

SOLUCION DEL PROBLEMA POTENCIAL TRANSONICO ESTACIONARIO  
POR UN METODO GRADIENTE CONJUGADO/TANGENTE

Mario A. D'Errico  
Mario A. Storti  
Sergio R. Idelsohn

Grupo de Mecánica Computacional  
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria  
Química (INTEC)  
CONICET - UNL  
Santa Fe - República Argentina

RESUMEN

En este trabajo se propone una alternativa para la matriz de precondicionamiento a emplear en el método de gradientes conjugados, aplicado a la solución por elementos finitos/mínimos cuadrados de la ecuación potencial transónica.

La alternativa propuesta permite reducir, finalmente, el esquema de gradientes conjugados con precondicionamiento a un método de Newton Raphson con line search.

ABSTRACT

In this work we present an alternative to the preconditioning matrix used in the conjugate gradient method when applied to the finite element/least squares solution of the full-potential transonic equation.

The proposed alternative allows us to convert the preconditioned conjugate gradient scheme to a Newton-Raphson method with line search.

## INTRODUCCION

La solución numérica por elementos finitos del problema potencial transónico estacionario posee como una de sus características la dificultad de resolver directamente el sistema no lineal resultante de la discretización. Esto es debido al carácter indefinido de la matriz jacobiana del sistema no lineal en el régimen transónico. Siguiendo el trabajo de Glowinsky, Pironneau y otros abordamos la solución como un problema de minimización de un funcional, con el empleo en particular del método de gradientes conjugados con preconditionamiento. Se propone una matriz preconditionante que permite lograr una notable velocidad de convergencia si reducimos el esquema de gradiente conjugado a uno de gradiente (steepest descent).

### METODO DE GRADIENTES CONJUGADOS (MGC) PRECONDICIONADO

Consideremos la resolución del sistema lineal:

$$\underline{H} \underline{\phi} = \underline{b} \quad (1)$$

por el método de gradiente conjugado, donde  $\underline{H}$  es simétrica y definida positiva. El problema equivale a la minimización del funcional siguiente:

$$F(\underline{\phi}) = \frac{1}{2} \underline{\phi}^T \underline{H} \underline{\phi} - \underline{b}^T \underline{\phi} + c \quad (2)$$

El gradiente del funcional es:  $\underline{\nabla} F = \underline{H} \underline{\phi} - \underline{b} \quad (3)$

su hessiano es:  $\underline{\mathcal{H}} = \underline{H} \quad (4)$

Si se utiliza una matriz de preconditionamiento  $\underline{C}$ , definida positiva la dirección de descenso en el MGC está definida por (ref. [1]):

$$\underline{C} \underline{g} = -\underline{\nabla} F \quad (5)$$

La mayor o menor convergencia del método está directamente ligado al número de condición de la matriz  $\underline{A} = \underline{C} \underline{H}$ , definido aquí como (ref. [1]):

$$k(\underline{A}) = \frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_i |\lambda_i|} \quad (6)$$

donde los  $\lambda_i$  son los autovalores de  $\underline{A}$ .

Como caso extremo, usando  $\underline{C} = \underline{H}$ , se tiene  $k(\underline{A}) = 1$ . En esta situación puede probarse que el método converge en una iteración.

La extensión de éstas consideraciones al caso de un funcional no lineal (vinculado a un sistema no lineal de ecuaciones) permiten obtener el preconditionamiento óptimo cuando estamos suficientemente cerca de un mínimo del funcional.

Alrededor del mínimo, el funcional puede desarrollarse:

$$F(\underline{\phi}) = F(\underline{\phi}^*) + (\underline{\phi} - \underline{\phi}^*)^T \underline{X}^* (\underline{\phi} - \underline{\phi}^*) + O(|\underline{\phi} - \underline{\phi}^*|^3) \quad (7)$$

donde  $\underline{\phi}^*$  es la solución y  $\underline{X}^*$  es el hessiano en ese punto.

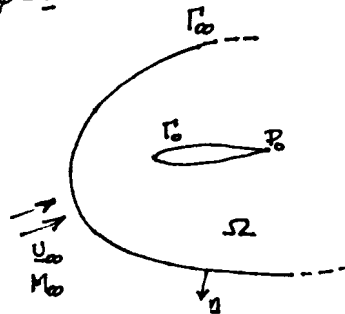
El hecho que  $\underline{\phi}^*$  es un minimizante permite afirmar que  $\underline{X}^*$  es definido positivo.

De todo esto, entonces, surge el interés de obtener una aproximación al hessiano suficientemente cerca de la solución.

#### PROBLEMA TRANSONICO

El potencial transónico en estado estacionario, considerado por simplicidad sin sustentación y sin condición de entropía (para eliminar los choques de expansión), está dado por:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho \nabla \phi) &= 0 && \text{en } \Omega \\ \rho &= \rho_0 \left( 1 - \frac{\gamma-1}{\gamma+1} \frac{|\nabla \phi|^2}{c_0^2} \right)^{\frac{1}{\gamma-1}} && \nabla \phi = \underline{v} \\ \rho \frac{\partial \phi}{\partial n} &= \rho U_\infty && \text{en } \Gamma_\infty \\ \rho \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0 && \text{en } \Gamma_0 \\ \phi &= 0 && \text{en } P_0 \end{aligned} \quad (8)$$



La discretización por elementos finitos (Galerkin, forma débil) conduce al sistema no lineal:

$$R(\phi) = \underline{G}(\phi) + \underline{E} = 0 \quad (9)$$

donde:

$$G_i = \int_{\Omega} 1/(\|\nabla\phi\|) \nabla\phi^T \nabla N_i \, d\Omega \quad (10)$$

$$E_i = - \int_{\Gamma_0} u_n N_i \, d\Gamma \quad (11)$$

con:  $\hat{\phi} = \sum \phi_i N_i(x) \quad (12)$

$$\underline{\phi} = (\phi_1 \dots \phi_1 \dots \phi_n)^T$$

El problema (10) puede resolverse por mínimos cuadrados, minimizando una cierta norma de  $\underline{R}$  (ref. [2],[3],[4],[5]).

$$J(\phi) = \frac{1}{2} \underline{R}(\phi)^T \underline{\Delta}^{-1} \underline{R}(\phi) \quad (13)$$

donde  $\underline{\Delta}$  es la denominada matriz laplaciana (simétrica y definida positiva):

$$\Delta_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_i^T \nabla N_j \, d\Omega \quad (14)$$

#### SOLUCION POR GRADIENTES CONJUGADOS PRECONDICIONADO

Para la minimización de (13) por MGC tomamos como preconditionante, estando lejos de la solución  $\phi^*$ , a la matriz laplaciana  $\underline{\Delta}$  (14) (ref. [2],[3],[4],[5]). Una vez que estamos cerca de la solución resulta interesante obtener una aproximación al hessiano como preconditionante.

El gradiente de (13) es:

$$\frac{\partial J}{\partial \phi_i} = \frac{1}{2} \frac{\partial R_k}{\partial \phi_i} \Delta_{kj}^{-1} R_j + \frac{1}{2} R_k \Delta_{kj}^{-1} \frac{\partial R_j}{\partial \phi_i}$$

$$\nabla J = \underline{K} \underline{\Delta}^{-1} \underline{R} \quad (15)$$

donde:

$$K_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial \phi_j} = \int_{\Omega} \rho \nabla N_i^T \left( \underline{I} - \frac{\nabla \phi \nabla \phi^T}{c^2} \right) \nabla N_j \, d\Omega \quad (16)$$

es la denominada matriz trngente (jacobiano del residuo  $\underline{R}$ ), en la cual  $c$  es la velocidad local del sonido.

El hessiano de (13) es:

$$\mathcal{H}_{ij} = \frac{\partial^2 J}{\partial \phi_i \partial \phi_j} = \frac{\partial K_{ik}}{\partial \phi_j} \Delta_{kp}^{-1} R_p + K_{ik} \Delta_{kp}^{-1} K_{pj} \quad (17)$$

El segundo término de (17) es una matriz simétrica y semidefinida positiva que denotamos:

$$\underline{B}(\phi) = \underline{K} \underline{\Delta}^{-1} \underline{K} \quad (18)$$

Como se tiene que:

$$\underline{R}(\phi^*) = 0 \quad (19)$$

resulta:

$$\underline{\mathcal{H}}^* = \underline{B}(\phi^*) \quad (20)$$

El primer término de (17) es muy difícil de calcular desde el punto de vista computacional pero cerca de la solución, es del orden  $\|\phi - \phi^*\|$ .

En consecuencia, es razonable tomar como preconditionante a  $\underline{K}$ , una vez que  $\phi$  se halla suficientemente cerca de la solución, lo que puede determinarse en base a la norma del residuo (9).

Una aparente dificultad de este preconditionante es su complejidad ya que está constituido por el producto de tres matrices. Sin embargo, si tenemos en cuenta que la operación a efectuarse está definida por la (5), reemplazando la expresión (15), resulta:

$$\underline{g} = - \left( \underline{K} \underline{\Delta}^{-1} \underline{K} \right)^{-1} \underline{K} \underline{\Delta}^{-1} \underline{R}$$

$$\underline{g} = - \underline{K}^{-1} \underline{R} \quad (21)$$

Vemos entonces que la dirección de descenso resulta la que se obtendría si hicieramos Newton-Raphson.

Lo anterior sugiere que, una vez cerca de la solución (fijando un criterio en base a la norma del residuo), podría usarse directamente el método de Newton-Raphson combinado con un line-search para estabilizar el proceso iterativo; o continuar con gradiente conjugado con (19) como dirección de descenso. Los casos tratados muestran la convergencia de la primera alternativa (ver figura 2).

El algoritmo de cálculo puede escribirse:

dado  $\phi^{(0)}$

$n \geq 0$  :

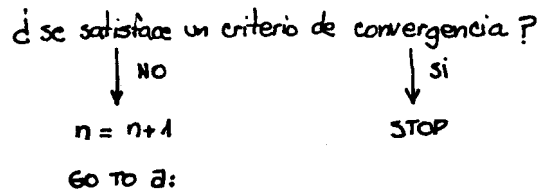
a: resolver en  $\underline{g}$  :  $\underline{C} \underline{g}^{(n)} = - \underline{K}^{(n)} \underline{\Delta}^{-1} \underline{R}^{(n)}$

$$\underline{z}^{(n)} = \underline{g}^{(n)} + \gamma \underline{z}^{(n-1)} \quad ; \quad \underline{z}^{(0)} = \underline{g}^{(0)} \quad (22)$$

$$\gamma = \epsilon \left( \underline{g}^{(n)} - \underline{g}^{(n-1)} \right)^T \underline{\Delta} \underline{g}^{(n)} / \underline{g}^{(n-1)T} \underline{\Delta} \underline{g}^{(n-1)}$$

$$\lambda_n = \arg \min_{\lambda \geq 0} J(\phi^{(n)} + \lambda \underline{z}^{(n)})$$

$$\phi^{(n+1)} = \phi^{(n)} + \lambda_n \underline{z}^{(n)}$$



donde  $\epsilon$  es un parámetro 1 ó 0 que activa o desactiva el MGC.

El procedimiento a seguir puede resumirse como:

1. Gradiente conjugado con preconditionante laplaciana

$$\underline{C} = \underline{A} \quad \epsilon = 1$$

hasta el cumplimiento de algún criterio de cercanía de la solución.

A partir de este punto, la opción entre 1.1 y 1.2:

- 1.1 Gradiente conjugado con preconditionante tangente

$$\underline{C} = \underline{B}(\phi) \quad \epsilon = 1$$

- 1.2 Steepest descent con preconditionante tangente.  $\epsilon = 0$

La experiencia realizada indica la superioridad de la opción 1.2 sobre la 1.1 .

#### TECNICA DE UPWIND

De la solución directa de (10) surgen, en forma natural, resultados con ambos tipos de ondas de choque: de expansión (violatorias del segundo principio de la termodinámica) y de compresión. Estas soluciones gozan de mayor estabilidad que las soluciones físicas (ref. [4]).

Con el fin de obtener resultados con valor físico, eliminando las ondas de expansión, se hace necesario cumplir de alguna forma la condición de entropía a través del choque. Esto puede efectuarse de muy diversas maneras; la adoptada consiste en el método de la densidad artificial (ref. [6]).

Se reemplaza la densidad por la expresión siguiente:

$$\bar{\rho} = \rho - \mu h \frac{1}{\Delta s} \quad (73)$$

donde:

$h$  : medida del tamaño de malla

$M$  : parámetro de up-wind  
igual a  $\bar{M}$  si  $M > 1$   
igual a 0 si  $M < 1$

$s$  : coordenada a lo largo de la línea de corriente.

La derivada  $\partial f / \partial s$  es aproximada en base a valores nodales calculados por el siguiente promedio ponderado:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_i = \frac{1}{\int_{\Omega} N_i d\Omega} \int_{\Omega} \frac{\partial f}{\partial s} N_i d\Omega \quad (24)$$

Integrando por partes:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_i = \frac{1}{\int_{\Omega} N_i d\Omega} \left[ - \int_{\Omega} \frac{\partial N_i}{\partial s} d\Omega + \int_{\Gamma} N_i \underline{s} \cdot \underline{n} d\Gamma \right] \quad (25)$$

Teniendo en cuenta que la integral sobre el contorno es nula sobre  $\Gamma_0$  e irrelevante sobre  $\Gamma_{\infty}$ , la aproximación queda:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)_i = - \frac{1}{\int_{\Omega} N_i d\Omega} \int_{\Omega} \frac{1}{|\nabla \phi|} \nabla N_i^T \nabla \phi d\Omega \quad (26)$$

## RESULTADOS

Se tomó el ejemplo del cilindro como problema test. En la Fig. 1 se muestra parte de la malla cercana al semi-cilindro, constituida por 20 x 10 elementos, con 231 g.d.l..

Los resultados mostrados corresponden a un número de Mach de corriente libre  $M = 0.45$ .

La Fig. 2 presenta las historias de convergencia para las diferentes alternativas de resolución:

curva superior : gradientes conjugados con matriz preconditionante laplaciana.

curva media : gradientes conjugados con matriz preconditionante tangente a partir de la iteración 7.

curva inferior : steepest descent con preconditionante tangente a partir de la iteración 7.

Es verdad que, en los dos casos últimos, la necesidad de calcular la inversa de la matriz tangente actual en cada iteración carga a ésta con mayor tiempo de CPU pero es de señalar que este incremento no es significativo frente a la velocidad de convergencia alcanzada con el método, en particular para el último caso.

La Fig. 3 presenta la distribución de número de Mach sobre el semicilindro para el caso de existencia de ambos tipos de ondas de choque.



La Fig. 4 muestra la distribución de Mach sobre el cilindro habiendo activado el cálculo de la densidad modificada o up-wind.

La Fig. 5 presenta una comparación de la convergencia del método Newton con line-search cuando se activa el up-wind en la densidad: la curva inferior (idéntica a la de Fig. 2) corresponde a la solución simétrica de la Fig. 3 y la curva superior al caso de la Fig. 4.

Otro caso tratado fue el de un perfil NACA 0012 a sustentación cero. La Fig. 6 muestra parte de la malla de elementos bilineales, constituida por 20 x 10 elementos y 231 g.d.l. .

La Fig. 7 presenta una comparación de convergencia para  $M = 0.78$  y sin up-wind entre:

curva superior : gradientes conjugados con preconditionante laplaciano.

curva inferior : steepest descent con preconditionante tangente a partir de la iteración 10.

La Fig. 8 muestra la distribución de número de Mach sobre el perfil para  $M = 0.78$  y sin cálculo up-wind de la densidad, observándose ambas ondas de choque.

#### REFERENCIAS

- [1] F.E. Solution of Boundary Value Problems. Theory and Computation. O. Axelsson y V.A. Barker. Academic Press, 1984.
- [2] Application of Optimal Control and F.E.M. to the Calculation of Transonic Flows and Incompressible Viscous Flows. M.O. Bristeau, O. Pironneau, R. Glowinsky, J. Periaux, P. Perrier y G. Poirier en Numerical Methods in Applied Fluid Dynamics, editado por B. Hunt, pp. 203-312. Academic Press, 1980.
- [3] On the Numerical Solution of Nonlinear Problems in Fluid Dynamics by Least Squares and F.E.M. (I) Least Squares Formulation and Conjugate Gradient Solutions of Continuous Problem. M.O. Bristeau, R. Glowinsky, J. Periaux, P. Perrier y O. Pironneau en Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng. vol. 17/18 (1979) pp. 619-657.
- [4] Numerical Methods for Nonlinear Variational Problems. R. Glowinsky, Springer 1984.
- [5] Application of a F.E.M. to Transonic Flow Problems using an Optimal Control Approach. M.O. Bristeau en Computational Fluid Dynamics, editado por W. Kollmann, pp. 281-328. McGraw-Hill, 1980.
- [6] Preconditioned Conjugate Gradient Methods for Transonic Flow Calculations. Y.S. Wong y M.M. Hafez en Preconditioning Methods: Analysis and Applications editado por D. Evans, pp. 439-461. Gordon and Breach, 1983.

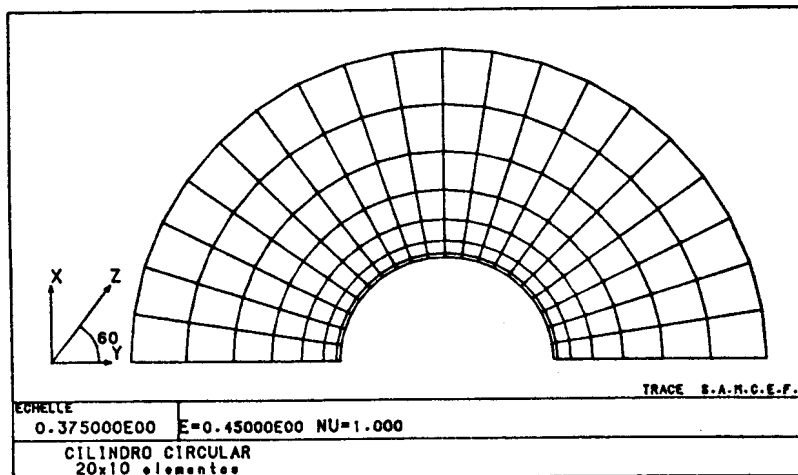


Figura 1 : malla de elementos bilineales. Cilindro circular.

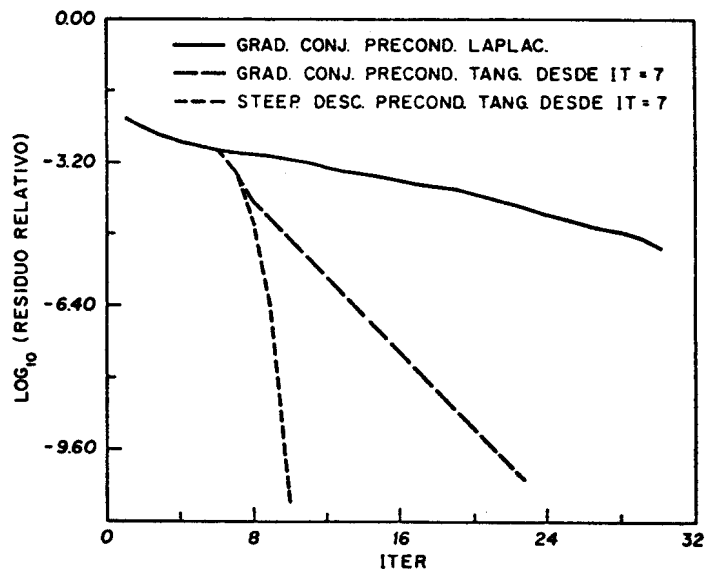


Figura 2 : comparación de preconditionamientos para las alternativas de solución. Cilindro M=0.45 sin upwind.

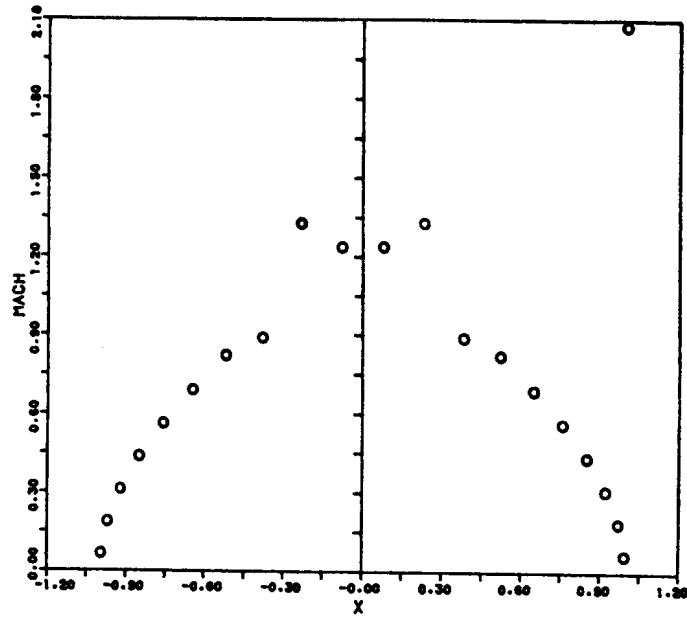


Figura 3 : distribución de n°de Mach sobre el semicilindro.  
M=0.45 sin upwind (choques de los dos tipos )

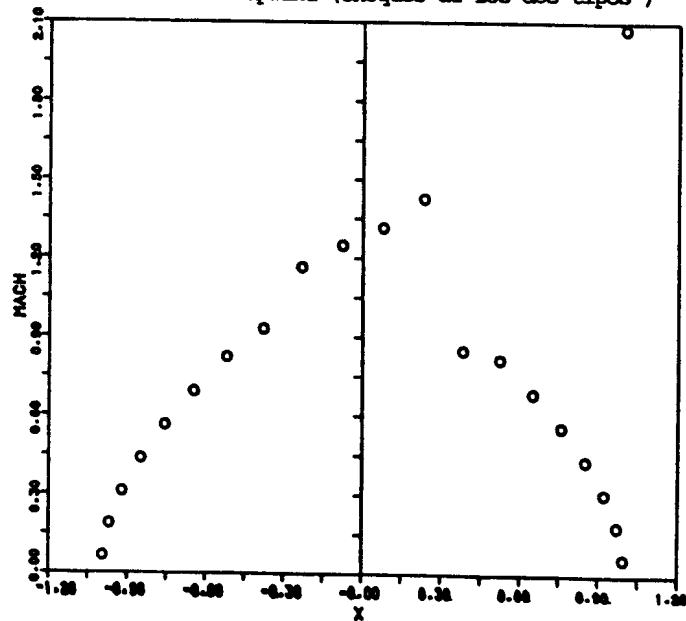


Figura 4 : distribución de n°de Mach sobre el semicilindro.  
M=0.45 con upwind en la densidad.

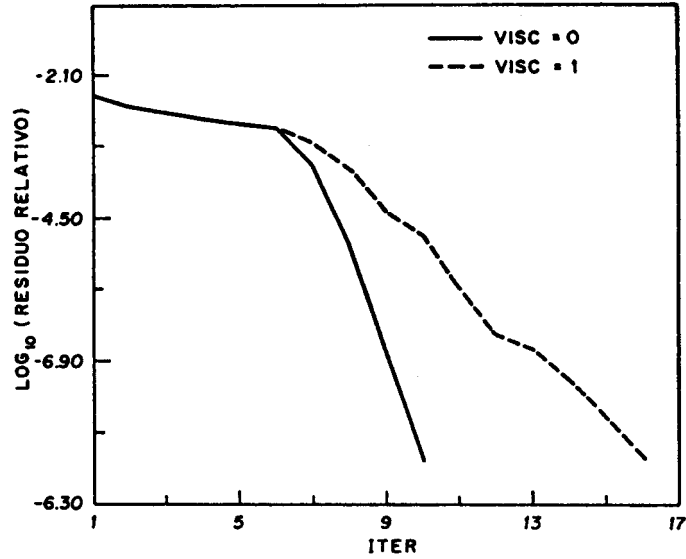


Figura 5 : comparación convergencia del método Newton con line search con y sin upwind en la densidad.

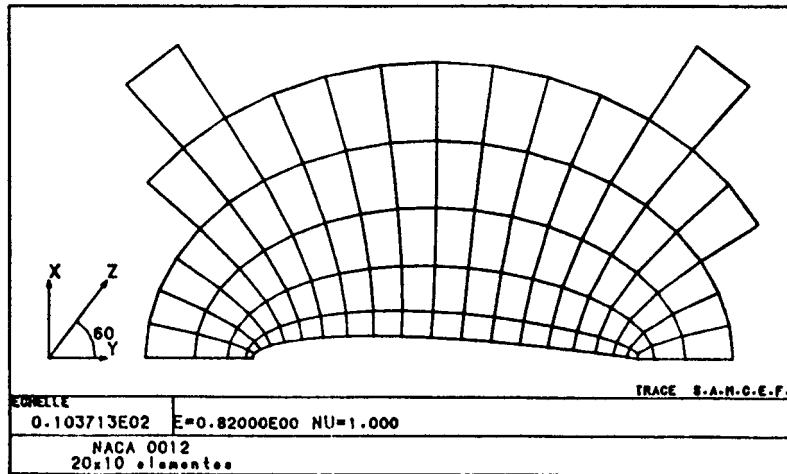


Figura 6 : malla de elementos bilineales. perfil NACA 0012.

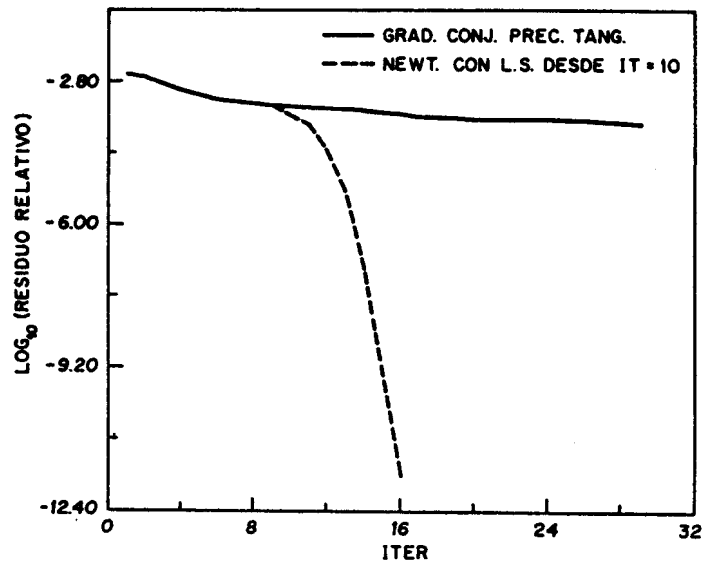


Figura 7 : comparación convergencia NACA 0012 sin upwind.  
M=0.78

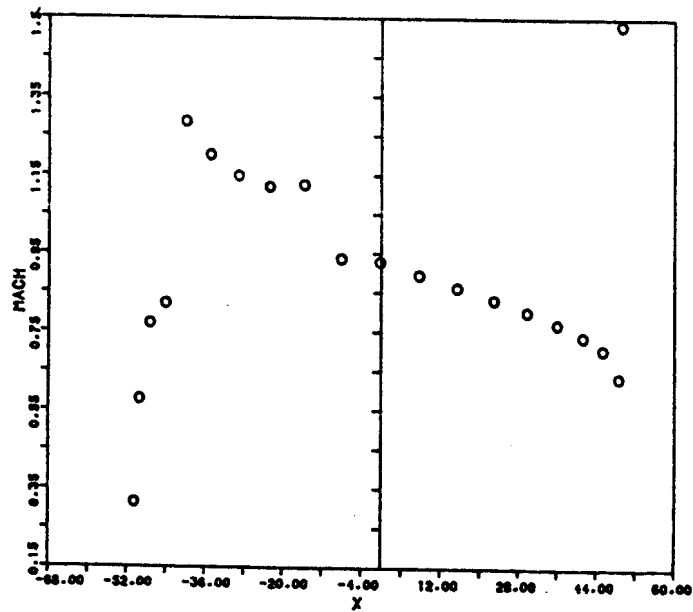


Figura 8 : distribución de n°de Mach sobre el perfil.  
M=0.78 sin upwind.