss-Seidel 迭代,则时间推进可化为三个步骤:

1)向前扫描:

$$\begin{aligned}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{*}=\Delta t\cdot\boldsymbol{D}^{-1}[&RHS+(\hat{\boldsymbol{A}}_{i-1,j}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j-1}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})+\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})]\end{aligned}\tag{11}$$

2)向后扫描:

$$\begin{aligned}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}=\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{*}-\Delta t\cdot\boldsymbol{D}^{-1}[&(\hat{\boldsymbol{A}}_{i+1,j}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{n}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j+1}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{n})-\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{n}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{n})]\end{aligned}\tag{12}$$

3)守恒量更新:

$$\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{n+1}=\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{n}+\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}\tag{13}$$

此外,本文采用当地时间步方法计算每个网格点的 Δt。

2.3　BLU-SGS 算法

与 LU-SGS 算法不同的是,BLU-SGS 算法在每次守恒量更新步内还包含了 $s_{\max}$ 次松弛迭代。若 $s_{\max}=1$,则退化到 LU-SGS 算法;对于不同的算例,内迭代数 $s_{\max}$ 存在着不同的最优值[11]。第 s 次内迭代表达式如下:

1)向前扫描:

$$\begin{aligned}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{*}=\Delta t\cdot\boldsymbol{D}^{-1}[&RHS+(\hat{\boldsymbol{A}}_{i-1,j}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j-1}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})+\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})-\\&(\hat{\boldsymbol{A}}_{i+1,j}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{s-1}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j+1}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{s-1})+\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{s-1}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{s-1})]\end{aligned}\tag{14}$$

2)向后扫描:

$$\begin{aligned}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{s}=\Delta t\cdot\boldsymbol{D}^{-1}[&RHS+(\hat{\boldsymbol{A}}_{i-1,j}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j-1}^{+}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})+\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i-1,j}^{*}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j-1}^{*})-\\&(\hat{\boldsymbol{A}}_{i+1,j}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{s}+\hat{\boldsymbol{B}}_{i,j+1}^{-}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{s})+\\&(\lambda_A^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i+1,j}^{s}+\lambda_B^{\mathrm{v}}\boldsymbol{I}\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j+1}^{s})]\end{aligned}\tag{15}$$

式(14)中,初始条件 $\Delta\hat{\boldsymbol{U}}^{0}=\boldsymbol{0}$,上述前、后扫

描经过 s_{max} 次循环后，守恒量更新：

$$\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{n+1}=\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{n}+\Delta\hat{\boldsymbol{U}}_{i,j}^{s_{max}} \tag{16}$$

3　数值结果

3.1　二维圆柱绕流

3.1.1　来流条件及计算结果

本算例基于高焓激波风洞 HEG 中开展的准二维圆柱绕流实验[21]，风洞来流焓值 21.7 MJ/kg，计算采用的气体模型是 11 组元空气，壁面条件为等温全催化壁面，圆柱半径 R 为 45 mm，详细风洞来流条件和计算条件见表 1。网格分布最终采用 249×39，经过网敏感性分析后，最终壁面第一层距离采用 3×10^{-7} m，当地声速网格雷诺数达到 6.7，满足热流计算网格收敛性条件[3]。

表 1　二维圆柱算例来流条件

Tab. 1　Inflow conditions for 2D cylinder case

参数	实验	计算
来流气体	空气	空气
静压/Pa	476.0	488.8
静温/K	901	910
密度/(kg/m^3)	1.547×10^{-3}	1.550×10^{-3}
马赫数	8.98	8.76
速度/(m/s)	5 956	5 956

图 1 为圆柱绕流无量纲压力云图，结果显示本文程序能较好地捕捉到激波位置，流场中各物理量计算结果比较合理。图 2 是圆柱壁面热流 Q_w 计算结果与实验结果对比，可以看出壁面热流计算值与实验值符合良好，验证了本文数值方法的正确性。

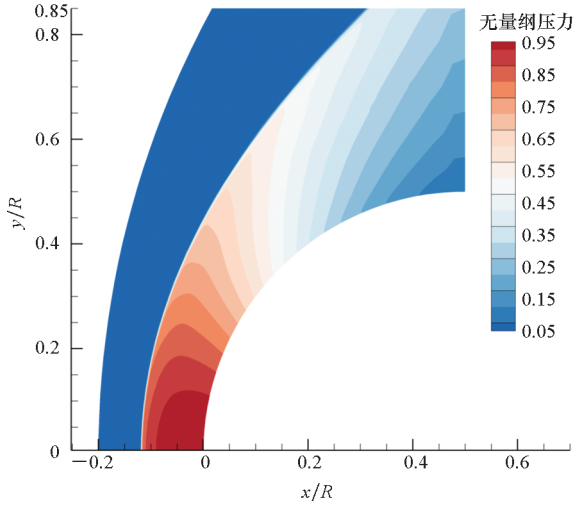


图 1　圆柱绕流无量纲压力云图

Fig. 1　Dimensionless pressure contour for cylinder case

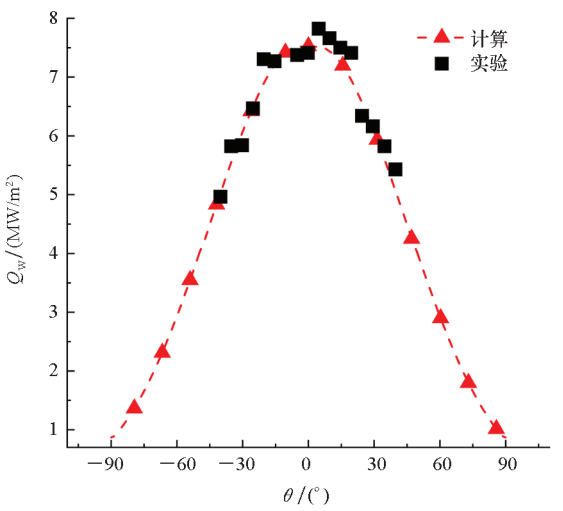


图 2　圆柱壁面热流对比结果

Fig. 2　Comparison of the heat flux of cylinder wall

3.1.2　三类 LU-SGS 算法收敛速率对比

高超声速计算普遍采用来流条件作为初场，计算流场普遍经历以下过程：从流动在壁面附近滞止、形成脱体激波或分流区，直至收敛呈现为稳定的流场结构，其中流场基本结构的建立是整个计算过程中数值刚性最强的步骤。因此，在计算初期只能采用较低的 CFL 数以避免发散，待激波、边界层、分离等流动特征稳定建立后，才能逐步增大 CFL 数。在此，首先给出最大 CFL 数的定义：在该类格式下密度残差 $\Delta\rho$ 能收敛到机器误差(10^{-12})的 CFL 数的最大值。为比较三类算法在计算初期所能采用的最大 CFL 数，在数值实验中采用恒定 CFL 数进行计算。

图 3 为针对圆柱算例开展的关于三种 LU-SGS 算法收敛速率的数值实验结果。结果发现，

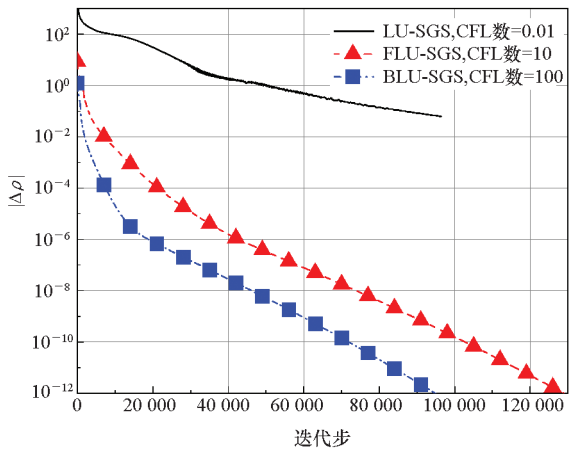


图 3　圆柱算例三种 LU-SGS 算法收敛速率对比

Fig. 3　Comparison of the convergence rate between three LU-SGS algorithms for cylinder case

三类 LU-SGS 方法的最大 CFL 数不同，采用原始 LU-SGS 算法，最大的 CFL 数取值约为 0.01，而 FLU-SGS 算法的最大 CFL 数为 10 量级，BLU-SGS 的最大 CFL 数可取到 100 量级，达到机器误差的迭代步约为 FLU-SGS 的 73.4%。

因此，增加黏性项隐式处理的 FLU-SGS 和 BLU-SGS 算法由于在计算中考虑了黏性干扰的流场信息，故能快速建立边界层。两类改进算法在 20 000 步前的收敛速率较大，而在此之后由于流动结构基本不变，收敛速率出现拐点，密度残差的收敛曲线近似呈线性，直至收敛到机器误差。另外，在近期文献[14]报道中，也对本节同样算例采用 LU-SGS 算法进行了热化学平衡流场计算，其 CFL 数取值为 5，可见本文改进算法对提升收敛速率有较大优势。

3.1.3　CFL 数对 FLU-SGS 算法收敛的影响

图 4 对比了 CFL 数为 10、100 和 1 000 下采用 FLU-SGS 算法的收敛速率。结果表明，随着 CFL 数取大，前期收敛速率加快。尽管采用全隐算法后，初始 CFL 数能够取到 1 000，但当残差降低到 10^{-8} 后呈现周期振荡现象；当 CFL 数进一步取到 10 后，该种振荡现象能够消除，并能降低到机器误差。另外，虽然在大 CFL 数条件下的收敛后期，密度残差会出现周期振荡，但当其降低到 10^{-6} 以下后，流动结构和壁面参数的实际变化很小，可近似认为收敛。

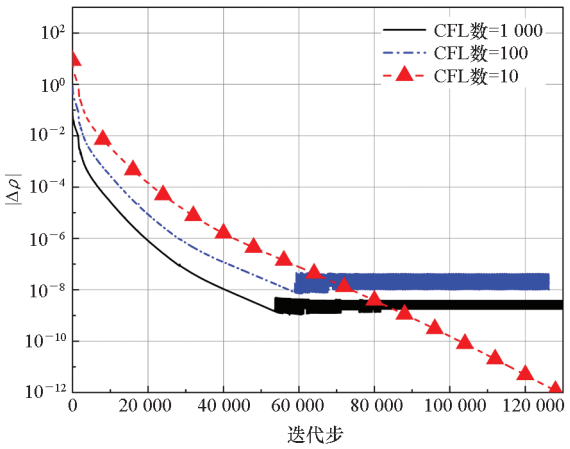
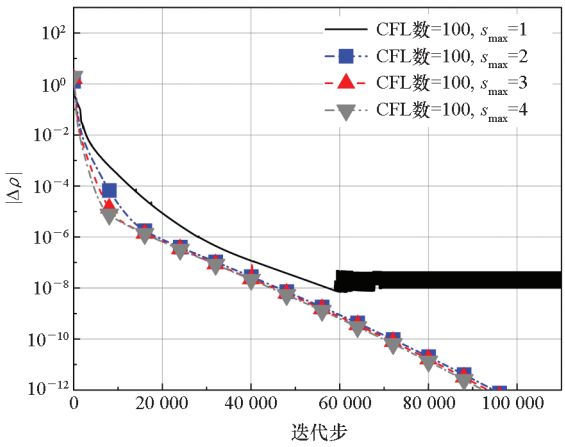


图 4　圆柱算例中 CFL 数对 FLU-SGS 收敛速率的影响

Fig. 4　Effect of CFL number on the convergence rate of FLU-SGS for cylinder case

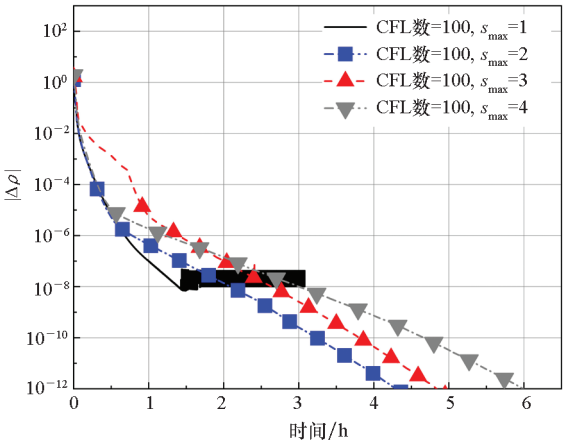
3.1.4　内迭代数对 BLU-SGS 算法收敛的影响

图 5 是内迭代数 s_{max} 对 BLU-SGS 收敛速率的影响，可以看出在大 CFL 数条件下，增加 s_{max} 抑制了计算后期的残差振荡，增加了收敛的稳定性。虽然 s_{max} 越大，密度残差随迭代步的收敛速度加快，但是从计算机时角度看，增加 s_{max} 耗时更多。



（a）密度残差随迭代步的变化

（a）Variation of density residual with iteration number



（b）密度残差随计算时间的变化

（b）Variation of density residual with computing time

图 5　圆柱算例中内迭代数对 BLU-SGS 收敛速率的影响

Fig. 5　Effect of inner sweeps number on the convergence rate of BLU-SGS for cylinder case

3.2　轴对称返回舱绕流

3.2.1　来流条件及计算结果

本算例基于 Hollis 在 HYPULSE 膨胀管风洞对 MP－1 返回舱实验模型的测量结果[22]。采用本文程序对该实验进行复现，实验模型是返回舱－支杆的构型，其中，支杆为固定装置，返回舱半径 $R = 0.025\ 4$ m。由于模型是轴对称构型，图 6仅展示 xy 截面，其网格分布为 208 × 119。来流条件为：马赫数 $Ma = 7.93$，速度 $U_\infty = 5.162$ km/s；压强 $P_\infty = 1\ 824$ Pa；平动温度 $T_\infty = 1\ 113$ K；振动温度 $Tv_\infty = 1\ 113$ K；来流雷诺数为 668 000；来流组元为空气（N_2 和 O_2 质量分数分别为 79% 和 21%），壁面采用等温、无滑移、非催化壁条件，壁面温度为 300 K。

图 6 显示了返回舱绕流的无量纲速度云图，

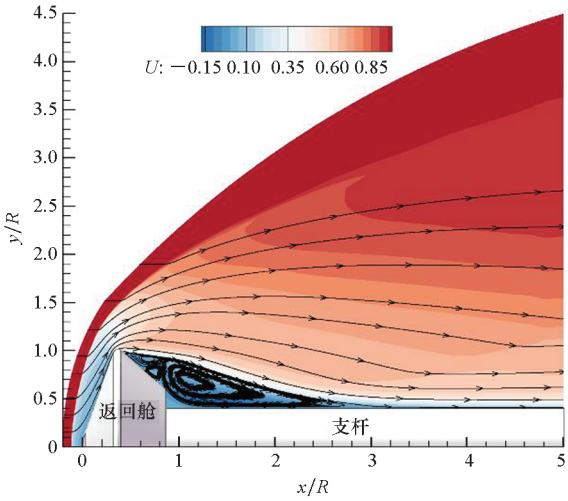


图6　返回舱算例无量纲 x 方向速度云图

Fig. 6　Dimensionless x-velocity contour for re-entry capsule case

高速气流撞击返回舱前端产生脱体激波，波后形成强烈的压缩，前体部分是附着流动，流动在返回舱肩点之后发生了分离，并在尾部区域和支杆之间形成大型分离区，分离区内部有两对涡对，流动进而在支杆上再附，形成再附激波，支杆下游保持边界层附着流动。

3.2.2　三类 LU-SGS 算法收敛速率对比

图7对比了三类 LU-SGS 方法的收敛速率。由于返回舱绕流比圆柱绕流的流场结构更为复杂，在原始 LU-SGS 算法下的初始计算中，最大 CFL 数仅能取到 10^{-4} 量级，因而收敛过程极为缓慢。采用 FLU-SGS 算法能将最大 CFL 数大幅提升到1的量级，但是后期收敛速率有所降低。BLU-SGS 算法最大 CFL 数量级能达到10，能实现快速收敛，达到机器误差的迭代步仅为 FLU-SGS 的8.5%。

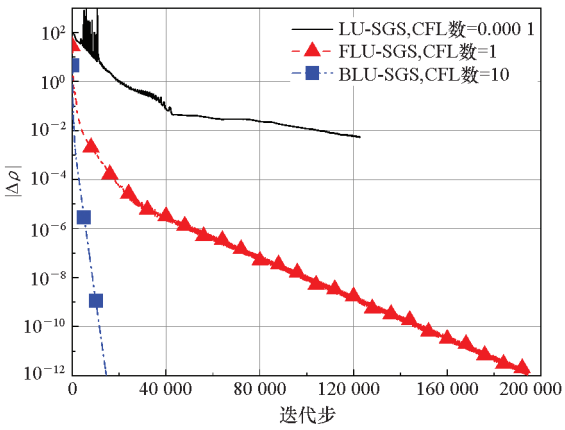


图7　返回舱算例三种 LU-SGS 算法收敛速率对比

Fig. 7　Comparison of the convergence rate between three LU-SGS algorithms for re-entry capsule case

3.2.3　CFL 数对 FLU-SGS 算法收敛的影响

图8对比了 CFL 数为1、10和100下采用 FLU-SGS 算法的收敛速率。结果表明，随着 CFL 数取大，前期收敛速率加快。同圆柱算例类似，在大 CFL 数下，残差降低到 10^{-3} 后呈现周期振荡现象，当 CFL 数进一步取到1后，该种振荡现象能够消除，并能降低到机器误差。由于采用二阶格式，该类残差振荡现象与过激波参数在两个网格间跳动等因素相关。

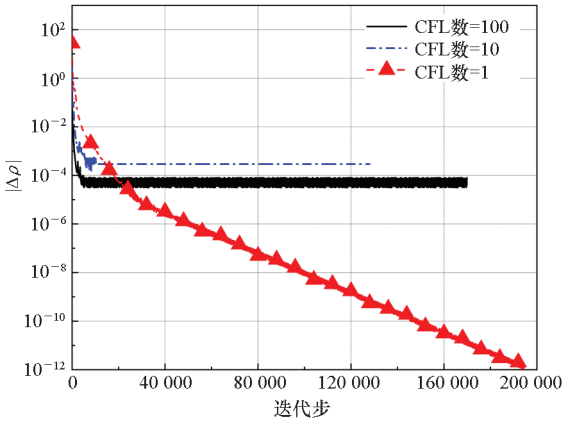


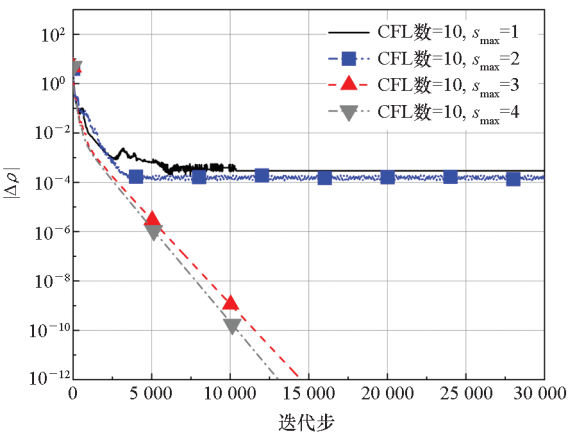
图8　返回舱算例 CFL 数对 FLU-SGS 收敛速率的影响

Fig. 8　Effect of CFL number on the convergence rate of FLU-SGS for re-entry capsule case

3.2.4　内迭代数对 BLU-SGS 算法收敛的影响

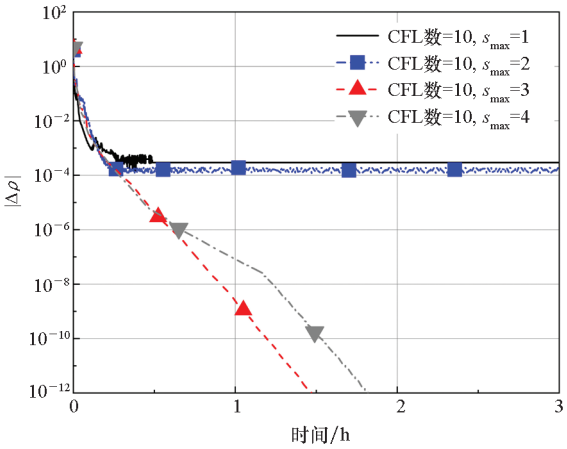
图9是内迭代数 s_{max} 对 BLU-SGS 算法收敛速率的影响，可以看出在 CFL 数为10、$s_{max}=1$ 时，BLU-SGS 算法退化为 FLU-SGS 算法，内迭代数 s_{max} 增加到3时才能抑制计算后期的残差振荡。

当内迭代数 s_{max} 继续增加到4后，总密度残差随迭代步的收敛速度加快，计算机时有所增加。因此在实际复杂工程外形计算中，为兼顾计算稳定性和计算效率，选用 BLU-SGS 算法最佳，且在



（a）密度残差随迭代步的变化

（a）Variation of density residual with iteration number



（b）密度残差随计算时间的变化

（b）Variation of density residual with computing time

图 9　返回舱算例内迭代数对 BLU-SGS 收敛速率的影响

Fig. 9　Effect of inner sweeps number on the convergence rate of BLU-SGS for re-entry capsule case

满足收敛到机器误差的要求下，内迭代数 s_{max} 视情况可选取 2 至 4，因为该参数取值过大对收敛性没有明显的增益，且浪费计算机时。

4　结论

1）在高温热化学非平衡流计算中，考虑黏性项隐式处理的两种全隐 LU-SGS 算法引入了跨越边界层的黏性影响，能够快速建立强黏性干扰初场，实现初始最大 CFL 数 3 ~ 5 个数量级的提升。

2）BLU-SGS 算法通过增加内迭代数能提升计算稳定性，在高超声速热化学非平衡计算中准确性高、可靠性强、收敛速率快，适合复杂流场计算。

3）随着 CFL 数升高，计算稳定性有所降低，残差曲线表现小范围周期振荡，该现象与时间推进格式、对流格式、网格分布、流场非定常特性等因素相关，要进一步抑制该现象，需从构造适用于热化学非平衡流动的数值格式、提高数值格式精度和提升网格质量入手。

致谢

中国空气动力研究与发展中心赵慧勇研究员在公式推导方面提供了帮助和指导，谨致谢意！

参考文献（References）

[1] 小约翰·D. 安德森. 高超声速和高温气体动力学[M]. 杨永，李栋，译. 北京：航空工业出版社，2013.
JOHN D A Jr. Hypersonic and high-temperature gas dynamics[M]. Translated by YANG Y, LI D. Beijing: Aviation Industry Press, 2013. (in Chinese)

[2] ROMERE P O, YOUNG J C. Space shuttle entry longitudinal aerodynamic comparisons of flight 2 with preflight predictions[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1983, 20(6): 518 - 523.

[3] LUO S C, LIU J, LI K. Grid convergence and influence of wall temperature in the calculation of thermochemical non-equilibrium heat flux [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2020, 53(28): 285502.

[4] VOLPIANI P S. Numerical strategy to perform direct numerical simulations of hypersonic shock/boundary-layer interaction in chemical nonequilibrium [J]. Shock Waves, 2021, 31(4): 361 - 378.

[5] BUSSING T R A, MURMAN E M. Finite-volume method for the calculation of compressible chemically reacting flows[J]. AIAA Journal, 1988, 26(9): 1070 - 1078.

[6] EBERHARDT S, IMLAY S. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 1992, 6(2): 208 - 216.

[7] YOON S, JAMESON A. Lower-upper symmetric-Gauss-Seidel method for the Euler and Navier-Stokes equations[J]. AIAA Journal, 1988, 26(9): 1025 - 1026.

[8] CHEN R F, WANG Z J. Fast, block lower-upper symmetric Gauss-Seidel scheme for arbitrary grids[J]. AIAA Journal, 2000, 38(12): 2238 - 2245.

[9] BOCHAROV A N, EVSTIGNEEV N M, PETROVSKIY V P, et al. Implicit method for the solution of supersonic and hypersonic 3D flow problems with lower-upper symmetric-Gauss-Seidel preconditioner on multiple graphics processing units [J]. Journal of Computational Physics, 2020, 406: 109189.

[10] CHEN X L, FU S. Convergence acceleration for high-order shock-fitting methods in hypersonic flow applications with efficient implicit time-stepping schemes [J]. Computers & Fluids, 2020, 210: 104668.

[11] TYSINGER T, CAUGHEY D. Implicit multigrid algorithm for the Navier-Stokes equations [C]//Proceedings of the 29th Aerospace Sciences Meeting, 1991: 242.

[12] 曹文斌，李桦，丁国昊. 高超声速流动计算中 LU-SGS 隐式算法的应用[J]. 国防科技大学学报，2013，35(3)：18 - 23.
CAO W B, LI H, DING G H. Application of the implicit LU-SGS algorithm for hypersonic flows[J]. Journal of National University of Defense Technology, 2013, 35(3): 18 - 23. (in Chinese)

[13] MORTENSEN C H, ZHONG X L. Numerical simulation of hypersonic boundary-layer instability in a real gas with two-dimensional surface roughness[C]//Proceedings of the 45th AIAA Fluid Dynamics Conference, 2015: 3077.

[14] NASTAC G, WALDEN A, NIELSEN E J, et al. Implicit thermochemical nonequilibrium flow simulations on unstructured grids using GPUs [C]//Proceedings of AIAA Scitech Forum, 2021: 0159.

[15] 丁明松，江涛，董维中，等. 热化学模型对高超声速磁流体控制数值模拟影响分析[J]. 物理学报，2019，68(17)：

174702.
DING M S, JIANG T, DONG W Z, et al. Numerical analysis of influence of thermochemical model on hypersonic magnetohydrodynamic control [J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68(17): 174702. (in Chinese)

[16] 赵慧勇. 超燃冲压整体发动机并行数值研究[D]. 绵阳: 中国空气动力学研究与发展中心, 2005.
ZHAO H Y. Parallel numerical study of whole scramjet engine[D]. Mianyang: China Aerodynamics Research and Development Center, 2005. (in Chinese)

[17] PARK C. Two-temperature interpretation of dissociation rate data for N_2 and O_2[C]//Proceedings of the 26th Aerospace Sciences Meeting, 1988: 458.

[18] GUPTA R N, YOS J M, THOMPSON R A, et al. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30 000 K [R]. Virginia: NASA Langley Research Center, 1989.

[19] BEAM R M, WARMING R F. An implicit factored scheme for the compressible Navier-Stokes equations [J]. AIAA Journal, 1978, 16(4): 393 – 402.

[20] 李开. 高温真实气体条件下的磁控热防护机理研究[D]. 长沙: 国防科技大学, 2017.
LI K. Mechanism analysis of magnetohydrodynamic heat shield system including high temperature real gas effect[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2017. (in Chinese)

[21] KARL S, SCHRAMM J M, HANNEMANN K. High enthalpy cylinder flow in HEG: a basis for CFD validation [C]// Proceedings of the 33rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, 2003: 4252.

[22] BRIAN R. Experimental and computational aerothermodynamics of a Mars entry vehicle[R]. Virginia: NASA Langley Research Center, 1996.