

Экономичные конечно-разностные алгоритмы для расчета пространственных гиперзвуковых течений многокомпонентного газа с термохимической неравновесностью

Ю. Н. Григорьев¹, В. М. Ковеня^{1,2,*}

¹Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090, Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия

*Контактный автор: Ковеня Виктор Михайлович, e-mail: kovenya@ict.nsc.ru

Поступила 09 августа 2022 г., доработана 17 октября 2022 г., принята в печать 26 декабря 2022 г.

Статья посвящена построению экономичных конечно-разностных алгоритмов для пространственных задач гиперзвуковой аэродинамики. Дан краткий обзор современных моделей и алгоритмов, используемых в этой области, с точки зрения их вычислительной сложности для моделирования колебательной и химической кинетики. Применительно к двухтемпературной модели многокомпонентного диссоциирующего газа построены новые алгоритмы, основанные на методе приближенной факторизации или схеме предиктор-корректор с расщеплением операторов по физическим процессам и пространственным направлениям. Реализация алгоритмов на дробных шагах сводится к трехточечным скалярным прогонкам, что делает их экономичными по числу арифметических операций на узел сетки. Причем число операций имеет линейную зависимость от числа узлов расчетной области и числа уравнений. Используемая для построения алгоритмов идеология расщепления предполагает возможность распараллеливания вычислений при решении многомерных задач, так как решение исходной многомерной задачи сведено на каждом дробном шаге к независимому решению одномерных или более простых задач.

Keywords: гиперзвуковая аэродинамика, термохимическая неравновесность, метод приближенной факторизации, схема предиктор-корректор, расщепление по физическим процессам и пространственным направлениям.

Цитирование: Григорьев Ю.Н., Ковеня В.М. Экономичные конечно-разностные алгоритмы для расчета пространственных гиперзвуковых течений многокомпонентного газа с термохимической неравновесностью. Вычислительные технологии. 2023; 28(2):42–57. DOI:10.25743/ICT.2023.28.2.005.

Введение. Модели и алгоритмы гиперзвуковой вычислительной аэродинамики

Гиперзвуковая вычислительная аэродинамика, получившая начало в работах [1, 2], насчитывает четыре десятилетия, в течение которых были получены результаты, важные как для развития теории, так и для многих приложений. Существенная особенность задач в этом диапазоне скоростей заключается в необходимости детального учета реальных свойств газов. Гиперзвуковое обтекание летательных аппаратов характеризуется

экстремальными градиентами макропараметров, приводящих к критическим значениям температур и давлений, предельных для современных материалов. В высокотемпературных зонах потока происходят процессы колебательного возбуждения и диссоциации, идут химические реакции. При этом характерные времена молекулярно-кинетических процессов оказываются сопоставимыми с характерным временем пребывания газовых частиц у поверхности аппарата, что определяет существенную термохимическую неравновесность потока. Все эти факторы в значительной степени влияют на аэродинамику аппаратов — подъемную силу, сопротивление, распределение давлений и величину тепловых потоков — и должны быть включены в той или иной степени в физико-математические и численные модели гиперзвуковых течений.

В настоящее время известна достаточно полная иерархия моделей [3–5], описывающих различные гиперзвуковые течения — от полета ракет в воздухе с умеренными гиперзвуковыми числами Маха ($M \sim 10$) до входа космического корабля в углекислотную атмосферу Марса со скоростью порядка 6 км/с ($M \sim 30$). Как правило, предполагается режим обтекания в приближении сплошной среды. В этой связи газодинамическую основу всех моделей составляют уравнения Навье – Стокса для многокомпонентной смеси молекулярных химически реагирующих газов. Модели различаются составом исходных и получаемых в результате реакций и диссоциации-рекомбинации газовых компонентов. Дополнительный учет комплекса сопутствующих физико-химических процессов приводит к появлению источников членов в правых частях уравнения энергии и уравнений неразрывности отдельных компонент. Последние можно рассматривать как подсистему уравнений химической кинетики в движущейся среде.

Другое различие, создающее многообразие гиперзвуковых моделей, заключается в способе учета кинетики колебательного возбуждения [6]. Наиболее детальный подход состоит в поуровневом описании внутримолекулярного энергообмена, когда могут рассматриваться несколько тысяч энергетических уровней [5, 7]. Такие модели дают адекватную физическую картину процессов релаксации и переноса энергии, но из-за гигантского объема требуемых вычислений не могут реализовываться в практических задачах.

Более приемлемое с вычислительной точки зрения описание колебательной кинетики дают многотемпературные модели [2, 5–9]. В них существенное сокращение числа уравнений по сравнению с поуровневым подходом достигается за счет предположения, что заселенности колебательных уровней подчиняются некоторому вероятностному распределению, часто больцмановскому, которое для каждой колебательной моды каждой молекулярной компоненты характеризуется своей колебательной температурой. При этом в систему добавляются релаксационные уравнения для колебательной энергии каждой моды. Однако для газовых сред, состоящих из смеси много- и двухатомных молекул, например CO_2 , CO , N_2 , O_2 , что составляет атмосферу Марса, детальное многотемпературное приближение все еще создает чрезмерную вычислительную нагрузку для решения пространственных аэродинамических задач.

Вместе с тем уже определен круг задач, допускающих дальнейшее упрощение колебательной и химической кинетики и сокращение числа компонентов смеси. К ним можно отнести, например, расчеты аэродинамики гиперзвуковых изделий одноразового использования или расчеты полей аэротермодинамических параметров при гиперзвуковом обтекании аппаратов для локализации зон ламинарно-турбулентного перехода. В этих случаях бывает достаточно ограничиться двухтемпературной колебательной кинетикой [5, 9] даже для многоатомных молекул типа углекислого

газа. При этом предполагается, что поступательные и вращательные степени свободы молекул находятся в термодинамическом равновесии и определяют статическую температуру потока. Одновременно все колебательные моды всех молекулярных компонентов характеризуются единой колебательной температурой. Для колебательной энергии в модель включается одно релаксационное уравнение, в котором используется характерное время релаксации, взвешенное по концентрациям молекулярных компонентов. Такая модель, рассматриваемая в данной работе, несмотря на относительную простоту, содержит все вычислительные особенности и трудности, характерные в случае более сложных гиперзвуковых моделей, и удобна при разработке и адаптации новых численных методов для задач гиперзвуковой аэродинамики.

Нелинейность, многопараметричность, сильная связанность систем уравнений гиперзвуковых моделей, разномасштабность описываемых процессов в газовой среде приводят к необходимости разработки специальных численных алгоритмов, позволяющих получать численные решения задач с заданной точностью за приемлемое время работы современных вычислительных устройств. Использование для решений этих систем уравнений явных конечно-разностных (и конечно-объемных) алгоритмов типа Мак-Кормака или схем типа С. Годунова, основанных на задаче о распаде произвольного разрыва, или их модификациях [10–12], требует больших затрат вычислительных ресурсов из-за жестких ограничений на их устойчивость. Для повышения экономичности алгоритмов начиная с 80-х гг. XX в. стали использоваться неявные схемы приближенной факторизации и схемы типа предиктор-корректор [12–16], сводящие решение систем алгебраических уравнений к векторным прогонкам или итерационным алгоритмам [13–15]. В методе расщепления этот подход эквивалентен введению расщепления уравнений по пространственным направлениям (см., например, [16, 17]). Известно, что реализация систем алгебраических уравнений векторными прогонками требует Km^3 арифметических операций на каждый узел сетки, где m — число уравнений, K — размерность задачи по пространству. С ростом числа уравнений эффективность схем приближенной факторизации и схем расщепления по направлениям, реализуемых векторными прогонками, падает из-за степенного роста числа арифметических операций на узел сетки.

Для повышения экономичности алгоритмов в работах [18–21] исходная система уравнений расщеплялась на две подсистемы: содержащую уравнения Навье–Стокса с правыми частями и оставшуюся систему уравнений химической кинетики или уравнений типа Максвелла. Для решения каждой из подсистем применялись схемы расщепления по направлениям и приближенной факторизации с последующими итерациями по правой части [19–21]. Этот прием частично повышает эффективность алгоритмов, но сохраняется степенная зависимость при их неявной реализации для расщепленных подсистем уравнений.

В работе для численного решения системы уравнений математической модели многокомпонентного колебательного возбужденного диссоциирующего газа предлагаются неявная конечно-разностная схема приближенной факторизации и схема предиктор-корректор с расщеплением операторов по физическим процессам и пространственным направлениям. Они являются обобщением алгоритмов [17, 22] численного решения уравнений Навье–Стокса и реализуются на дробных шагах трехточечными скалярными прогонками, что делает их экономичными по числу арифметических операций на узел сетки.

1. Система многомерных уравнений колебательного возбужденного диссоциирующего (химически реагирующего) многокомпонентного газа

Приведем систему уравнений колебательного возбужденного диссоциирующего химически реагирующего многокомпонентного газа в безразмерном виде. В качестве характерных величин для обезразмеривания выбраны следующие величины и соотношения в невозмущенном потоке, отмеченные индексом ∞ :

$$x_j \rightarrow L, \quad \rho \rightarrow \rho_\infty, \quad T, T_v \rightarrow T_\infty, \quad u_j \rightarrow u_\infty, \quad t \rightarrow \frac{L}{u_\infty}, \quad \mu \rightarrow \mu_\infty, \quad p \rightarrow \rho_\infty u_\infty^2,$$

$$\lambda, \lambda_v \rightarrow \lambda_\infty, \quad \dot{w} \rightarrow w_\infty = \frac{\rho_\infty^2 k_d}{M_\infty}, \quad \gamma \rightarrow \gamma_\infty, \quad E, E_v, h \rightarrow \frac{R \rho_\infty T_\infty}{M_\infty}.$$

Система уравнений записывается в терминах плотности смеси ρ , массовых концентраций отдельных компонентов c_n , координат вектора скорости u_j , плотности внутренней энергии E_{Tr} и плотности колебательной энергии E_v . Основные уравнения, описывающие пространственные течения в декартовых координатах, имеют следующий вид:

– уравнение неразрывности для смеси в целом

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k) = 0, \quad k = 1, 2, 3; \quad (1)$$

– уравнения неразрывности для отдельных компонентов

$$\rho \left(\frac{\partial c_n}{\partial t} + u_k \frac{\partial c_n}{\partial x_k} \right) = \frac{1}{Sc Re_\infty} \frac{\partial}{\partial x_k} \mu \frac{\partial c_n}{\partial x_k} + Da_c w'_n, \quad k = 1, 2, 3; \quad n = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$\sum_{n=1}^N c_n = 1$, $c_n = -\rho_n/\rho$ – массовая концентрация компонента смеси;

– уравнения для импульсов

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho u_k u_i) + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{1}{Re_\infty} \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}, \quad i, k = 1, 2, 3; \quad (3)$$

– уравнение для внутренней энергии (поступательно-вращательных степеней свободы)

$$\frac{\partial E_{Tr}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(u_k E_{Tr}) + \gamma M_\infty^2 \left(p \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \frac{\tau_{ik}}{Re_\infty} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) =$$

$$= -\frac{1}{Re_\infty} \left(\frac{\alpha_\infty}{Pr} \frac{\partial q_{ik}}{\partial x_k} - \frac{\partial q_{dvk}}{\partial x_k} + \frac{\partial q_{dk}}{\partial x_k} \right) + Da_c J - Da_c Q_v - Da_v Q_{tr-v}, \quad i, k = 1, 2, 3, \quad (4)$$

где $q_{ik} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k}$ – компоненты обезразмеренного теплового потока;

– уравнение для колебательной энергии

$$\frac{\partial E_v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}(u_k E_v) = -\frac{1}{Re_\infty} \left(\frac{\alpha_\infty}{Pr} \frac{\partial q_{vk}}{\partial x_k} + \frac{\partial q_{dvk}}{\partial x_k} \right) + Da_c Q_v + Da_v Q_{tr-v}; \quad (5)$$

– уравнение состояния смеси

$$p = \frac{\rho T}{\gamma M_\infty^2} \sum_{n=1}^N \frac{c_n}{M_n}, \quad (6)$$

где M_n – молекулярный вес n -го компонента.

При записи уравнений введены критерии: число Рейнольдса $Re_\infty = \frac{L\rho_\infty u_\infty}{\mu_\infty}$, число Маха $M_\infty = \frac{u_\infty}{\sqrt{\gamma_\infty R/(M_\infty)T_\infty}}$, число Прандтля $Pr = \frac{\mu_\infty c_p}{\lambda_\infty} = 0.7$, число Дамкелера химическое $Da_c = \frac{L}{\tau_c u_\infty}$, число Дамкелера колебательное $Da_v = \frac{L}{\tau_v u_\infty}$, число Шмидта $Sc = \left(\frac{\rho D_{12}}{\mu}\right)^{-1} = 0.5$, $\alpha_\infty = \frac{C_{P_\infty}}{R/M_\infty}$.

Тензор напряжений равен

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij}^i \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \bar{\mu} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad \bar{\mu} = \mu_1 - \frac{2}{3}\mu, \quad \mu_1 = \alpha\mu, \quad \alpha = 1 \dots 2.$$

Вязкость смеси вычисляется по формуле Уилки

$$\mu = \sum_{(n)} \frac{X_n \mu_n}{\phi_{\mu,n}}, \quad \phi_{\mu,n} = \sum_{r=1}^N \frac{X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_n}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_n} \right)^{1/4} \right]^2}{\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_n}{M_r} \right)}}, \quad X_n = \frac{c_m}{M_n} \left(\sum_{r=1}^N \frac{c_r}{M_r} \right)^{-1}, \quad n = 1, \dots, N.$$

Динамическая вязкость компонента n вычисляется по формуле Блотнера

$$\mu_n(T) = 0.1 \exp [(A_n \ln T + B_n) \ln T + C_n], \quad n = 1, \dots, N.$$

Объемная плотность внутренней энергии равна

$$E_{Tr} = \rho T \sum_{n=1}^N c_n C_{Vn}, \quad C_{Vn} = \begin{cases} \frac{3}{2M_n} & \text{для атомов,} \\ \frac{5}{2M_n} & \text{для молекул.} \end{cases}$$

Объемная плотность колебательной энергии

$$E_v = \rho \sum_{(n)}^m c_n \frac{\theta_n/M_n}{\exp(\theta_n/T_v) - 1} = \rho \sum_{(n)}^m c_n e_{vn}(T_v),$$

где колебательная энергия молекул (мод) на единицу массы вычисляется в приближении гармонического осциллятора:

$$e_{vn}(T_v) = \frac{\theta_n/M_n}{\exp(\theta_n/T_v) - 1}$$

(суммирование только по молекулярным компонентам), θ_n — безразмерная характеристическая температура компоненты (моды), колебательная температура T_v предполагается единой для всех мод и компонентов, рассчитывается итеративно из выражения объемной плотности колебательной энергии.

Коэффициент теплопроводности смеси λ вычисляется по формуле Уилки

$$\lambda = \sum_{(n)} \frac{X_n \lambda_n}{\phi_{\lambda,n}}, \quad \phi_{\lambda,n} = \sum_{r=1}^N \frac{X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\lambda_n}{\lambda_r}} \left(\frac{M_r}{M_n} \right)^{1/4} \right]^2}{\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_n}{M_r} \right)}}, \quad n = 1, \dots, N.$$

Коэффициенты теплопроводности отдельных компонентов выражаются через коэффициент динамической вязкости с помощью приближенных соотношений Эйкена — молекулярная компонента $\lambda_n = \left(\frac{5}{2} \frac{3}{2M_n} + \frac{6}{5} \frac{1}{M_n} \right) \mu_n$, атомарная компонента $\lambda_n = \frac{5}{2} \frac{3}{2M_n} \mu_n$.

Компоненты обезразмеренного диффузионного теплового потока равны

$$q_{dk} = -\frac{1}{Sc} \sum_{n=1}^N C_{Pn} \mu \frac{\partial c_n}{\partial x_k}, \quad C_{Pn} = C_{Vn} + \frac{1}{M_n}.$$

Компоненты обезразмеренного диффузионного потока колебательных квантов равны

$$q_{dvk} = -\frac{1}{Sc} \sum_{(n)}^m \mu \frac{\theta_n/M_n}{\exp(\theta_n/T_v) - 1} \frac{\partial c_n}{\partial x_k},$$

где суммирование только по молекулярным компонентам.

Обезразмеренное тепловыделение химических реакций задается по формуле $J = \sum_{n=1}^N \dot{\omega}_n h_n^0$, где h_n^0 — безразмерная энтальпия образования n -го компонента. Прирост колебательной энергии за счет химических реакций (рекомбинации) $Q_v = \sum_{(n)}^m e_{vn} \dot{\omega}_n$, (суммирование только по молекулярным компонентам).

Обезразмеренный релаксационный член равен

$$Q_{tr-v} = \rho \sum_{n=1}^N c_n \frac{e_{vn}(T) - e_{vn}(T_v)}{\tau_n}.$$

Компоненты обезразмеренного теплового потока колебательных квантов

$$q_{vi} = -\sum_{(n)}^m c_n \lambda_{vn} \frac{\partial T_v}{\partial x_i}.$$

Коэффициент переноса колебательных квантов

$$\lambda_{vn} = \frac{6}{5} \mu_n c_{Vvn} = \frac{6}{5} \mu_n \frac{\partial e_{vn}}{\partial T_v} = \frac{6}{5} \mu_n \frac{1}{(\exp(\theta_n/T_v) - 1)^2} \exp(\theta_n/T_v) (\theta_n/T_v)^2.$$

Интенсивность производства компоненты (на примере реакций диссоциации-рекомбинации) задается в виде

$$\dot{\omega}_n = -\sum_{s=1}^N K_{f,ns}(T) \frac{\rho_n}{M_n} \frac{\rho_s}{M_s} + \sum_{s=1}^N K_{b,ns}(T) \left(2 \frac{\rho_{nd}}{M_n} \right)^2 \frac{\rho_s}{M_s},$$

где $K_{f,ns}$ — константа диссоциации компоненты при столкновении с s -компонентой, $K_{b,ns}$ — константа рекомбинации компоненты из продуктов диссоциации компоненты с s -компонентой в качестве третьего тела.

2. Численные алгоритмы

Для удобства построения численных алгоритмов разрешим исходные уравнения (1)–(6) относительно искомых функций ρ , c_n , u_j , E_n , E_v и представим их в векторной форме

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = -\mathbf{W}, \quad \mathbf{f} = (\rho, c_n, u_j, E_{Tr}, E_v)^T, \quad \mathbf{W} = (w_\rho, w_{c_n}, w_{u_j}, w_{E_{Tr}}, w_{E_v})^T, \quad (7)$$

где $u_j \in \mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$, $c_n \in \mathbf{c} = (c_1, \dots, c_N)^T$, $w_{u_j} \in \mathbf{w}_u = (w_{u1}, w_{u2}, w_{u3})^T$, $w_{c_n} \in \mathbf{w}_c = (w_{c1}, \dots, w_{cN})^T$ — векторы, $j = 1, \dots, K$, $n = 1, \dots, N$, N — количество компонентов смеси газа, $K = 1, 2, 3$ — количество пространственных координат;

$$\begin{aligned} w_\rho &= \partial_k(\rho u_k), \quad w_{c_n} = u_k \partial_k c_n - \frac{1}{\rho} (\partial_k \mu_c \partial_k c_n + Da_c w'_n), \quad n = 1, \dots, N, \\ w_{u_j} &= u_k \partial_k u_j + \frac{1}{\rho} (\delta_j^k \partial_k p + \partial_k \tau_{jk}), \quad j = 1, \dots, K, \\ w_{E_{Tr}} &= \partial_k u_k E_{Tr} + p_0 (p \partial_k u_k + \tau_{ki} \partial_i u_k) + \partial_k \lambda_T \partial_k T - \partial_k q_{dvk} + \partial_k q_{dk} + J_0 - R, \\ w_{E_v} &= \partial_k (u_k E_v) + \partial_k \lambda_v \partial_k T_v + \partial_k q_{dvk} + R, \\ p &= \frac{\rho T}{\gamma M_\infty^2} \sum_{n=1}^N \frac{c_n}{M_n}, \quad q_{dvk} = -\frac{1}{Sc} \sum_n^m \mu \frac{\theta_n / M_n}{\exp(\theta_n / T_v) - 1} \partial_k c_n, \quad q_{dk} = -\frac{1}{Sc} \sum_{n=1}^N C_{Pn} \mu \partial_k c_n. \end{aligned} \quad (8)$$

При записи уравнений (7), (8) введены обозначения: $\partial_k = \partial / \partial k$, $R = Da_c Q_v + Da_v Q_{tr-v}$, $J_0 = Da_c J$, $p_0 = \frac{1}{\gamma M_\infty^2}$, $\mu_c = \frac{1}{Sc}$, $\lambda_T = \frac{\lambda \alpha_\infty}{Pr}$, $\lambda_{T_v} = \frac{\alpha_\infty}{Pr} \sum_{(n)}^m c_n \lambda_{vn}$. Число Re_∞ внесено в коэффициенты вязкости, теплопроводности и т. д. Уравнения (7), (8) дополнены замыкающими соотношениями и зависимостями коэффициентов уравнений от газодинамических функций, приведенными выше. Так как $E_{Tr} = E_{Tr}(\rho, T, c_n)$, $p = p(\rho, T, c_n) = p(\rho, c_n, E_{Tr})$, $E_v = E_v(\rho, T_v, c_n)$, $R = R(\rho, c_n, T, T_v)$, $J_0 = J_0(\rho, c_n, T)$, $w'_n = w'_n(\rho, c_n, E_{Tr})$, справедливы следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \partial_k p &= a_\rho \partial_k \rho + a_{c_n} \partial_k c_n + a_E \partial_k E_{Tr}, \quad \partial_k T = b_\rho \partial_k \rho + b_{c_n} \partial_k c_n + b_{E_{Tr}} \partial_k E_{Tr}, \\ Da_c \partial_k w'_n(c_n, E_{Tr}, \rho) &= B_{w_{c_n}} \partial_k c_n + B_{w_{Tr}} \partial_k E_{Tr} + B_{w_\rho} \partial_k \rho, \\ \partial_k J_0(\rho, c_n, E_{Tr}) &= B_{J_\rho} \partial_k \rho + B_{J_{c_n}} \partial_k c_n + B_{J_{Tr}} \partial_k E_{Tr}, \\ \partial_k R(\rho, c_n, E_{Tr}, E_v) &= B_{R_\rho} \partial_k \rho + B_{R_{c_n}} \partial_k c_n + B_{R_{Tr}} \partial_k E_{Tr} + B_{R_v} \partial_k E_v, \\ a_0 &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial \rho}, \quad a_{c_n} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial c_n}, \quad a_{Tr} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial E_{Tr}}, \quad b_\rho = \frac{\partial T}{\partial \rho}, \quad b_{c_n} = \frac{\partial T}{\partial c_n}, \quad b_{Tr} = \frac{\partial T}{\partial E_{Tr}}, \\ B_{w_\rho} &= Da_c \frac{\partial w'_n}{\partial \rho}, \quad B_{w_{c_n}} = Da_c \frac{\partial w'_n}{\partial c_n}, \quad B_{w_{Tr}} = Da_c \frac{\partial w'_n}{\partial E_{Tr}}, \quad B_{R_\rho} = \frac{\partial R}{\partial \rho}, \quad B_{R_{c_n}} = \frac{\partial R}{\partial c_n}, \\ B_{R_{Tr}} &= \frac{\partial R}{\partial E_{Tr}}, \quad B_{R_v} = \frac{\partial R}{\partial E_v}, \quad B_{J_\rho} = \frac{\partial J_0}{\partial \rho}, \quad B_{J_{c_n}} = \frac{\partial J_0}{\partial c_n}, \quad B_{J_{Tr}} = \frac{\partial J_0}{\partial E_{Tr}}. \end{aligned} \quad (9)$$

С учетом введенных соотношений (8), (9) представим систему уравнений (7) в форме расщепления по пространственным направлениям

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} = -\mathbf{W} = -\sum_{k=1}^K B_k \mathbf{f} - \mathbf{F}, \quad (10)$$

$$\mathbf{f} = \begin{pmatrix} \rho \\ c_l \\ u_j \\ E_{Tr} \\ E_v \end{pmatrix}, \quad B_k = \begin{pmatrix} \partial_k u_k & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_{kw\rho} & u_k \partial_k - b_{cnk} & 0 & b_{kwn} & 0 \\ \delta_j^k a_0 \partial_k & \delta_j^k a_{cn} \partial_k & u_k \partial_k - b_{jk} & \delta_j^k a_E \partial_k & 0 \\ b_{k\rho} & b_{kcn} & pp_0 \delta_1^k \partial_k & \partial_k u_k - b_{Trk} & b_{kRv} \\ -b_{kR\rho} & -a_{kRcn} & 0 & -b_{kRTr} & \partial_k u_k - b_{vk} \end{pmatrix},$$

$$b_{jk} = \frac{1}{\rho} \partial_k \left(\mu + \delta_j^k \left(\frac{\mu}{3} + \mu_1 \right) \right) \partial_k, \quad b_{Trk} = \partial_k \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial E_{Tr}} \right) \partial_k - b_{kTr},$$

$$b_{cnk} = \partial_k \mu_c \partial_k + b_{kwn}, \quad b_{vk} = \partial_k \left(\lambda_{Tv} \frac{\partial T_v}{\partial E_v} \right) \partial_k + b_{kRv}.$$

Операторы B_k содержат все газодинамические члены уравнений, члены с повторными производными из (8) и коэффициенты при алгебраических членах w'_n , R , J_0 в (9) после их линеаризации. Вектор $\mathbf{F} = \mathbf{W} - \sum_{k=1}^K B_k \mathbf{f}$ содержит оставшиеся члены. Коэффициенты при свободных членах w'_n , R , J_0 равны

$$\begin{aligned} b_{kw\rho} &= B_{w\rho}, & b_{kwTr} &= B_{wTr}, & b_{kwn} &= B_{wn}, & b_{kR\rho} &= B_{R\rho}, & b_{kRcn} &= B_{Rcn}, \\ b_{kRTr} &= B_{RTr}, & b_{kv} &= B_{Rv}, & b_{kcn} &= B_{Jcn}, & b_{kJ\rho} &= B_{J\rho}, & b_{kJTr} &= B_{JTr}, \\ b_{k\rho} &= b_{kR\rho} - b_{kJ\rho}, & b_{kcn} &= b_{kRcn} - b_{kJcn}, & b_{kTr} &= b_{kRTr} - b_{kJTr} \end{aligned}$$

и сохранены в операторе B_1 , а в операторах B_2 , B_3 они равны нулю. Сохранение алгебраических членов в операторе B_1 с последующей их неявной аппроксимацией обычно приводит к повышению устойчивости разностных схем [16]. Отметим, что размерность вектора \mathbf{f} для трехмерного случая равна $m = 6 + N$ (так как $K = 3$, $l = N$), а размерность матричных операторов B_k — соответственно $m \times m$.

Для численного решения системы уравнений (10) рассмотрим неявную конечно-разностную схему приближенной факторизации и схему предиктор-корректор с расщеплением операторов по физическим процессам и пространственным направлениям. Они являются обобщением алгоритмов [16, 17] численного решения уравнений Навье – Стокса и реализуются на дробных шагах трехточечными скалярными прогонами, что делает их экономичными по числу арифметических операций на узел сетки, причем число скалярных прогонов равно лишь $K(m + 1)$. Остановимся на их построении.

Аппроксимируем в операторе \mathbf{W} из (10) первые и вторые производные со вторым порядком по формулам

$$\begin{aligned} \Lambda_k &= \frac{\Lambda_{k+} + \Lambda_{k-}}{2}, & \Lambda_k b_k \Lambda_k &= \Lambda_{k+} b_k \Lambda_{k-}, & \Lambda_{k\pm} f_k &= \pm \frac{f_{k\pm 1} - f_k}{h_k}, \\ \Lambda_j b \Lambda_i f_{ij} &= \frac{b_{ij+1}(f_{i+1,j+1} - f_{i-1,j+1}) - b_{ij-1}(f_{i+1,j-1} - f_{i-1,j-1})}{4h_i h_j}, & (11) \\ \Lambda_k^2 &= \frac{1}{2} (\Lambda_{k+} + \Lambda_{k-} - a\varepsilon \Lambda_{k+} \Lambda_{k-}), & \bar{\Lambda}_k^2 &= \frac{1}{2} (\Lambda_{k+} + \Lambda_{k-} + a\varepsilon \Lambda_{k+} \Lambda_{k-}), \\ \varepsilon &= \text{sign}(u_k) \begin{cases} \frac{|\Lambda_{k+} \Lambda_{k-pk}|}{|\Lambda_{k+pk}| + |\Lambda_{k-pk}|}, & \text{если } |\Lambda_{k+pk}| + |\Lambda_{k-pk}| \neq 0, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \end{aligned}$$

где h_k — шаги сетки по направлению x_k . В силу немонотонности симметричных аппроксимаций первых производных со вторым порядком их применение может приводить к осцилляциям решения. Введенное сглаживание вида (11) помогает их минимизировать без понижения порядка аппроксимации (см., например, [22]). При $a = 0$ имеем аппроксимацию второго порядка без сглаживания, при $a = 1$ — со сглаживанием. С учетом введенных аппроксимаций (11) получим $\mathbf{W}_h = \mathbf{W} + O(h^2)$, где $\mathbf{W}_h = (w_{h\rho}, w_{hcn}, w_{hu_j}, w_{hETr}, w_{hEv})$,

$$\begin{aligned} w_{h\rho} &= \Lambda_k^2(\rho u_k), \\ w_{hcn} &= u_k \Lambda_k^2 c_n - \frac{1}{\rho}(\Lambda_k \mu \Lambda_k c_n - w_{an}), \quad n = 1, \dots, N, \\ w_{hu_j} &= u_k \Lambda_k^2 u_j + \frac{1}{\rho}(\delta_j^k \overline{\Lambda_k^2 p} + \Lambda_k \tau_{jk}), \quad j = 1, \dots, K, \\ w_{hETr} &= \Lambda_k^2(u_k E_{Tr}) + p_0(p \Lambda_k^2 u_k + \tau_{ki} \Lambda_i u_k) + \Lambda_k \lambda_T \Lambda_k T - \Lambda_k q_{dvk} + \Lambda_k q_{dk} + J_0 - R, \\ w_{hEv} &= \Lambda_k^2(u_k E_v) + \Lambda_k \lambda_v \Lambda_k T_v + \Lambda_k q_{dvk} + R, \\ p &= \frac{\rho T}{\gamma M_\infty^2} \sum_{n=1}^N \frac{c_n}{M_n}, \\ \tau_{ij} &= -\delta_j^i \mu (\Lambda_i u_j + \Lambda_j u_i) - \bar{\mu} \Lambda_k u_k, \quad j, i, k = 1, 2, 3. \end{aligned}$$

Аппроксимируем конвективные члены уравнений $u_k \partial_k$ и члены с давлением $\partial_k p$ в операторах B_k из (10) подобно [16, 17] несимметричными операторами с первым порядком

$$u_k \Lambda = \begin{cases} \Lambda_{k-} \\ \Lambda_{k+} \end{cases}, \quad \bar{\Lambda}_k p = \begin{cases} \Lambda_{k+} \\ \Lambda_{k-} \end{cases}, \quad \text{если } \begin{cases} u_k \geq 0 \\ u_k < 0 \end{cases}, \quad \Lambda_{k\pm} f_k = \pm \frac{f_{k\pm 1} - f_k}{h_k},$$

а соответственно члены, содержащие вторые производные, — по формулам (11). Тогда

$$B_{kh} = \begin{pmatrix} \Lambda_k u_k & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_{kw\rho} & u_k \Lambda_k - b_{cnk} & 0 & b_{kwn} & 0 \\ \delta_j^k a_0 \bar{\Lambda}_k & \delta_j^k a_{cn} \bar{\Lambda}_k & u_k \Lambda_k - b_{jk} & \delta_j^k a_E \bar{\Lambda}_k & 0 \\ b_{k\rho} & b_{kcn} & p p_0 \delta_j^k \Lambda_k & \Lambda_k u_k - b_{Trk} & b_{kRv} \\ -b_{kR\rho} & -b_{kRcn} & 0 & -b_{kRTr} & \Lambda_k u_k - b_{vk} \end{pmatrix} = B_k + O(h).$$

Для решения системы уравнений (10) рассмотрим разностную схему с весами

$$\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} = - \sum_{k=1}^K B_{kh}^n (\alpha \mathbf{f}^{n+1} + \beta \mathbf{f}^n) - \mathbf{F}^n = -\mathbf{W}^n$$

или эквивалентную ей схему в каноническом виде

$$\left(I + \tau \alpha \sum_{k=1}^K B_{kh}^n \right) \frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} = -\mathbf{W}_h^n. \quad (12)$$

Она аппроксимирует исходные уравнения с порядком $\psi = O(\tau + \tau h + h^2)$ и линейна, так как коэффициенты операторов B_{kh}^n заданы на n -м слое, однако ее реализация сводится к матричной прогонке. Приближенно факторизуем оператор

$$I + \tau \alpha \sum_{k=1}^K B_{kh}^n \approx \prod_{k=1}^K (I + \tau \alpha B_{kh}^n).$$

Тогда разностная схема

$$\prod_{k=1}^K (I + \tau\alpha B_{kh}) \frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} = -\mathbf{W}_h^n$$

или эквивалентная ей схема в дробных шагах

$$\begin{aligned} \xi^n &= -\mathbf{W}_h^n, \\ (I + \tau\alpha \mathbf{B}_1^n) \xi^{n+1/K} &= \xi^n, \dots, (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{21}^n) \xi^{n+1} = \xi^{n+(K-1)/K}, \\ \mathbf{f}^{n+1} &= \mathbf{f}^n + \tau \xi^{n+1} \end{aligned}$$

аппроксимирует исходные уравнения (10) с порядком $\psi = O(\tau + h^2)$, но является линейной. На дробных шагах она реализуется векторными прогонками, что делает ее также неэкономичной. Такой подход, основанный на расщеплении уравнений по пространственным направлениям, использовался многими авторами [11–15, 18–21].

Для построения экономических алгоритмов подобно [16, 17] введем расщепление операторов B_{kh} по физическим процессам, полагая $B_{kh} = B_{k1} + B_{k2}$, где

$$\begin{aligned} B_{k1} &= \begin{pmatrix} \Lambda_k u_k & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_{kw\rho} & u_k \Lambda_k - b_{cnk} & 0 & 0 & 0 \\ \delta_j^k a_0 \bar{\Lambda}_k & \delta_j^k a_{cn} \bar{\Lambda}_k & u_k \Lambda_k - b_{jk} & 0 & 0 \\ b_{k\rho} & 0 & 0 & \Lambda_k u_k - b_{Trk} & 0 \\ -b_{kR\rho} & -b_{kRcn} & 0 & 0 & \Lambda_k u_k - b_{vk} \end{pmatrix}, \\ B_{k2} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{kwn} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta_j^k a_E \bar{\Lambda}_k & 0 \\ 0 & b_{kcn} & pp_0 \delta_j^k \Lambda_k & 0 & b_{kRv} \\ 0 & 0 & 0 & -b_{kRT} & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} n = 1, \dots, N, \\ j = 1, \dots, K. \end{matrix} \end{aligned}$$

Так как $\prod_{k=1}^K (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{k1}^n)(I + \tau\alpha \mathbf{B}_{k2}^n) = I + \tau\alpha \sum_{k=1}^K B_{kh} + O(\tau^2)$, разностная схема приближенной факторизации

$$\prod_{j=1}^K (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{k1}^n)(I + \tau\alpha \mathbf{B}_{k2}^n) \frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} = -\mathbf{W}_h^n \quad (13)$$

или эквивалентная ей схема в дробных шагах

$$\begin{aligned} \xi^n &= -\mathbf{W}_h^n, \\ (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{11}^n) \xi^{n+1/2K} &= \xi^n, \quad (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{21}^n) \xi^{n+1/K} = \xi^{n+1/2K}, \\ &\dots \\ (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{12}^n) \xi^{n+(2K-1)/2K} &= \xi^{n+(K-1)/K}, \quad (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{22}^n) \xi^{n+1} = \xi^{n+(2K-1)/2K}, \\ \mathbf{f}^{n+1} &= \mathbf{f}^n + \tau \xi^{n+1} \end{aligned} \quad (14)$$

также аппроксимирует уравнения (11) с порядком $\psi = O(\tau + h^2)$ для всех α . Остановимся на ее реализации. На нулевом шаге система разностных уравнений $\xi^n = -\mathbf{W}$ разрешается явно для каждой компоненты вектора $\xi^n = (\xi_\rho^n, \xi_{cn}^n, \xi_j^n, \xi_{ETr}^n, \xi_{Ev}^n)^T$ для всех внутренних узлов. На границах области задаются краевые условия.

На нечетных ($k = 1, 3, 5$) дробных шагах система уравнений

$$\begin{aligned} [1 + \tau\alpha\Lambda_k u_k] \xi_\rho^{n+k/2K} &= \xi_\rho^{n+(k-1)/2K}, \\ [I + \tau\alpha(u_k\Lambda_k - b_{cnk})] \xi_{cn}^{n+k/2K} &= \xi_{cn}^{n+(k-1)/2K} + \tau\alpha b_{kwp} \xi_\rho^{n+k/2K}, \quad n = 1, \dots, N, \\ [I + \tau\alpha(\Lambda_k u_k - b_{jk})] \xi_j^{n+k/2K} &= \xi_j^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha \left(a_0 \bar{\Lambda}_k \xi_\rho^{n+k/2K} + a_{cn} \sum_{n=1}^N \xi_{cn}^{n+k/2K} \right), \quad j = 1, \dots, K, \\ (I + \tau\alpha(\Lambda_k u_k - b_{Trk})) \xi_{ETr}^{n+k/2K} &= \xi_{ETr}^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha b_{k\rho} \xi_\rho^{n+k/2K}, \\ [I + \tau\alpha(\Lambda_k u_k - b_{vk})] \xi_{Ev}^{n+k/2K} &= \xi_{Ev}^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha \left(b_{k\rho} \xi_\rho^{n+k/2K} + b_{kRcn} \sum_{n=1}^N \xi_{cn}^{n+k/2K} \right) \end{aligned}$$

решается скалярными прогонками для каждого уравнения.

На четных ($k = 2, 4, 6$) дробных шагах решается система уравнений

$$\begin{aligned} \xi_\rho^{n+k/2K} &= \xi_\rho^{n+(k-1)/2K}, \quad \xi_{cn}^{n+k/2K} = \xi_{cn}^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha b_{kwn} \xi_{ETr}^{n+k/2K}, \quad n = 1, \dots, N, \\ \xi_j^{n+k/2K} &= \xi_j^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha \delta_j^k a_E \bar{\Lambda}_k \xi_{ETr}^{n+k/2K}, \quad j = 1, \dots, K, \\ \xi_{ETr}^{n+k/2K} &= \xi_{ETr}^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha \left(\delta_j^k p_0 p \Lambda_k \xi_j^{n+k/2K} + b_{kRv} \xi_{Ev}^{n+k/2K} + b_{kcn} \sum_{n=1}^N \xi_{cn}^{n+k/2K} \right), \\ \xi_{Ev}^{n+k/2K} &= \xi_{Ev}^{n+(k-1)/2K} + \tau\alpha b_{kRTr} \xi_{ETr}^{n+k/2K}. \end{aligned}$$

После исключения из уравнения энергии других компонент невязок получим для невязки давления уравнение в следующем виде:

$$\begin{aligned} \left\{ I - (\tau\alpha)^2 \left[p_0 p \Lambda_k a_E \bar{\Lambda}_k + b_{kRTr} b_{kRv} + b_{kcn} \sum_{n=1}^N b_{kwn} \right] \right\} \xi_{ETr}^{n+k/2K} &= \\ = \xi_{ETr}^{n+(k-1)/2K} - \tau\alpha \left\{ p p_0 \delta_j^k \Lambda_k \xi_j^{n+(k-1)/2K} + b_{kRv} \xi_{Ev}^{n+(k-1)/2K} + b_{kRc} \sum_{n=1}^N \xi_{cn}^{n+(k-1)/2K} \right\}. \end{aligned}$$

Его решение находится трехточечной скалярной прогонкой, после чего явно вычисляются новые значения остальных компонент. Значения функций на шаге \mathbf{f}^{n+1} вычисляются явно из последнего уравнения схемы (14). На этом процесс вычисления функций на одном временном шаге заканчивается.

Для получения схемы второго порядка аппроксимации по всем переменным рассмотрим схему предиктор-корректор:

$$\begin{aligned} (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{11}^n) \mathbf{f}^{n+1/4K} &= \mathbf{f}^n, \quad (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{21}^n) \mathbf{f}^{n+1/2K} = \mathbf{f}^{n+1/4K}, \\ &\dots \\ (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{12}^n) \mathbf{f}^{n+(2k-1)/4K} &= \mathbf{f}^{n+2/8}, \quad (I + \tau\alpha \mathbf{B}_{22}^n) \mathbf{f}^{n+1/2} = \mathbf{f}^{n+(2k-1)/4K}, \\ \mathbf{f}^{n+1} &= \mathbf{f}^n - \tau \mathbf{W}_h^{n+1/2}. \end{aligned} \tag{15}$$

При $\alpha = 1/2 + O(\tau)$ она аппроксимирует уравнения (9) с порядком $\psi = O(\tau^2 + h^2)$ и реализуется подобно (13), (14) на дробных шагах скалярными прогонками, а на этапе корректора — явно.

Таким образом, предложенные разностные схемы (13), (15) являются экономичными по числу арифметических операций на узел сетки, поскольку реализуются скалярными прогонами, число прогонов равно $(m + 1)N$.

Остановимся на анализе устойчивости алгоритма (13). Проведем его для уравнений с замороженными коэффициентами спектральным методом (отметим, что для линеаризованных уравнений схемы (13), (15) эквивалентны). Для определенности выберем симметричную аппроксимацию первых производных в операторах \mathbf{B}_{kj}^n и \mathbf{W}_h . Будем искать решение схем в виде $\mathbf{f}_{l_1 l_2 l_3}^n = \mathbf{f}_0 \lambda^n e^{iq}$, $q = \sum_{j=1}^3 k_j h_j$, $\lambda = e^{\omega \tau}$. Тогда схеме (13) для линеаризованных уравнений соответствует характеристическое уравнение

$$\det \left\| \prod_{j=1}^K (I + \alpha \mathbf{B}_{j1}^0) (I + \alpha \mathbf{B}_{j2}^0) (\lambda - 1) + \sum_{j=1}^K (\mathbf{B}_{j1}^0 + \mathbf{B}_{j2}^0) \right\| = 0, \quad (16)$$

где операторы \mathbf{B}_{ij}^0 имеют структуру операторов \mathbf{B}_{ij} . Найти решение системы алгебраических многопараметрических уравнений (16) в общем виде затруднительно, поэтому ограничимся рассмотрением некоторых предельных случаев. Для одномерного случая характеристическое уравнение примет вид

$$\det \left\| (I + \alpha \mathbf{B}_{11}^0) (I + \alpha \mathbf{B}_{12}^0) (\lambda - 1) + \mathbf{B}_{11}^0 + \mathbf{B}_{12}^0 \right\| = 0, \quad (17)$$

$$\mathbf{B}_{11}^0 = \begin{pmatrix} t_0^\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tau b_{1w\rho} & t_0^c & 0 & 0 & 0 \\ da_0 & da_c & t_0^u & 0 & 0 \\ \tau b_{1\rho} & 0 & 0 & t_0^{ETr} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t_0^{Ev} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_{12}^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau b_{1wTr} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & da_E & 0 \\ 0 & -\tau b_{Jcn} & dpp_0 & 0 & b_{kRv} \\ 0 & 0 & 0 & -b_{kRTr} & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$d = i \frac{\tau}{h_1} \sin(k_j h_j), \quad d_0 = \frac{4\tau}{h_1^2} \sin^2 \frac{k_j h_j}{2}, \quad t_0 = ud, t_0^\rho = t_0,$$

$$t_0^{cn} = t_0 + \tau(b_{cn} + d_0 b_{1wcn}), \quad t_0^u = t_0 + \tau b_{21}, \quad t_0^{ETr} = t_0 + \tau(d_0 b_{31} + b_{1i}),$$

$$t_0^{Ev} = t_0 + (d_0 b_{41} + \tau b_{1Rv}), \quad t^q = 1 + \alpha t_0^q, \quad q = \rho, c1, \dots, cn, u, ETr, Ev.$$

Его корни могут быть определены из решения алгебраического уравнения m -го порядка относительно α . Если полагать преобладающими конвективные и вязкие члены в характеристическом уравнении (17), т.е. положить $\mathbf{B}_{12}^0 = 0$, то оно примет вид

$$\prod_q [t^q (\lambda - 1) + t_0^q] = 0, \quad q = \rho, c1, \dots, cn, u, ETr, Ev,$$

Q — сумма всех членов q . Его корни равны $\lambda_1 = \frac{t^q - t_0^q}{t^q}$, $q = \rho, c1, \dots, cn, u, ETr, Ev$, и, очевидно, $|\lambda_q| \leq 1$ при $\alpha \geq 1/2 + O(\tau)$, т.е. разностная схема (17) безусловно устойчива. Если положить, что $\mathbf{B}_{11}^0 = 0$, то характеристическое уравнение примет вид

$$(\lambda - 1)^{2+N} [(\lambda - 1)^2 + s^2(\alpha\lambda + 1 - \alpha)^2] = 0.$$

Здесь $s^2 = |d|^2 s_a^2 + s_b^2$, $s_a^2 = ppa_E$, $s_b^2 = \tau^2 \left(b_{1RTr} b_{kRv} + \sum_{cn=1}^N b_{1RTr} b_{Jcn} \right)$, s_a^2 — квадрат скорости звука идеального газа. Его корни равны

$$\lambda_j = 1, \quad j = 1, \dots, N + 2, \quad \lambda_{1,2} = \frac{1 \pm is(\alpha - 1)}{1 \pm i\alpha s},$$

а $|\lambda_l| \leq 1$ при $\alpha \geq 1/2 + O(\tau)$. Можно полагать устойчивость схемы для одномерных уравнений и в общем случае. Для двумерного случая безусловная устойчивость схемы (13) сохраняется (по крайней мере, для предельных случаев). Заметим, что в трехмерном случае схемы вида (13), (15), как и все схемы приближенной факторизации, теряют свойство безусловной устойчивости [16]. Как и следовало ожидать, неявная аппроксимация концентраций компонентов c_n смеси приводит к повышению устойчивости схем (13), (15).

Предложенные алгоритмы (13), (15) легко распараллеливаются при решении задач на многопроцессорных системах ЭВМ. Сама идеология расщепления предполагает возможность распараллеливания вычислений при решении многомерных задач, так как решение исходной многомерной задачи сведено к решению на каждом дробном шаге одномерных задач. Пусть, для определенности, расчетная область для пространственной задачи содержит $I = I_1 I_2 I_3$ узлов. Тогда на первом дробном шаге одновременно могут использоваться $I_2 I_3$ процессоров, затем процесс параллельных вычислений повторяется и на других дробных шагах. Можно повысить эффективность вычислений на каждом нечетном дробном шаге путем дополнительного распараллеливания вычислений еще на m процессорах, где m — число решаемых уравнений. Как показывает практика решения стационарных и нестационарных задач в приближении уравнений Навье – Стокса, при нахождении стационарных решений методом установления целесообразно использовать схему приближенной факторизации, а для решения нестационарных задач — схему предиктор-корректор, имеющую второй порядок по всем переменным. Можно ожидать, что этот подход окажется справедливым и при решении стационарных и нестационарных задач в рамках предложенных моделей для расчета гиперзвуковых течений.

Заключение

В работе дан краткий обзор современных моделей и алгоритмов, используемых в гиперзвуковой аэродинамике с точки зрения их вычислительной сложности для моделирования колебательной и химической кинетики. Для двухтемпературной модели многокомпонентного диссоциирующего газа предложены новые алгоритмы, основанные на методах приближенной факторизации или предиктор-корректор с расщеплением операторов по физическим процессам и пространственным направлениям. Применение расщепления позволило построить алгоритмы, реализуемые на дробных шагах трехточечными скалярными прогонками, что делает их экономичными по числу арифметических операций на узел сетки, где число операций линейно зависит от числа узлов сетки и числа уравнений. Исследована устойчивость предложенных алгоритмов и показана их безусловная устойчивость для линеаризованных одно- и двумерных по пространству уравнений. Используемая идеология расщепления допускает возможность распараллеливания вычислений при решении многомерных задач, так как в предложенных алгоритмах решение исходной многомерной задачи сведено на каждом дробном шаге к решению одномерных задач или задач более простой структуры.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-01-00168а).

Список литературы

- [1] **Candler G.V., MacCormack R.W.** The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. AIAA-88-0511. DOI:10.2514/6.1988-511. Available at: <https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/6.1988-511>.
- [2] **Candler G.V., MacCormack R.W.** The computation of hypersonic weakly ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. *Journal Thermophysics*. 1991; 5(3):266–273.
- [3] **Rock S.G., Candler G.V., Hornung H.G.** Analysis of thermochemical nonequilibrium models for carbon dioxide flows. *AIAA Journal*. 1993; 31(12):2255–2262.
- [4] **Суржиков С.Т.** Радиационная газовая динамика спускаемых космических аппаратов. Многотемпературные модели. М.: ИПМех РАН; 2013: 706. Moscow: IPMekh RAN; 2013: 706. (In Russ.)
- [5] **Armenise I., Reynier Ph., Kustova E.** Advanced models for vibrational and chemical kinetics applied to Mars entry aerothermodynamics. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2015; 30(4):1–16. DOI:10.2514/1.T4708. Available at: https://www.researchgate.net/publication/288057658_Advanced_Models_for_Vibrational_and_Chemical_Kinetics_Applied_to_Mars_Entry_Aerothermodynamics.
- [6] **Нагнибеда Е.А., Кустова Е.В.** Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов. СПб.: Изд-во С.-Петербургского ун-та; 2003: 272.
- [7] **Armenise I., Reynier Ph., Kustova E.** State-to-state models for CO₂ molecules: from the theory to an application to hypersonic boundary layers. *Chemical Physics*. 2013; (415):269–281.
- [8] **Kosareva A., Kunova O., Kustova E. et. al.** Four-temperature kinetic model for CO₂ vibrational relaxation. *Physics of Fluids*. 2021; (33):016103.
- [9] **Samac E.** CO₂ relaxation processes in shock waves, fundamental phenomena in hypersonic flow. Edited by J.G. Hall. Ithaca, N.Y.: Cornell Univ. Press; 1966: 195–215.
- [10] **Годунов С.К.** Разностный метод численного расчета разрывных решений гидродинамики. Математический сборник. 1959; 47(89(3)):271–306.
- [11] **MacCormack R.W.** Algorithm development for hypersonic flow. AIAA Paper. 2009: 7320. DOI:10.2514/6.2009-7320. Available at: https://www.researchgate.net/publication/271366697_Algorithm_Development_for_Hypersonic_Flow.
- [12] **Lombard C.K., Bardin J., Venkatapathy E., Olinger J.** Multidimensional formulation of CSCM — an upwind flux eigenvector split method for the compressible Navier–Stokes equations. AIAA Paper No. 83-1895, Proc. AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference: 649–664.
- [13] **MacCormack R.W.** A new implicit algorithm for fluid flow. A97-32417. American Institute of Aeronautics and Astronautics. 1997: AIAA-97-2100. DOI:10.2514/6.1997-2100.
- [14] **Яненко Н.Н.** Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние; 1967: 197.
- [15] **Кустова Е.В., Нагнибеда Е.А., Шевелев Ю.Д., Сызранова Н.Г.** Неравновесная кинетика и процессы переноса при сверхзвуковом обтекании тел потоком углекислого газа. *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2008; (6):139–164.
- [16] **Ковеня В.М., Яненко Н.Н.** Метод расщепления в задачах газовой динамики. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние; 1981: 304.
- [17] **Ковеня В.М.** Алгоритмы расщепления при решении многомерных задач аэрогидродинамики. Новосибирск: Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние; 2014: 280.
- [18] **Liou M.-S., Steffen C.A.** New flux splitting scheme. *Journal of Computational Physics*. 1993; (107):23–39.

- [19] **Hardy B., De Wilde J., Winckelmans G.** A penalization method for the simulation of weakly compressible reacting gas-particle flows with general boundary conditions. *Computers and Fluids*. 2019; (190):294–307.
- [20] **Суржиков С.Т.** Компьютерная аэрофизика спускаемых космических аппаратов. Двухмерные модели. М.: Физматлит; 2018: 543.
- [21] **Frolov R.** An efficient algorithm for the multicomponent compressible Navier–Stokes equations in low- and high-Mach number. *Computers and Fluids*. 2019; (178):15–40.
- [22] **Ковеня В.М., Бабинцев П.В.** Моделирование сверхзвуковых течений на основе алгоритмов расщепления. *Прикладная механика и техническая физика*. 2017; 58(5):51–59.

Вычислительные технологии, 2023, том 28, № 2, с. 42–57. © ФИЦ ИВТ, 2023
Computational Technologies, 2023, vol. 28, no. 2, pp. 42–57. © FRC ICT, 2023

ISSN 1560-7534
eISSN 2313-691X

COMPUTATIONAL TECHNOLOGIES

DOI:10.25743/ICT.2023.28.2.005

Economical finite-difference algorithms for spatial hypersonic flows of a multicomponent gas with thermochemical nonequilibrium

GRIGORYEV YURI N.¹, KOVENYA VICTOR M.^{1,2,*}

¹Federal Research Center for Information and Computational Technologies, 630090, Novosibirsk, Russia

²Novosibirsk State University, 630090, Novosibirsk, Russia

*Corresponding author: Kovenya Victor M., e-mail: kovenya@ict.nsc.ru

Received August 09, 2022, revised October 17, 2022, accepted December 26, 2022.

Abstract

The article addresses construction of economical finite-difference algorithms for spatial problems of hypersonic aerodynamics. A brief survey of modern models and algorithms used in this field is given. Their computational complexity due to the modelling of vibrational and chemical kinetics is examined. On the base of two-temperature model of a multicomponent dissociating gas new algorithms are constructed. The approximate factorization method or the predictor-corrector scheme with splitting of operators by physical processes and spatial directions are employed. Their realization at fractional steps to three-point scalar sweeps allows reducing number of arithmetic operations per grid node. Moreover, the number of operations increases linearly with the number of grid nodes and the number of equations. The proposed algorithms allow efficient parallelization.

Keywords: hypersonic aerodynamics, thermochemical nonequilibrium, approximate method of factorization, predictor-corrector scheme, splitting into physical processes and spatial directions.

Citation: Grigoryev Yu.N., Kovenya V.M. Economical finite-difference algorithms for spatial hypersonic flows of a multicomponent gas with thermochemical nonequilibrium. *Computational Technologies*. 2023; 28(2):42–57. DOI:10.25743/ICT.2023.28.2.005. (In Russ.)

Acknowledgements. The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 20-01-00168a).

References

1. **Candler G.V., MacCormack R.W.** The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. AIAA-88-0511. DOI:10.2514/6.1988-511. Available at: <https://arc.aiaa.org/doi/10.2514/6.1988-511>.
2. **Candler G.V., MacCormack R.W.** The computation of hypersonic weekly ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. *Journal Thermophysics*. 1991; 5(3):266–273.

3. **Rock S.G., Candler G.V., Hornung H.G.** Analysis of thermochemical nonequilibrium models for carbon dioxide flows. *AIAA Journal*. 1993; 31(12):2255–2262.
4. **Surzhikov S.T.** Radiacionnaya gazovaya dinamika spuskaemykh kosmicheskikh apparatov. *Mnogotemperaturnye modeli* [Radiative gas dynamics of descending space vehicles. Multi-temperature models]. Moscow: IPMekh RAN; 2013: 706. (In Russ.)
5. **Armenise I., Reynier Ph., Kustova E.** Advanced models for vibrational and chemical kinetics applied to Mars entry aerothermodynamics. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*. 2015; 30(4):1–16. DOI:10.2514/1.T4708. Available at: https://www.researchgate.net/publication/288057658_Advanced_Models_for_Vibrational_and_Chemical_Kinetics_Applied_to_Mars_Entry_Aerothermodynamics.
6. **Nagnibeda E., Kustova E.** Non-equilibrium reacting gas flows. Berlin; Heidelberg, Springer; 2009: 252.
7. **Armenise I., Reynier Ph., Kustova E.** State-to-state models for CO₂ molecules: from the theory to an application to hypersonic boundary layers. *Chemical Physics*. 2013; (415):269–281.
8. **Kosareva A., Kunova O., Kustova E. et. al.** Four-temperature kinetic model for CO₂ vibrational relaxation. *Physics of Fluids*. 2021; (33):016103.
9. **Camac E.** CO₂ relaxation processes in shock waves, fundamental phenomena in hypersonic flow. Edited by J.G. Hall. Ithaca, N.Y.: Cornell Univ. Press; 1966: 195–215.
10. **Godunov S.K.** A difference method of numerical calculation of discontinuous solutions of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik. Novaya Seriya*. 1959; 47(89(3)):271–306. (In Russ.)
11. **MacCormack R.W.** Algorithm development for hypersonic flow. *AIAA Paper*. 2009: 7320. DOI:10.2514/6.2009-7320. Available at: https://www.researchgate.net/publication/271366697_Algorithm_Development_for_Hypersonic_Flow.
12. **Lombard C.K., Bardin J., Venkatapathy E., Olinger J.** Multidimensional formulation of CSCM — an upwind flux eigenvector split method for the compressible Navier–Stokes equations. *AIAA Paper No. 83-1895, Proc. AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference*: 649–664.
13. **MacCormack R.W.** A new implicit algorithm for fluid flow. A97-32417. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*. 1997: AIAA-97-2100. DOI:10.2514/6.1997-2100.
14. **Yanenko N.N.** The method of fractional steps: the solution of problems of mathematical physics in several variables. Springer-Verlag, Berlin; Heidelberg; 1971: 160. DOI:10.1007/978-3-642-65108-3.
15. **Kustova E.V., Nagnibeda E.A., Shevelev Yu.D., Syzranova N.G.** Non-equilibrium kinetics and transport processes in supersonic carbon dioxide flows around blunt bodies. *Physical-Chemical Kinetics*. 2008; (6):139–164. (In Russ.) Available at: <http://chemphys.edu.ru/issues/2008-6/articles/292>.
16. **Kovenya V.M., Yanenko N.N.** Metod rasshhepleniya v zadachakh gazovoy dinamiki [Splitting method in gas dynamics problems]. Novosibirsk: Nauka, Sibirskoe Otdelenie; 1981: 304. (In Russ.)
17. **Kovenya V.M.** Algoritmy rasshhepleniya pri reshenii mnogomernykh zadach aerogidrodinamiki [Splitting algorithms in solving multidimensional problems of fluid dynamics]. Novosibirsk: Izdatel'stvo Sibirskogo Otdeleniya RAN; 2014: 280. (In Russ.)
18. **Liou M.-S., Steffen C.A.** New flux splitting scheme. *Journal of Computational Physics*. 1993; (107):23–39.
19. **Hardy B., De Wilde J., Winckelmans G.** A penalization method for the simulation of weakly compressible reacting gas-particle flows with general boundary conditions. *Computers and Fluids*. 2019; (190):294–307.
20. **Surzhikov S.T.** Komp'yuternaya aerofizika spuskaemykh kosmicheskikh apparatov. *Dvukhmernye modeli* [Computer aerophysics of descending space vehicles. Two-dimensional models]. Moscow: Fizmatlit; 2018: 543. (In Russ.)
21. **Frolov R.** An efficient algorithm for the multicomponent compressible Navier–Stokes equations in low- and high-Mach number. *Computers and Fluids*. 2019; (178):15–40.
22. **Kovenya V.M., Babintsev P.V.** Simulation of supersonic flows on the basis of splitting algorithms. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 2017; 58(5):801–808.