OPERADORES L-HERMITIANOS PARA ALGORÍTMOS DE INTEGRAÇÃO DE PASSO MÚLTIPLOS

José Elias Laier
Julio Cesar Moran Hassan
Departamento de Estruturas, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, Av. Dr. Carlos Botelho, 1465, CEP 13560, São Carlos-SP, Brasil.

RESUMO

Operadores de Diferenças Finitas Hermitianas com parâmetros livres são trabalhados no sentido de se obter algoritmos consistentes, convergentes e estáveis para a integração de passo múltiplo em problemas da dinâmica das Estruturas. Destaque especial é dado a um operador de ordem três estável, ainda não detetado em trabalhos nesse assunto.

ABSTRACT

Hermitian Finite Difference operators with free parameters were developed in order to obtain consistent, convergent and stable multistep algorithms to solve numerically structural dynamic problems. A stable operator of order three wich was ignored by classical papers related to this subject is presented.

INTRODUÇÃO

A integração numérica das equações da Dinâmica das Estruturas vem sendo objeto de atenção de longa data. Inicialmente os algoritmos propostas tinham por base os operadores clássicos de Diferenças Finitas Lagrangeanas de natureza condicionalmente estável (diferenças centrais); operadores estáveis são sugeridos por Houbolt [1], embora o tratamento dispensado às condições iniciais ainda mediante operadores centrais. Uma nova técnica de integração foi introduzida posteriormente por Newmark [2], cujo aperfeiçoamento contou com numerosas contribuições [3] [16]. O método de Houbolt também foi objeto de novas considerações, como muito bem foi exposto em Thomas [17]. Um estudo particular da importância da abordagem adequada das condições iniciais foi apresentado por Hulbert [18] e o mesmo autor, em trabalho bastante recente [19], volta a chamar a atenção para algumas importantes propriedades do método de Houbolt, não verificadas nas demais técnicas de integração (especialmente a propriedade de aniquilamento assintótico).

O presente trabalho é dedicado ao desenvolvimento de uma nova família de operadores, decorrentes da formulação Hermitiana de Diferenças Finitas envolvendo parâmetros livres, daí a denominação L-Hermitianos, de sorte a serem ajustadas conforme as propriedades desejadas. Nesse sentido segue-se, basicamente, a orientação dada por Collatz [20], bem como a de outros textos clássicos [21], [22]. Todavia, cumpre registrar que a origem da pesquisa que resultou nos estudos agora apresentados tomou por base primeira o texto pioneiro sobre os operadores hermitianos em nosso meio indicado pela referência [23], onde se sugere o nome de Diferenças Finitas Plurilocal, no lugar de Diferenças Finitas Hermitianas conforme [20].

OPERADORES HERMITIANOS

Uma maneira expedita de se formular os operadores de Diferenças Finitas, e particularmente os hermitianos, consiste em se considerar, por exemplo, expressão do tipo [20]:

$$P = \Sigma\, a_i y_i + \Sigma\, b_j \ddot{y}_j + R \tag{1}$$

onde y_i vem a ser o valor da função a ser integrada, num ponto genérico da malha obtida pela discretização da variável independente, considerada neste trabalho regular, ou seja, com incrementos de valor constante; $\ddot{y}_i$ vem a ser a derivada segunda daquela função, de maneira similar, a_i e b_j são parâmetros livres, que controlam a ordem do resto R. A título de exemplo, no caso da diferença central clássica tem-se:

$$P = -y_i + 2y_{i-1} - y_{i-2} + h^2 \ddot{y}_{i-1} - \frac{h^4}{12} y_i^{IV} + \ldots \tag{2}$$

onde $a_i=-1$, $a_{i-1}=2$, $a_{i-2}=-1$, $b_{i-1}=h^2$, com h sendo o incremento da variável independente, e sendo o último termo de (2), em verdade, o primeiro termo da série correspondente ao resto R; indicando-se claramente que, na avaliação aproximada da derivada segunda, tem-se:

$$\ddot{y}_{i-1} = \frac{1}{h^2}\left(y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}\right) + \frac{h^2}{12} \ddot{y}_i + \ldots \tag{3}$$

cuja ordem de erro vem a ser proporcional, como é sabido, ao quadrado do incremento.

Os parâmetros livres presentes em (1) são facilmente obtidos levando-se nesta expressão correspondentes desenvolvimentos em série de potências da função y, ou seja, por exemplo:

$$\begin{aligned} y_{i-1} &= y_i - hy_i' + \frac{h^2}{2} y_i'' - \frac{h^3}{6} y_i''' + \dots \\ y_{i-1}'' &= y_i'' - hy_i''' + \frac{h^2}{2} y_i^{IV} - \frac{h^3}{6} y_i^{V} + \dots \text{ etc.} \end{aligned} \tag{4}$$

e impondo-se a condição de serem nulos os termos de ordem mais baixa que o desejado para o resto R, a menos de um múltiplo [20]. É fácil verificar que o primeiro termo da série de potências do resto em (1) tem a ordem igual ao número de valores da função contidas nas somatórias; por exemplo, no caso do operador de Numerov-Fox (também conhecido como Range-Kutta de ordem quatro) tem-se:

$$P = -y_i + 2y_{i-1} - y_{i-2} + \frac{h^2}{12}\left(y_i'' + 10y_{i-1}'' + y_{i-2}''\right) + \frac{3h^6}{720} y^{VI} + \tag{5}$$

lembrando-se que a avaliação aproximada dos termos em derivada segunda implica em primeiro termo da série do resto com ordem quatro, e não seis como em (5), de modo análogo ao colocado em (3).

OPERADORES L-HERMITIANOS

Os operadores hermitianos clássicos, como o exposto em (5), contemplam, em princípio, a minimização do resto (que corresponde a tornar o primeiro termo da série do resto de maior ordem possível), não se levando, pois, em consideração aspectos relativos a estabilidade dos algoritmos deles decorrentes. Assim sendo, no sentido de se atender condições de estabilidade torna-se necessário contar com parâmetros livres, cujas magnitudes são controladas de modo a conferir não só a estabilidade, mas também eventual amortecimento numérico.

Como primeiro operador L-Hermitiano considere-se o caso do de duplo passo envolvendo dois parâmetros livres, ou seja:

$$\begin{aligned} P = &-y_i + 2y_{i-1} - y_{i-2} + \beta h^2 y_i'' + \gamma h^2 y_{i-1}'' + (1 - \beta - \gamma)h^2 y_{i-2}'' + \\ &+ (-6 + 6\gamma + 12\beta)\frac{h^3 y_i'''}{6} + (34 - 36\gamma - 48\beta)\frac{h^4 y_i^{IV}}{24} + \\ &+ (-130 + 140\gamma + 160\beta)\frac{h^5 y_i^{V}}{120} + \dots \end{aligned} \tag{6}$$

verificando-se tratar-se de diferença central no caso $\gamma = 1$ e $\beta = 0$, Numerov $\gamma = 10\beta = 10/12$ e similar a Newmark no caso $\gamma = 2\beta = 1/2$, conforme mais adiante esclarecido. A introdução de amortecimento numérico implica em se tomar $\gamma = 1/2$ e $\beta > 1/4$, ou seja:

$$P = -y_i + 2y_{i-1} - y_{i-2} + h^2\left[\beta y_i'' + \frac{2}{4} y_{i-1}'' + \left(\frac{2}{4} - \beta\right) y_{i-2}''\right] +$$

$$+ \left(\frac{2}{4} - 2\beta\right)h^3 y_i^{\cdots} - \left(\frac{8}{24} - 2\beta\right)h^4 y_i^{IV} + \ldots \qquad (7)$$

indicando-se claramente a redução na ordem do resto de 2 para 1, fato já bastante sabido(o amortecimento numérico sacrifica a precisão).

Passando-se agora ao operador de passo triplo, cumpre adiantar que, embora esse operador comporta três parâmetros livres, tudo indica, no caso da equação da dinâmica das estruturas, voltar a atenção para uma variante de apenas um parâmetro livre, ou seja:

$$P = -y_i + \frac{1}{2}(5 + 4\ell)y_{i-1}(2 + 4\ell)y_{i-2} + \frac{1}{2}(1 + 4\ell)y_{i-3} +$$
$$+ \frac{h^2}{2}\left[(1 - 2\ell)y_i^{\cdot\cdot} + 2\ell y_{i-1}'' - 2\ell y_{i-2}^{\cdot\cdot} - 2\ell y_{i-3}^{\cdot\cdot}\right] +$$
$$+ (11 - 44\ell)\frac{h^4 y^{IV}}{24} + \ldots . \qquad (8)$$

que no caso $\ell = 0$ vem a ser o operador de Houbolt, resultando no caso $\ell = 1/4$ num operador estável de ordem três, ou seja:

$$P = -y_i + 3y_{i-1} - 3y_{i-2} + y_{i-3} + \frac{h^2}{4}\left[y_i^{\cdot\cdot} + y_{i-1}^{\cdot\cdot} - y_{i-2}^{\cdot\cdot} - y_{i-3}^{\cdot\cdot}\right] +$$
$$- \frac{1}{6}h^5 y_i^{VI} + \ldots \qquad (9)$$

cujas características espectrais, conforme vai ser verificado, é bastante similar às do método de Newmark.

As condições iniciais, conforme muito bem discutido em [18], devem merecer tratamento mediante operadores, no mínimo, de mesma ordem daquele a ser empregado. Assim sendo, para o caso do operador dado em (8), por exemplo, tem-se:

$$P = -y_o + \frac{132\ell - 1}{16}y_1 + \frac{17 - 132\ell}{16}y_2 + \frac{132\ell - 33}{16}hy_o' +$$
$$+ \frac{h^2}{12}\left[\left(1 + \frac{11}{96}(132\ell - 33)y_o^{\cdot\cdot} + \left(10 + \frac{55}{48}(132\ell - 33)\right)y_1^{\cdot\cdot} + \right(1 + \right.$$
$$\left. - \frac{13}{96}(132\ell - 33)\right)y_2^{\cdot\cdot}\Big] + (11 - 44\ell)\frac{y^{IV}h^4}{24} + \ldots \qquad (10)$$

que, conjugado com o dado em (5), com i=2, permite iniciar o processo de integração passo a passo.

EQUAÇÃO DA DINÂMICA DAS ESTRUTURAS

A equação de movimento da Dinâmica das Estruturas apresenta, na forma matricial, a seguinte redação:

$$[M]\{\ddot{X}\} + [C]\{\dot{X}\} + [K]\{X\} = \{F\} \qquad (11)$$

onde [M] é a matriz de massa, [C] a de amortecimento, [K] a de rigidez, {X} é o vetor de deslocamentos e {F} o das ações externas. Conforme muito bem posto em [4], o comportamento numérico de um algoritmo de integração pode perfeitamente ser estudado tendo-se por base uma equação genérica da decomposição modal correspondente, e, mais que isso, no tocante as características espectrais é o bastante a consideração apenas da vibração livre não amortecida, ou seja:

$$\ddot{y} + \omega^2 y = 0 \tag{12}$$

onde o ponto superior indica agora o grau de derivação, sendo ω a frequência angular natural do modo livre de vibração.

Em face de (12), o operador (12), por exemplo, adquire a seguinte redação deixando-se de lado o resto, já suposto nulo de ordem superior:

$$P = y_i(-1-\beta\theta^2) + y_{i-1}\left(2 - \frac{2\theta^2}{4}\right) + y_{i-2}\left(-1 - \left(\frac{2}{4} - \beta\right)\theta^2\right) = 0 \tag{13}$$

onde:

$$\theta = \omega h$$

com h no lugar de Δt; resultando na seguinte equação de diferença:

$$y_i - \frac{8-2\theta^2}{4(1+\beta\theta^2)}\, y_{i-1} + \frac{1 + (\frac{2}{4} - \beta)\theta^2}{(1 + \beta\theta^2)}\, y_{i-2} = 0 \tag{14}$$

cuja solução geral é do tipo:

$$y_n = A\,\lambda^n \tag{15}$$

porquanto a função y em (14) é função de $n\Delta t$, que, para Δt fixo passa a ser função apenas de n. A equação característica de (14), em decorrência de (15) fica então:

$$\lambda^2 - \frac{8 - 2\theta^2}{4(1+\beta\theta^2)}\,\lambda + \frac{1 + (\frac{2}{4} - \beta)\theta^2}{(1 + \beta\theta^2)} = 0 \tag{16}$$

cujas raízes são menores ou igual em módulo à unidade (estável) para qualquer valor de θ, desde que $\beta > 1/4$, conforme já exposto (no caso do operador dado em (8) a equação característica correspondente vem a ser cúbica, com uma raiz espúria-real). Verifica-se facilmente que para $\beta = 1/4$ as raízes são idênticas as do método de newmark.

Voltando-se agora ao caso geral dado em (11), torna-se necessário estudar como abordar adequadamente a presença do termo em velocidade. Conforme sugere [20], basta considerar operadores complementares adequados; por exemplo no caso do dado em (7), toma-se

$$P = -2\beta y_i + (4\beta - 1)y_{i-1} + (1 - 2\beta)y_{i-2} + \beta h y'_i + \frac{2}{4} h y'_{i-1} +$$
$$+ \left(\frac{2}{4} - \beta\right) h y'_{i-2} + \frac{h^3}{12}\, y'''_i + \dots \tag{17}$$

mantendo-se pois, para as derivadas primeiras os mesmos parâmetros aplicados às derivadas segundas em (7). Em resumo, em (7) tem-se:

$$L^1 \{y\} + L^2 \{\ddot{y}\} = 0\ (h^3) \tag{18}$$

e em (17):

$$L^3 \{y\} + L^2 \{\dot{y}\} = 0\ (h^3) \tag{19}$$

onde L^j vem a ser o operador vetorial j correspondente. No sentido de se eliminar o vetor $\{\ddot{y}\}$ em (11) a mancha operacional é a seguinte: multiplicam-se ambos os membros de (18) por [M] e o mesmo faz-se com (19) por [C] somando-se membro a membro os resultados obtidos, ou seja:

$$[M]\ L^1\{y\} + [M]\ L^2\{\ddot{y}\} + [C]\ L^3\{y\} + [C]\ L^2\{\dot{y}\} = ([M] + [C])0(h^3) \tag{20}$$

ou ainda, de (11):

$$[M]\ L^1\ \{y\} + [C]\ L^3\ \{y\} - ([K]\ L^2\ \{y\} - L^2\ \{F\}) = ([M]+[C])0(h^3) \tag{21}$$

em face da aplicação do operador L^2 em ambos os membros de (11), ficando claro em (24) o envolvimento apenas da incógnita deslocamento. No caso de operadores para as condições iniciais, como o dado em (10), por exemplo, procede-se de maneira análoga.

Cumpre chamar a atenção para o fato de que, no procedimento de eliminação do vetor de velocidades, o resultado final dado em (21) apresenta o resto com ordem reduzida de uma unidade, como aliás sucede com todos os algoritmos de integração passo a passo. Todavia, tendo-se em vista que o amortecimento físico, nos casos da prática, são de pequena magnitude, o prejuízo na precisão não tem muita influência no resultado final (o amortecimento numérico é muito mais importante [5]).

OBSERVAÇÕES FINAIS E CONCLUSÃO

O presente trabalho expôs o desenvolvimento de uma nova família de operadores, aqui denominados L-Hermitianos, para a integração passo a passo das equações da Dinâmica das Estruturas, chamando-se a atenção para um operador de natureza estável de ordem três, não previsto em textos clássicos, como o da referência [24], por exemplo. Além disso, oferece indicações, com base em [20], de como tratar o caso de equações diferenciais completas mediante operadores Hermitianos, de uma maneira mais expedita que a empregada, por exemplo, em [25].

Está em aberto, por ora, a formulação de correspondentes algorítmos de passo simples, bem como outros operadores mais requintados para a abordagem das condições iniciais.

Para encerrar, cabe agora um cometário sobre os predicados a serem abuscados nos algoritmos de integração numérica das equações da Dinâmica das Estruturas. São eles [19]:

1- pelo menos de ordem dois;
2- incondicionalmente estável;
3- amortecimento numérico controlado;

4- desprovido de "overshoot" (transiente numérico);
5- abordagem das condições iniciais com o mesmo algoritmo dos demais passos;
6- não mais que um sistema de equações implícita - a ser resolvido em cada passo.

e, mais recentemente um novo predicado está sendo aventado [19] para problemas com não linearidade física, que consiste na aniquilação assintomática (raízes da equação característica tendendo para zero com o incremento do passo sendo crescentemente aumentado). Destes predicados os operadores L-Hermitianos aqui desenvolvidos, só não atende o quinto, dada a sua natureza de passo múltiplo. Todavia, com a vantagem de só operar com o vetor de deslocamento (os operadores de passo único operam com os três vetores simultaneamente, ou seja: {X}, {X} e {X}); e mais, conforme bem colocado em [18], a abordagem consistente das condições iniciais não se coaduna com o predicado indicado no item 6. Assim sendo, grosso modo, pode-se assinalar que os prós e contras dos algoritmos existentes não indica estar em desvantagem os decorrentes dos operadores desenvolvidos neste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Os autores expressam aqui seus agradecimentos ao apoio recebido da CAPES (Ministério da Educação) e da própria Universidade de São Paulo através da CCint.

REFERÊNCIAS

1. Houbolt, G.M. "A recurrence matrix solution for the dynamic response of elastic aircraft". J.aeronaut. sci, V.17, 540-550, 1950.

2. Newmark, N.M. "A method of computation for structural dynamics" J.Eng.Mech.Div., ASCE, V.85, N.EM3, 67-94, 1959.

3. Wilson, E.L. "A computer program for the dynamic stress analysis of underground structures" SESM, Report N.68-I, Div. Struct. Eng. Mech., Univ. of California, Berkeley, 1968.

4. Bathe, K.J., Wilson, E.L. "Stability and accuracy analysis of direct integration methods" Earth.Eng. Struct.Dyn., V.1, 283-291, 1973.

5. Hilber, H.M., Hughes, T.J.R. "Collocation, dissipation and overshoot for time integration schemes in structural dynamics" Earth. Eng. Struct. Dyn., V.6, 99-117, 1978.

6. Trujillo, D.M. "The direct numerical integration of linear matrix differential equations using PA-DE aproximation" Int.J.Num.Meth.Eng., V.9, 259-270, 1975.

7. Zienkiewicz, O.C., Wood, W.L., Taylor, R.L. "An alternative single-step algorithm for dynamic problems" Earth.Eng.Struct.Dyn., V.8, 31-40, 1980.

8. Thomas, R.M. "Properties and extensions of a single-step algorithm for dynamic problems" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.10, 871-880, 1982.

9. Bazzi, G., Anderheggen, E. "The ρ-family of algorithms for time-step integrations with improved numerical dissipation" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.10, 537-550, 1982.

10.Kujawski, J., Desai, L.S. "An exact numerical time integration of scalar equations for undamped structural systems" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.12, 137-142, 1984.

11.Zienkiewicz, O.C., Wood, W.L., Hine, N.W. "A unified set of single step algoritms, Part 1: general formulations and applications" Int.J.Num.Meth., v.20, 1529-1552, 1981.

12.Katona, M.G., Zienkiewicz, O.C. "A unified set of single algorithms, Part 3: The beta-m method, a generalization of the Newmark scheme" Int.J.Num.Meth., v.21, 1345-1359, 1985.

13.Hoff, C., Pahl, P.J. "Practical performance of the θ-method and comparison with other dissipative algorithms in structural dynamics" Computer Meth.Appl.Mech.Eng., v.67, 87-110, 1988.

14.Hoff, C., Pahl, P.J. "Development of an implict method with numerical dissipation from a generalizid single-step algorithm for structural dynamics" Computer Meth.Appl.Mech.Eng., v.67, 367-385, 1988.

15.Kujawski, J., Gallagher, R.H. "A generalized loasr-squares family of algorithms for transient dynamic analysis" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.18, 539-550, 1989.

16.Miranda, I., Ferencz, R.M., Hughes, T.J.R. An improves implict time integration method for structural dynamics" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.18, 643-653, 1989.

17.Thomaz, R.M., Addison, C.A., Gladwell, L. A family of Houbolt methods for dynamic vibration problems" Int.J.Num.Meth.Geomech., v.7, 321-336, 1983.

18.Hulbert, G.M., Hughes, T.J.R. "An error analysis of truncated starting conditions in step-by-step time integration: consequences for structural dynamics" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.15, 901-910, 1987.

19.Hulbert, G.M. "Limitations on linear multistep methods for structural dynamics" Earth.Eng.Struct.Dyn., v.20, 191-196, 1991.

20.Collatz, L. "The numerical treatment of differential equations" Springer-verlag, 2a.ed., 1966.

21.Wilkinson, J.H. "The algebraic eigenvalue problem" Clarendon Press, Oaxford, 1965.

22.Smith, G.D. "Numerical solution of partial differential equations: finite difference methods" Clarendon Press, Oxford, 2a.ed., 1979.

23.Martinelli, D.A.O. "Notas de aula da disciplina: Métodos numéricos para estruturas laminares" Escola de Engenharia de São Carlos, USP, 1968.

24.Dahlquist, G.G. "A special stability problem for linear multistep methods" BIT, v.3, 27-43, 1963.

25.Argyris, J.H., St.Doltsinis, Knudson, W.C., Vaz, L.E., William, K.J. "Numerical solution of transient nonlinear problems" Comp.Meth.Appl. Mech.Eng. v.17, v.18, 341-409, 1979.