

热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组 GMRES 算法研究



朱海涛, 吴耕宇, 李岩

中国航空研究院, 北京 100012

摘要: 高效求解热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组是支撑高超声速工程实践的重要手段。本文针对热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组化学反应源项和振动能源项引起的数值刚性问题, 采用低阶数值离散格式和源项雅可比(Jacobi)矩阵对角化技术构造预处理矩阵, 显著改善传统广义最小残差(GMRES)算法数值稳定性和计算效率。将化学反应源项雅可比矩阵对角化技术推广到热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组源项 Jacobian 的对角化, 推导了预处理矩阵的构造过程, 并通过预处理矩阵近似因子分解, 给出了基于矩阵三角分解对称高斯赛德尔(LU-SGS)预处理的 GMRES 算法计算流程。数值算例表明, 采用本文预处理方法所得高超声速流场计算结果与公认数据吻合良好; 相对于 Eberhardt 和 Ju 方法, 即使在较大库朗数(CFL)条件下, Kim 方法仍然可获得收敛解, 因此, Kim 的源项雅可比矩阵对角化方法具有更好的计算稳定性。

关键词: 化学反应源项; 振动能源项; 数值刚性; 雅可比矩阵对角化; GMRES 算法预处理; 热化学非平衡效应

中图分类号: V221.3

文献标识码: A

DOI: 10.19452/j.issn1007-5453.2025.07.006

高效求解热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组对高超声速工程实践具有重要意义。高超声速飞行器气动设计、热防护、舵面操作特性评估, 以及工作过程所处气动热力学环境的预测均有赖于数值求解热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组。相对于地面风洞试验、高空飞行试验的不确定性、复杂度和高昂成本, 计算流体力学(CFD)方法可以方便地获得较准确的流场信息, 并对影响飞行器性能、流场分布特征的关键因素, 开展单变量或任意多变量组合的定量分析。CFD 方法已同理论分析方法、风洞试验和飞行试验并列成为支撑高超声速工程实践的重要手段。然而, 高超声速流场中存在流动时间、高温化学反应时间、热平衡时间等多个时间尺度, 以及化学非平衡、热力学非平衡效应, 使得离散后控制方程组具有很强的数值刚性。因此, 数值求解热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组成为当今 CFD 领域的热点和难点问题^[1-2]。

隐式时间离散格式在处理强数值刚性问题中得到广泛应用。尽管显示格式使用方便、易于编程实现、单步计

量小, 但该类格式受稳定性条件限制, 在处理强数值刚性问题时, 必须采用很小的时间步长, 计算效率难以满足实际要求。相对而言, 大多隐式格式是无条件稳定的, 在处理强数值刚性问题时, 可以采用更大的时间步长, 在很大程度上能够提高计算效率。但是, 采用隐式方法后, 在每个时间推进步上均需求解一个大型线性方程组。因此, 大型线性方程组的求解效率成为决定隐式格式求解效率的关键因素^[3]。

广义最小残差(GMRES)算法是一种高效的线性方程组求解技术, 已成功应用于 CFD 多个数值模拟领域。GMRES 算法是由 Saad 等提出的具有二阶收敛速度的大型线性方程组求解方法。该方法利用 Arnoldi 方法构造 Krylov 子空间一组线性无关基矢量, 并通过修正的 Gram-Schmidt (MGS) 方法进行基向量的标准正交化; 最后, 通过求解最小二乘问题, 获得线性方程组在 Krylov 子空间上的最优近似解。由于 GMRES 算法是在 Krylov 子空间内面向全频率的残差最小化, 因此, 该方法具有多重网格加速收敛的

收稿日期: 2024-12-02; 退修日期: 2025-03-11; 录用日期: 2025-04-09

引用格式: Zhu Haitao, Wu Gengyu, Li Yan. Study on GMRES algorithm for non-equilibrium thermal and chemical Navier-Stokes equations [J]. Aeronautical Science & Technology, 2025, 36(7): 41-48. 朱海涛, 吴耕宇, 李岩. 热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组 GMRES 算法研究[J]. 航空科学技术, 2025, 36(7): 41-48.

特性^[4]。

GMRES算法应用于CFD领域主要面临两方面困难。一方面,离散系统系数矩阵条件数是决定该算法计算稳定性和收敛速度的关键因素,条件数越大、数值刚性越强,计算稳定性和收敛速度显著恶化。因此,需构造合适的预处理矩阵,对离散系统系数矩阵进行预处理,降低矩阵条件数。另一方面,源项通常是增大离散系统数值刚性的重要因素。源项雅可比矩阵对计算稳定性和收敛速度有重要影响。为此,需对源项(Jacobian matrix)矩阵的对角化技术进行专门研究,以提高隐式方法的计算效率。

Ajmani等^[5]优化了GMRES算法子空间数目,利用预处理矩阵的GMRES算法求解了二维定常可压缩雷诺平均Navier-Stokes(RANS)方程组,获得二维翼型跨声速绕流场;采用非结构网格,Nielsen等^[6]将该算法应用于三维Euler方程组的求解;Luo等^[7]采用矩阵不完全对角分解(ILU)和三角分解对称高斯赛德尔(LU-SGS)方法构造了GMRES预处理过程,应用于三维定常可压缩流动,计算表明,采用LU-SGS预处理的GMRES算法计算效率优于采用ILU预处理的GMRES算法和传统LU-SGS算法。张健等^[8]研究了GMRES在RANS方程组求解、非结构网格技术、非定常流动问题等领域的应用。针对化学反应源项Jacobian矩阵,Kim等^[9-11]提出了不同的对角化处理方法;王羽等^[12]采用上述三种对角化技术求解了高超声速无黏流动,分析表明Kim方法最具优势。Maier等^[13]开发了热化学非平衡Navier-Stokes方程组求解程序SU²-NEMO;该程序采用了预处理矩阵的GMRES算法,但并未研究预处理矩阵构造、化学反应源项和振动能源项处理方法等关键过程。

本文针对两温度热化学非平衡Navier-Stokes方程组,考虑化学反应源项和振动能源项的影响,采用源项雅可比矩阵对角化技术,构造了适用于GMRES算法的预处理矩阵,详细推导了基于LU-SGS预处理过程的GMRES算法,并对改进后的GMRES算法进行算例验证,对比了三种源项Jacobian矩阵对角化方法的计算稳定性。

1 控制方程组及其数值离散

本文求解的流动控制方程组为采用二温度模型的热化学非平衡Navier-Stokes方程组。该方程组在经典Navier-Stokes方程组的基础上,增加了描述化学反应和气体分子振动能激发态的数理方程项。补充化学反应模型、热力学

模型、化学反应-热力学非平衡效应模型和气体输运系数计算公式,构成封闭的、描述高超声速流场气动热力学状态的控制方程组

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}^e(\mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{F}^v(\mathbf{U}) + \mathbf{Q}(\mathbf{U}) \quad (1)$$

式中, $\mathbf{U}$ 为守恒变量列矢量, $\mathbf{F}^e$ 为对流通量矢量, $\mathbf{F}^v$ 为黏性通量矢量; $\mathbf{Q}$ 为源项矢量,由化学反应源项和振动能源项两部分组成。方程组中各项的具体表达式可参见参考文献[14]。化学反应模型采用5组分,17个化学反应的空气模型,包含离解和置换两种化学反应,化学反应速率根据Arrhenius经验公式计算。热力学模型考虑气体分子的平动-转动能和振动能两个模式,两种模式之间的能量传递满足Landau-Teller理论。采用Park优先离解模型;置换化学反应的控制温度为平动-转动温度,离解化学反应的控制温度由平动-转动温度和振动温度的几何平均值确定;由此建立化学反应非平衡与热力学非平衡之间的耦合关系。动力黏度、热导率(热导系数)和扩散系数均采用经验公式计算,具体计算公式可参见参考文献[14]。因此,式(1)由5个组分质量守恒方程、三个方向的动量守恒方程、总能量守恒方程和振动能方程,共10个方程组成。

在非结构混合网格上,采用格点格式有限体积法离散流动控制方程组(1):利用对流流通量迎风分裂方法(AUSM)离散对流项,对偶网格边界左右流场变量通过守恒律单调迎风格式(MUSCL)进行高阶重构获得,并增加Venkatakrishnan限制器和熵修正,抑制激波等流场强间断处的数值伪振荡;黏性项采用中心格式离散,格点处流场变量梯度值利用最小二乘法计算;源项利用分片线性函数近似,在控制体内进行积分,可得各个控制体上的半离散方程为

$$\begin{aligned} W_i \frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \sum_{j \in N(i)} (\hat{\mathbf{F}}_{ij}^e - \hat{\mathbf{F}}_{ij}^v) \Delta S_{ij} - W_i \hat{\mathbf{Q}} = \\ W_i \frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \hat{\mathbf{R}}_i(\mathbf{U}) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

式中, W_i 为网格点*i*对应的控制体积; $N(i)$ 是与点*i*相邻的网格点集, j 是与点*i*相邻的点, ΔS_{ij} 是网格边*ij*对应的对偶网格面积; $\bar{\mathbf{U}}$ 为流场守恒变量矢量在控制体内的平均值, $\hat{\mathbf{F}}_{ij}^e$ 、 $\hat{\mathbf{F}}_{ij}^v$ 分别是对流和黏性通量矢量在控制体边界上的值, $\hat{\mathbf{Q}}$ 是源项在控制体内的积分值; $\hat{\mathbf{R}}_i$ 为包括对流项、黏性项和源项的空间离散部分,即残差矢量项。

时间离散采用Euler向后隐式离散格式,并对残差项 $\hat{\mathbf{R}}_i$ 进行线性化可得

$$\left[\frac{W_i \mathbf{I}}{\Delta t} + \left(\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{U}} \right)_i \right] \Delta \bar{\mathbf{U}}^n = -\hat{\mathbf{R}}_i^n \quad (3)$$

式中, n 为当前时间离散步, $\mathbf{I}$ 为 10 阶单位矩阵, $\Delta \bar{\mathbf{U}}^n = \bar{\mathbf{U}}^{n+1} - \bar{\mathbf{U}}^n$ 为守恒变量时间增量, $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{U}$ 为残差矩阵, 由对流项、黏性项和源项矩阵组成。在每个控制体上, $(\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{U})_i^n$ 仅包括控制体 i 离散模板上的控制体单元。将每个控制体上的离散方程组装在一起, 则形成一个大型稀疏矩阵线性方程组, 记为

$$\mathbf{A} \Delta \bar{\mathbf{U}}^n = -\hat{\mathbf{R}}^n \quad (4)$$

稀疏矩阵 $\mathbf{A}$ 为 $N \times N$ 阶的块矩阵, N 为网格点数, 每个子块为 10×10 阶系数矩阵。将边界条件施加到线性方程组(4)后, 即可利用直接法、迭代法、Krylov 子空间方法等线性方程组求解方法获得第 n 个时间步上的数值流场。

2 GMRES 算法

在热化学非平衡流场中, 存在流动、化学反应和热力学三个时间尺度; 当流动特征时间显著小于化学反应和热力学平衡时间时, 出现热化学非平衡效应。这是高超声速热化学非平衡流场难以对其进行高效数值模拟的物理机制。从数值计算的角度来看, 由于源项的存在, 式(4)系数矩阵的条件数特别大, 是典型的病态矩阵。采用直接法、迭代法均难以求解, 即使直接采用标准的 GMRES 方法, 其求解效率和稳定性也无法满足工程需求。

2.1 预处理矩阵的构造

为提高 GMRES 算法求解诸如式(4)病态线性方程组的计算效率和稳定性, 需构造合适的预处理矩阵。通过预处理过程, 使式(4)系数矩阵的特征值相互靠近, 集中在同一个数量级附近, 将预处理后线性方程组系数矩阵条件数尽可能趋于单位 1。常用的有左预处理矩阵和右预处理矩阵两种。本文采用左预处理矩阵。

对线性系统(4)两端乘以可逆左预处理矩阵 $\mathbf{M}^{-1}$ 可得

$$\mathbf{M}^{-1} \mathbf{A} \Delta \bar{\mathbf{U}}^n = -\mathbf{M}^{-1} \hat{\mathbf{R}}^n \quad (5)$$

如果预处理矩阵 $\mathbf{M}$ 满足: (1) 改变系数矩阵 $\mathbf{A}$ 的特征值分布, 有效降低矩阵 $\mathbf{A}$ 的条件数; (2) 矩阵的逆矩阵易于求取, 或通过等价变换, 变换后的线性系统具有良好的可解性, 则将该矩阵应用于 GMRES 算法预处理, 即可显著改善求解过程的计算效率和计算稳定性。由式(5)可知, 预处理矩阵不会改变原离散系统的数值解, 也不会降低离散系统的计算精度。因此, 有效的预处理矩阵需与具体的离散系统及其离散过程紧密耦合; 只要满足上述两个条件, 预处理

矩阵可根据实际计算需求进行构造。下面介绍本文预处理矩阵的构造过程。

在式(3)中, 用低阶数值格式离散方程组(1), 并将对流项、黏性项和源项的雅可比系数矩阵进行适当简化, 所得左侧系数矩阵作为本文采用的预处理矩阵。对流项采用具有一阶空间精度的通量差分格式离散; 在计算离散格式雅可比系数矩阵时, 冻结 Reo 平均矩阵, 则对角线和非对角线上的子块矩阵分别为

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{ii}^c &= \sum_{j \in N(i)} \frac{\Delta S_{ij}}{2} \left[\hat{\mathbf{J}}_i^c + |\mathbf{J}_{\text{Roe}}|_{ij} \right] \\ \hat{\mathbf{A}}_{ij}^c &= \frac{\Delta S_{ij}}{2} \left[\hat{\mathbf{J}}_j^c - |\mathbf{J}_{\text{Roe}}|_{ij} \right], j \in N(i) \end{aligned} \quad (6)$$

式中, $\hat{\mathbf{J}}_i^c$ 为网点 i 对流项对应的雅可比矩阵; $\mathbf{J}_{\text{Roe}}$ 为利用网点 i 和 j 流场值计算的 Roe 平均矩阵, $|\mathbf{J}_{\text{Roe}}|_{ij}$ 由 $\mathbf{J}_{\text{Roe}}$ 特征值的绝对值和左、右特征矢量确定, 是对流项离散格式中数值耗散项对雅可比系数矩阵的贡献。 $\hat{\mathbf{J}}_i^c$ 和 $|\mathbf{J}_{\text{Roe}}|_{ij}$ 的具体计算公式可参见参考文献[3]和[14]。黏性项由中心格式离散, 用黏性谱半径代替准确的黏性雅可比矩阵, 则对角线和非对角线上的子块矩阵为

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{ii}^v &= \sum_{j \in N(i)} \Delta S_{ij} \lambda_i \mathbf{I} \\ \hat{\mathbf{A}}_{ij}^v &= -\Delta S_{ij} \lambda_j \mathbf{I}, j \in N(i) \end{aligned} \quad (7)$$

式中, λ_i 为黏性, 雅可比矩阵的近似谱半径, 具体计算公式参见参考文献[14]。源项采用分片常数近似, 即用每个控制体内流场信息计算源项积分值, 即源项雅可比矩阵仅有对角线上的子块矩阵。将 Kim、Eberhardt、Ju 分别提出的化学反应源项雅可比矩阵对角化方法推广到包含振动能源项的情形。Kim 方法直接取源项雅可比矩阵对角线上的元素进行对角化, 即

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{ii}^{\text{kim}} &= \mathbf{A} \\ A_{jj} &= \frac{\partial Q_j}{\partial U_j}, j = 1, 2, \dots, 10 \end{aligned} \quad (8)$$

Eberhardt 方法^[10]用源项雅可比矩阵每行的 L_2 范数进行对角化, 即

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{ii}^{\text{Eber}} &= \mathbf{A} \\ A_{jj} &= \left[\sum_{k=1}^{10} \left(\frac{\partial Q_j}{\partial U_k} \right)^2 \right]^{1/2}, j = 1, 2, \dots, 10 \end{aligned} \quad (9)$$

Ju 方法在对角化过程中考虑了化学反应正、逆反应速率的差异。这种处理方式无法直接推广至振动能源项。因此, 振动能源项采用 Kim 方法, 即仅取源项雅可比矩阵对角线上的元素, 即

$$\hat{A}_{ii}^{\text{Ju}} = A$$

$$A_{ij} = \begin{cases} \max \left(\frac{\partial Q_j^f}{\partial U_j}, \frac{\partial Q_j^b}{\partial U_k} \right)_{k \neq j}, j=1, 2, \dots, 5 \\ 0, j=6, 7, 8, 9 \\ \frac{\partial Q_j}{\partial U_j}, j=10 \end{cases} \quad (10)$$

式中, Q_j^f 和 Q_j^b 分别为组分 j 正反应减少率和逆反应生成率。将式(6)~式(10)代入式(3)左端, 其对角线、非对角线上的子块矩阵为

$$M_{ii} = \frac{W_i}{\Delta t} I + \hat{A}_{ii}^c + \hat{A}_{ii}^v + \hat{A}_{ii}^s \quad (11)$$

$$M_{ij} = \hat{A}_{ij}^c + \hat{A}_{ij}^v, j \in N(i)$$

式中, $\hat{A}_{ii}^s$ 为对角化后的源项雅可比矩阵, 可分别通过上述 Kim、Eberhardt、Ju 三种方法计算。按照式(11)将所有控制体的子块矩阵装配在一起即为本文采用的预处理矩阵 M 。

2.2 采用 LU-SGS 预处理的 GMRES 算法

考虑带有预处理矩阵的线性系统(5), 为便于描述, 记

$$A = \left[\frac{W}{\Delta t} I + \left(\frac{\partial R}{\partial U} \right)^n \right] \quad (12)$$

$$x = \Delta \bar{U}^n$$

$$b = -\hat{R}^n$$

则式(5)等价于

$$M^{-1}Ax = -M^{-1}b \quad (13)$$

求解线性方程组(13)、带重启的 GMRES 算法流程见表1。表1给出了执行本文算法的伪代码, 其中 rst 为重启迭代次数, 最大为 K 次。

对上述带重启的 GMRES 算法做以下说明:

(1)在上述求解过程中, 残差项雅可比矩阵与矢量的乘积, 即 $(\partial R / \partial U)^n x$ 项, 采用无须显式存储与计算残差雅可比矩阵的差分法计算。该差分计算方法和求解伪代码第17行最小值问题的 $Q-R$ 方法可参见参考文献[3]。

(2)预处理矩阵 M 为具有一定带宽的稀疏矩阵, 其逆矩阵通常不再保持一定的带宽, 且直接计算逆矩阵所需的计算资源很大。对于有 M^{-1} 参加的计算, 以伪代码第三行为例, 将其变为等价形式

$$Mr_0 = v_0 \quad (14)$$

采用近似因子分解法将矩阵 M 近似为

$$M \approx (L + D)D^{-1}(D + U) \quad (15)$$

式中, L, U, D 分别为矩阵 M 不包括对角线元素的下三角、上三角和对角线矩阵, 则方程(14)可采用 LU-SGS 方法进行高效求解。可见, 预处理过程实际上是利用 LU-SGS 方法进行的。

表1 带重启的 GMRES 算法流程

Table 1 Procedure of GMRES algorithm with restart

行号	伪代码	注释
1	For $\text{rst}=1, K$ Do	K 次重启
2	$v_0 = b - Ax_0$	初始化
3	$r_0 = M^{-1}v_0$	预处理
4	$\alpha = \ r_0\ $	残差归一化
5	$v_1 = r_0/\alpha$	
6	For $j=1, m$ Do	构造 m 维正交基向量
7	$y_{j+1} = Av_j$	
8	$w_{j+1} = M^{-1}y_{j+1}$	
9	For $i=1, j$ Do	Gram-Schmidt 正交化过程
10	$h_{i,j} = w_{j+1} \cdot v_i$	
11	$w_{j+1} = w_{j+1} - h_{i,j}v_i$	
12	End Do(9)	
13	$h_{j+1,j} = \ w_{j+1}\ $	
14	$v_j = w_{j+1}/h_{j+1,j}$	
15	End Do(6)	
16	$\begin{cases} H = (h_{i,j}); \\ i=1, 2, \dots, m+1 \\ j=1, 2, \dots, m \\ h_{i,j}=0; i>j+1 \end{cases}$	构造上 Hessenberg 矩阵
17	$\bar{z} = \min_{z \in R^n} \ ae_1 - Hz\ $	应用 Q-R 方法求解最小值问题
18	$x = x_0 + \sum_{i=1}^m \bar{z}_i v_i$	更新解
19	If $\ ae_1 - H\bar{z}\ < \varepsilon$, Stop	小于收敛误差, 则终止计算; 否则重启
20	Else $x_0 = x$	
21	End If(19)	
22	End Do(1)	

3 算例验证

采用本文构造的预处理矩阵和第2节发展的基于 LU-SGS 方法的 GMRES 算法求解热化学非平衡 Navier-Stokes 方程组, 通过对球头模型、RAMC II 模型高超声速绕流场的数值模拟, 并与相关文献计算结果进行对比分析, 检验本文计算方法的有效性。针对源项 Jacobian 矩阵对角化技术, 通过算例测试, 研究了在不同库朗数(CFL)条件下 Kim、Eberhardt 和 Ju 三种方法的计算稳定性。

3.1 球头模型

球头模型的计算条件取自参考文献[15]: 球头半径 $r = 1.0 \text{ m}$, 飞行高度为 65 km , 飞行速度为 $V_\infty = 8000 \text{ m/s}$; 飞行高度空气静温 $T_\infty = 233.3 \text{ K}$, 静压 $p_\infty = 10.9 \text{ Pa}$; 基于球头半径的 $Re = 86286$ 。球头壁面采用完全非催化等温边界条件, 壁温 $T_w = 2000 \text{ K}$ 。与参考文献[15]中的二维计算不同, 本文计算取 $1/4$ 球面, 并采用周期性边界条件进行三维数值模拟。计

算网格为非结构混合网格,网格节点为65.3万,物面第一层网格对应的 $y^+ = 0.5$ 、网格增长率 $\gamma = 1.16$ 。

化学反应源项和振动能源项是导致离散系统(3)表现出强数值刚性的重要因素。对球头模型算例而言,即使在 $CFL = 0.1$ 的条件下,如果不采用预处理技术,原始GMRES算法也无法获得收敛解。图1给出了 $CFL = 0.5$ 和4.0的条件下,基于本文发展的GMRES预处理方法,并采用Kim、Eberhardt和Ju三种源项雅可比矩阵对角化技术所得的残差收敛曲线。可以看出,当 $CFL = 0.5$ 时,三种对角化技术具有几乎相同的收敛速度;相对而言,Eberhardt方法略优于其他两种方法。然而,当 $CFL = 4.0$ 时,Eberhardt和Ju方法计算发散,仅有Kim方法可以获得收敛解。

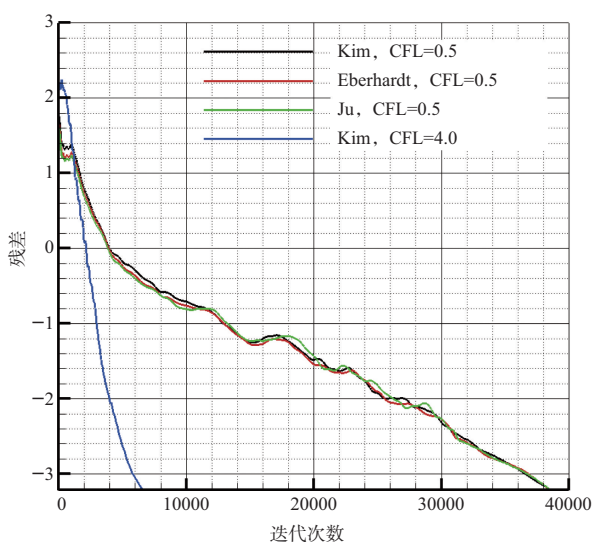


图1 不同CFL条件下,三种源项雅可比矩阵对角化方法的残差收敛曲线

Fig.1 Three kinds of diagonalized Jacobian residua convergence histories under different CFL numbers

获得收敛数值解后,在三维计算模型中每隔 10° 抽取一条 $1/2$ 经线,共抽取20条;同时,抽取20个通过该经线的子午面上的流场信息。对该20个子午面上的流场值进行算术平均即可得二维平均流场,20个半经线上热流的算术平均值作为二维平均流场的物面热流值。图2给出了 $CFL = 0.5$ 时,三种对角化方法二维平均流场压力分布云图与参考文献[15]二维计算结果的对比图。可以看出,本文三种对角化方法所得流场的激波位置、压力分布特征与参考文献结果基本吻合;三种对角化方法获得的二维平均流场几乎是一致的。由于本文是三维计算,可考虑流场沿纬线方向的流动,因此,在计算域出口附近激波强度有明显的降低,

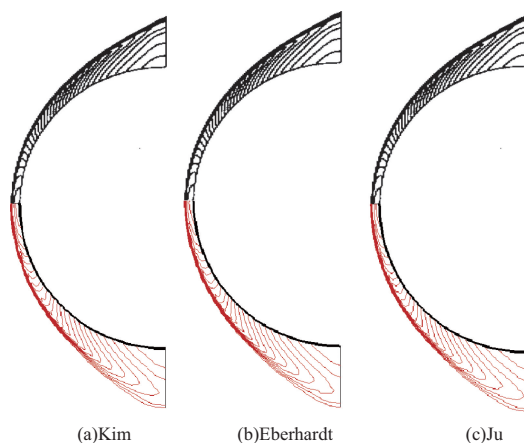


图2 球头模型二维平均流场压力分布(红色曲线)与参考文献[15]对比

Fig.2 Sphere model two dimensional averaged pressure contours(red lines) comparison with reference[15]

与文献计算结果存在一定差异。

图3给出了不同CFL条件下,三种源项雅可比矩阵对角化方法所得收敛数值解对应的二维平均流场物面热流值与参考文献[15]计算结果的对比图。可以看出,在计算收敛的前提下,三种对角化方法得到的数值结果基本相同,与参考文献结果也吻合良好。由上述分析可知,本文构造的GMRES预处理矩阵可以有效处理高超声速流场由热化学非平衡效应导致的数值刚性问题,并提高计算稳定性。在CFL较小的条件下,Kim、Eberhardt和Ju三种源项雅可比矩

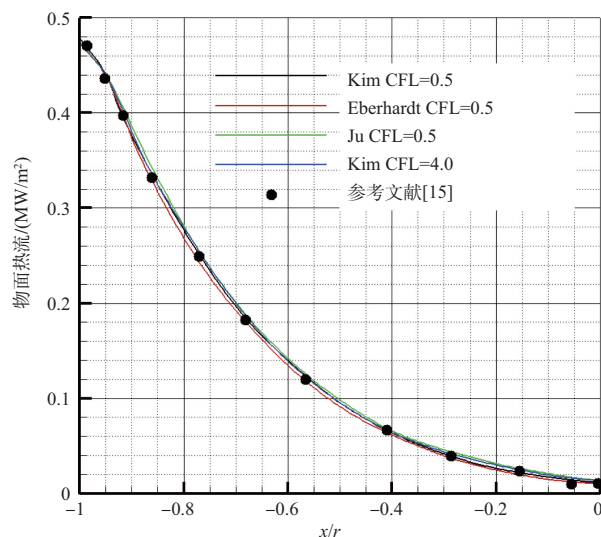


图3 不同CFL数条件下,球头模型二维平均流场物面热流分布曲线与参考文献[15]对比

Fig.3 Averaged two dimensional surface heat flux of sphere model comparison with reference[15]

阵对角化技术均可获得收敛解;当CFL数较大时, Kim方法具有更优的计算稳定性。

3.2 RAMC II模型

RAMC II模型由球形头部和圆锥形后体两部分构成;其中,头部球面的半径 $r=0.1524\text{ m}$,后锥体半顶角 $\theta=9^\circ$,轴向长度 $L=1.295\text{ m}$ 。本文选取的计算工况为:飞行高度 71 km ;飞行高度空气静压 $p_\infty=4.5\text{ Pa}$,静温 $T_\infty=216.8\text{ K}$;飞行马赫数 $Ma_\infty=25.9$,基于球半径的 $Re=5900$ 。物面采用完全非催化等温边界条件,壁温 $T_w=1500\text{ K}$ 。计算过程中采用周期性边界条件,取1/2几何模型进行三维数值模拟。计算网格为非结构混合网格,网格节点为247.7万,物面第一层网格对应的 $y^+=0.5$ 、网格增长率 $\gamma=1.12$ 。采用Kim源项雅可比矩阵对角化方法,CFL=3.0。

图4是RAMC II模型固壁上热流分布云图。可以看出,数值解具有较好的轴对称性,热流最大值位于头部球面的极点处;模型头部球形表面热流很大,沿球面经线方向,热流变化显著;锥形后体表面热流较小,热流值沿圆锥轴向变化较小。

参考文献[16]针对该模型开展了二维数值模拟。为了与该文献计算结果进行对比分析,需对本文三维计算结果进行后处理,以获得二维平均流场数据。在三维流场中,沿球面经线方向均匀抽取19子午面上的流场信息,进行算术平均后,即为二维平均流场。

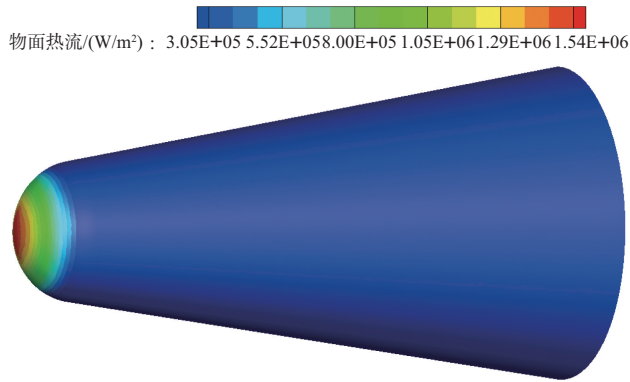


图4 RAMC II模型物面热流分布云图(单位: W/m^2)

Fig.4 Heat flux contour of RAMC II model(Unit: W/m^2)

图5和图6分别给出了物面Stanton数分布曲线和驻点线上各组分质量分数曲线与参考文献[16]计算结果的对比图。其中,斯坦顿(Stanton)数按照式(16)计算

$$St = q_w / (\rho_\infty V_\infty (h_\infty - h_w)) \quad (16)$$

式中, q_w 为物面热流量; ρ_∞, V_∞ 分别为飞行高度处的空气密

度和飞行速度; h_∞, h_w 分别为飞行高度和物面的焓值。由图5和图6可知,本文计算结果与参考文献计算结果吻合良好,从而验证了本文数值方法的有效性和正确性。

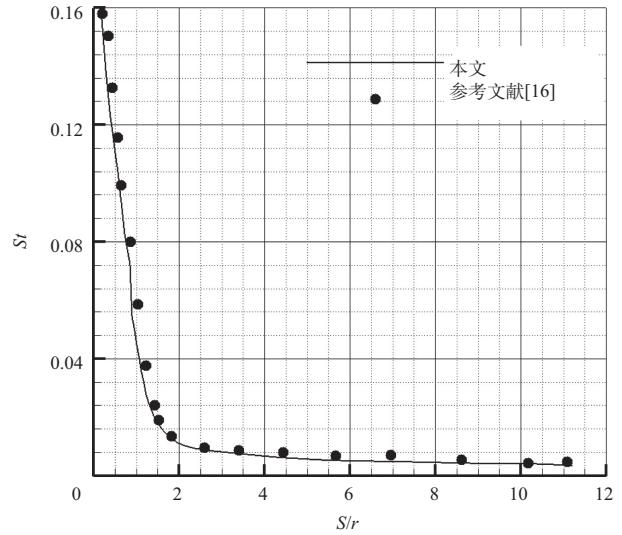


图5 RAMC II模型二维平均流场物面热流分布曲线与参考文献[16]对比

Fig.5 Averaged two dimensional surface heat flux of RAMC II model comparison with reference[16]

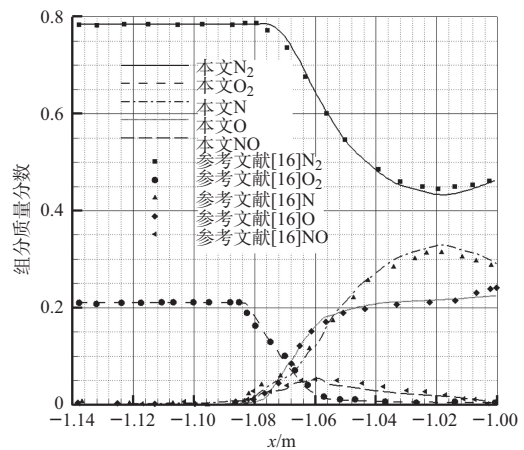


图6 RAMC II模型驻点线上各组分质量分数分布曲线与参考文献[16]对比

Fig.6 Mass fraction in stagnation line of RAMC II model comparison with reference[16]

4 结论

针对高超声速流场热化学非平衡效应引起的数值刚性问题,通过构造合适的预处理矩阵,发展了基于LU-SGS预处理的GMRES算法。将该算法应用于数值求解三维热化

学非平衡 Navier-Stokes 方程组, 获得了球头模型和 RAMC II 模型高超声速绕流场数值解, 并与相关文献的结果进行对比验证。通过研究, 得到如下结论:

(1) 热化学非平衡效应导致离散后的线性方程组具有很强的数值刚性, 需对该线性方程组进行合适的预处理, 以提高 GMRES 算法的求解稳定性和计算效率。

(2) 数值算例表明, 由一阶离散格式构造的对流项雅可比矩阵、黏性谱半径构造的黏性项雅可比矩阵和对角化源项雅可比矩阵组成预处理矩阵, 并结合 LU-SGS 方法进行预处理, GMRES 算法可有效处理高超声速热化学非平衡流场数值模拟存在的数值刚性问题。

(3) 将 Kim、Eberhardt、Ju 三种源项雅可比矩阵对角化方法推广到包含振动能源项的情形; 数值算例表明, 在较低 CFL 数条件下, 三种方法均具有较好的收敛性; 在大 CFL 数条件下, Kim 方法的稳定性优于其他两种。

AST

参考文献

- [1] Anderson J. Hypersonic and high-temperature gas dynamics [M]. New York: AIAA Inc., 2006.
- [2] 喻成璋, 刘卫华. 高超声速飞行器气动热预测技术研究进展 [J]. 航空科学技术, 2021, 32(2): 14-21.
Yu Chengzhang, Liu Weihua. Research status of aeroheating prediction technology for hypersonic aircraft[J]. Aeronautical Science & Technology, 2021, 32(2): 14-21. (in Chinese)
- [3] Blazek J. Computational fluid dynamics principles and applications[M]. 2nd edition. UK: Elsevier, 2007.
- [4] 张健, 邓有奇, 李彬, 等. 一种适用于三维混合网格的 GMRES 加速收敛新方法[J]. 航空学报, 2016, 37(11): 3226-3235.
Zhang Jian, Deng Youqi, Li Bin, et al. A new method to accelerate GMRES's convergence applying to three-dimensional hybrid grid[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2016, 37(11): 3226-3235. (in Chinese)
- [5] Ajmani K, Liou M S, Dyson R W. Preconditioned implicit solvers for the Navier-Stokes equations on distributed-memory machines[C]. 32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 1994.
- [6] Nielsen E J, Anderson W K, Walters R W, et al. Application of Newton-Krylov methodology to a three-dimensional unstructured Euler code[R]. AIAA Paper, 95-1733, 1995.
- [7] Luo H, Baum J D, Lohner R. A fast matrix-free implicit method for compressible flows on unstructured grids[J]. Journal of Computational Physics, 1998, 146: 664-690.
- [8] 陈龙, 夏健, 田书玲. 适用于非定常流模拟的分布式并行 GMRES 方法[J]. 空气动力学学报, 2019, 37(5): 834-843.
Chen Long, Xia Jian, Tian Shuling. A GMRES method on distributed parallel computers for unsteady flow simulation[J]. Acta Aerodynamic Sinica, 2019, 37(5): 834-843. (in Chinese)
- [9] Kim S L, Jeung I S, Park Y H, et al. Approximate Jacobian methods for efficient calculation of reactive flows[R]. AIAA-2000-3384, 2000.
- [10] 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.
- [11] Ju Yiguang. Lower-upper scheme for chemically reacting flow with finite rate chemistry[J]. AIAA Journal, 1995, 33(8): 1418-1425.
- [12] 王羽, 屈崑, 蔡晋生. 高超声速化学反应源项雅可比矩阵的对角化[J]. 航空学报, 2016, 37(5): 1419-1427.
Wang Yu, Qu Kun, Cai Jinsheng. Diagonalization on Jacobian matrix of source term for hypersonic chemical reactive flows [J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2016, 37(5): 1419-1427. (in Chinese)
- [13] Maier W T, Needels J T, Garbacz C, et al. SU²-NEMO: An open-source framework for high-mach nonequilibrium multi-species flows[J]. Aerospace, 2021, 8: 193.
- [14] 李海燕. 高超声速高温气体流场的数值模拟[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2007.
Li Haiyan. Numerical simulation of hypersonic and high temperature gas flowfields[D]. Mianyang: China Aerodynamics Research and Development Center, 2007. (in Chinese)
- [15] 高铁锁, 李椿萱, 董维中, 等. 高超声速电离绕流的数值模拟 [J]. 空气动力学学报, 2002, 20(2): 184-191.
Gao Tiesuo, Li Chunxuan, Dong Weizhong, et al. Numerical simulation of hypersonic ionized flow[J]. Acta Aerodynamic Sinica, 2002, 20(2): 184-191. (in Chinese)
- [16] Candler G V, McCormack R W. The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium[R]. AIAA-88-0511, 1988.

Study on GMRES Algorithm for Non-Equilibrium Thermal and Chemical Navier-Stokes Equations

Zhu Haitao, Wu Gengyu, Li Yan

Chinese Aeronautical Establishment, Beijing 100012, China

Abstract: Efficiently solving the non-equilibrium thermal and chemical Navier-Stokes equations is essential for hypersonic projects. To improve stability and convergence efficiency of GMRES algorithm applied to numerical solving three-dimensional non-equilibrium thermal and chemical Navier-Stokes equations which is subjected to strong numerical stiffness induced by vibrational energy and chemical source terms, a type of preconditioning matrix is constructed from lower order numerical schemes and diagonalized source term Jacobian matrix. Diagonalized methods which are originally used in chemical source are extended to both vibrational energy and chemical source terms and preconditioning matrix is deduced in detail. Through matrix approximate factorization, a LU-SGS based GMRES algorithm is developed with calculation processes. Numerical results show that, the hypersonic flow predicted by preconditioning method developed in this paper is coincide with reference datum. As to source term Jacobian diagonalization, even with large CFL number, the Kim method is convergence. So, Kim method is more stable and robust than Eberhardt and Ju methods.

Key Words: chemical source; vibrational energy source; numerical stiffness; Jacobian diagonalized; preconditioning GMRES; thermal-chemical non-equilibrium