DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO BASEADO NO MÉTODO DE ARNOLDI PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE AUTOVALOR GENERALIZADO

George Oliveira Ainsworth Junior

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

_____
Carlos Magluta, D. Sc.

_____
Ney Roitman, D. Sc.

_____
Alvaro Luiz Gayoso Azeredo Coutino, D. Sc.

_____
Webe João Mansur, Ph. D.

_____
Paulo Batista Gonçalves, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
ABRIL DE 2003

AINSWORTH JR, GEORGE OLIVEIRA

Desenvolvimento de Um Algoritmo Baseado no Método de Arnoldi para Solução de Problemas de Autovalor Generalizado [Rio de Janeiro] 2003

XIV, 72 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 2003)

Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Problemas de Autovalor
2. Método de Arnoldi
3. Análise Dinâmica

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

“A mente não é um vaso a ser repleto, mas uma tocha a ser acesa”.

Plutarco (46-120).

Dedicatória

À minha mãe pelo dom da vida e pelo amparo ao longo desses anos.

À minha noiva Sarita, por todo o amor e paciência.

Às minhas tias Vanete e Vanilde (in memoriam).

AGRADECIMENTOS

Aos professores Carlos Magluta e Ney Roitman, pela orientação e paciência para comigo.

Ao prof. Alvaro Coutinho pelas contribuições valiosas para este trabalho.

Ao meu primeiro mestre: Geraldo Belmonte, o qual me fez despertar para a pesquisa.

Aos professores e amigos José Mário e Paulo Roberto, os quais me acolheram na chegada ao Rio de Janeiro.

Aos amigos de todas as horas Anderson Gadéa e Koji Nagahama.

À professora Nancy Cortopazzi.

Aos inúmeros amigos que fiz na COPPE, dentre os quais: Adcleides, Delfim Soares, Daniel Miranda, Denis, Walber, Emerson, Vitalino, Fabrício Nogueria, Fabrício Resende, Chocosta, ao mestre Tiago, Cléber (voltaço), Aluízio, Capitão Luiz, Daniel.

Aos meus eternos amigos: Darman Santana, Euler Coelho, Francisco Gabriel, Jéferson Moraes, Luis Vieira, Antônio Messias, Renato (NUCAEMAN), Gilvam, Cacai, Fabiano Smera Reeves, Vanduy, Evantenor e Fernando, Clebinho.

À Ludwig van Beethoven e Elvis Presley pela companhia nas horas mais solitárias.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

DESENVOLVIMENTO DE UM ALGORITMO BASEADO NO MÉTODO DE ARNOLDI PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE AUTOVALOR GENERALIZADO

George Oliveira Ainsworth Junior

Abril/2003

Orientadores: Carlos Magluta

Ney Roitman

Programa: Engenharia Civil

Autovalores e autovetores de operadores lineares são importantes para muitas áreas da Matemática Aplicada. Na Engenharia Civil, sobretudo na Engenharia de Estruturas o uso de problemas de autovalor tem fundamental importância, um exemplo típico é a análise dinâmica, onde os autovalores representam as frequências naturais e os autovetores os modos de vibração associados à sua frequência natural correspondente.

A crescente demanda da avaliação numérica de forma mais eficiente dessas quantidades, despertou o interesse na busca de novos métodos para a solução de problemas de autovalor, principalmente quando o problema a ser analisado conduz a quantidades pertencentes ao conjunto dos números complexos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

SOLUTION OF GENERALIZED EIGENSYSTEMS WITH ALGORITMS BASED ON ARNOLDI METHODS

George Oliveira Ainsworth Junior

April/2003

Advisors: Carlos Magluta

Ney Roitman

Department: Civil Engineering

Eigenvalues and eigenvectors of linear operators are important in many Applied Mathematics areas. In Civil Engineering, especially in Structural Analysis, eigensystems have a fundamental importance. A typical example is in dynamic analysis, where the eigenvalues represent the natural frequencies and eigenvectors the mode shape.

The incresing demand for efficient numeric evaluation of eigenvalues and eigenvectors motivated the search for new methods for the solution of complex eigensystems.

Índice

Capítulo 1 1

1 Introdução 1

1.1 Motivação e Considerações Gerais 1

1.2 Breve Histórico 2

1.3 Objetivo do Trabalho 3

1.4 Organização da Tese 4

Capítulo 2 6

2 Teoria para análise dinâmica de estruturas 6

2.1 Introdução 6

2.2 Equação diferencial do movimento para sistemas com dois graus de liberdade 6

2.3 Sistema de dois graus de liberdade com amortecimento não-proporcional 10

2.4 Sistema com muitos graus de liberdade 12

2.4.1 Cálculo da matriz de amortecimento da estrutura original 12

2.4.2 Determinação das frequências e modos de vibração para estruturas com amortecimento não-proporcional 13

Capítulo 3 16

3 Teoria Matemática 16

3.1 Introdução 16

3.2 O problema de autovalor e definições 16

3.3 Subespaços invariantes e transformações similares 18

3.4 Subespaço de Krylov 20

3.5 Método de Arnoldi 27

3.6 Critérios para a análise da acurácia dos autovalores 29

Capítulo 4 32

4 Implementação Numérica 32

4.1 Introdução 32

4.2 Aspectos computacionais do Método de Arnoldi 32

4.3 Método de Arnoldi com Reinício Implícito 35

4.4 O problema de autovalor generalizado 43

4.5 Transformação Espectral 47

4.6 Cálculo dos Autovetores 48

Capítulo 5 50

5 Aplicações 50

5.1 Metodologia para Avaliação do Método. 50

5.2 Validação da Rotina Implementada 51

5.2.1 Problema de Autovalor Padrão – Caso I 52

5.2.2 Problema de Autovalor Generalizado – Caso II 56

5.2.3 Caso II-Pórtico Tipo do Estádio Maracanã 59

5.2.4 Caso III – Modelo Reduzido em Escala da Plataforma Offshore de Carapeba 61

Capítulo 6 65

6 Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros 65

6.1 Conclusões e Considerações Finais 65

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros 66

7 Referências Bibliográficas 68

Lista de Tabelas

Tabela 5.1 – Parâmetros do teste realizado com a matriz de Wilkinson, 3 autovalores computados 53

Tabela 5.2 - Parâmetros do teste realizado com a matriz de Wilkinson, 15 autovalores computados 54

Tabela 5.3- Comparação da Norma dos Vetores Resíduo e Tempo de CPU 55

Tabela 5.4-Frequências naturais obtidas experimental e numericamente 56

Tabela 5.5- Comparação entre as frequências naturais experimentais e numéricas em (HZ)do pórtico-tipo do Maracanã 60

Tabela 5.6 –Comparação dos Tempos de Cpu para diferentes autovalores entre o IRAM e Subespaço 63

Lista de Figuras

Figura 2.1 –Esquema de dois graus de liberdade do sistema 7

Figura 4.1: Algoritmo da Fatoração de Arnoldi em k-Passos 33

Figura 4.2 – Algoritmo do Método de Arnoldi com Reinício Implícito 36

Figura 4.3 – Algoritmo de solução de sistema linear 45

Figura 5.1 – Gráfico relacionando tempo de cpu em segundos e o número de autovalores calculados pelo COPPEPACK 58

Figura 5.2 –Pórtico-Tipo do Estádio do Maracanã indicando os pontos de instalação dos sistemas de absorção. 59

Figura 5.3 – Relação tempo de cpu- número de autovalores calculados 61

Figura 5.4 –Plataforma Offshore de Carapeba, discretizada em elementos finitos, vista 3D 62

Nomenclatura

Letras Maiúsculas

M_p – Massa do sistema orincipal.

M_a – Massa do sistema auxiliar.

C_p - Coeficientes de amortecimento do sistema principal.

C_a - Coeficientes de amortecimento do sistema auxiliar.

K_p - Rigidez do sistema principal.

K_a – Rigidez do sistema auxiliar

F(t) – Força Aplicada em Função do Tempo.

$\underline{C}$ – Matriz de Amortecimento.

$\underline{K}$ – Matriz de Rigidez.

$\underline{M}$ – Matriz de massa.

$\underline{Q}$ - Matriz Ortogonal.

$\underline{U}$ – Matriz de Deslocamentos.

$\underline{A}$ – Matriz do problema de autovalor.

$\underline{B}$ - Matriz do problema de autovalor do problema generalizado.

$\underline{G}$ – Matriz projetada no subespaço de Krylov.

$\underline{X}$ – Matriz de Transformação.

$\underline{R}$ - Matriz triangular superior.

$\underline{U}$ – Matriz ortogonal.

$\underline{H}$ – Matriz de Hessenberg.

K_k – Subespaço de Krylov.

$\underline{P}$ – Projetor ortogonal.

$\underline{V}$ é uma base ortonormal de $K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$.

Letras Minúsculas

x_p, x_a – Deslocamento do sistema auxiliar e principal respectivamente.

a e b - Constantes reais.

i – número complexo = $\sqrt{-1}$.

$\underline{a}$ - Vetor dos coeficientes.

p_A - Polinômio característico de ordem "n".

$\underline{x}$ – Autovetor.

$\underline{t}$ - Autovetor à esquerda.

$\underline{v}_1$ – Vetor de partida qualquer.

$\underline{f}$ – Vetor resíduo.

$\underline{e}_i$ – i-ésimo vetor da base canônica.

$\underline{r}$ –Vetor resíduo.

Letras Gregas

$\underline{\varphi}_r$ - vetor que contém o r-ésimo modo de vibração.

ω – Frequência de excitação.

$\underline{\xi}$ - Vetor das taxas de amortecimento.

λ - Autovalor.

$\sigma(\underline{A})$ - Espectro de $\underline{A}$.

θ - valor de Ritz.

μ_j – deslocamentos dados durante o processo do “IRAM”.

ν – Número que mede o condicionamento de uma matriz.

τ - Autovalor do problema modificado.

Capítulo 1

1 Introdução

1.1 Motivação e Considerações Gerais

A motivação para o estudo do método de Arnoldi surgiu devido à uma demanda pelo uso de sistemas dinâmicos passivos com o objetivo de atenuar vibrações estruturais. A formulação desenvolvida por MAGLUTA (1993) conduz a um problema de autovalor generalizado cujas matrizes não são positivo-definidas e, portanto, o uso de rotinas baseadas em métodos consagrados como a iteração por subespaços (BATHE (1996)) é indevido.

A solução adotada por MAGLUTA foi a utilização de uma rotina baseada no algoritmo QZ (MOLER e STEWART (1973)), cujo custo computacional é muito elevado, pois o seu uso implica o cálculo de todos os autovalores e autovetores, não importando se para efetuar análise feita bastaria apenas alguns autovalores/autovetores .

A escolha do método de Arnoldi surgiu através de sugestão de COUTINHO. O método de Arnoldi é um algoritmo pertencente a uma classe de métodos baseados no subespaço de Krylov. Métodos baseados nesse subespaço são uma tendência para todos os campos que requerem a solução de sistemas de equações lineares, bem como a solução de problemas de autovalor.

Na verdade COUTINHO sugeriu o uso de um conjunto de rotinas baseadas no método de Arnoldi, o ARPACK (ARnoldi PACKage) (LEHOUCQ et al (1998)). Trata-se de uma rotina de domínio público e código aberto, estando este pacote de rotinas disponível para descarregamento no sítio dos autores (MASCHHOFF (2002)).

Após a instalação do software, verificou-se que a versão do conjunto de rotinas disponível apresentava vários problemas no ato de execução do código compilado.

Como se tratava de uma biblioteca de código aberto pensou-se que os possíveis erros encontrados poderiam ser corrigidos, porém trata-se de um pacote com quase cinqüenta rotinas, o que dificulta sua modificação, principalmente para um usuário que não tenha participado do seu desenvolvimento. No entanto, posteriormente, foi obtida uma versão que não apresentou os mesmos erros sendo, portanto utilizada como referência para as aqui desenvolvidas.

Surgiu então a proposta de implementação do método de Arnoldi para a solução de problemas de autovalor tanto padrão, quanto generalizado. A proposta de escrever uma rotina deveria ser de simples utilização, bastando apenas sua chamada pelo programa principal com a devida passagem dos argumentos necessários, o que no ARPACK não ocorre. O ARPACK permite apenas a solução do problema padrão, sendo necessário que o usuário crie sua própria estratégia para a solução de problemas generalizados. Além disso, ao longo deste trabalho, verificou-se que outras estratégias se faziam necessárias para resolver os problemas propostos devido ao mal condicionamento das matrizes do problema.

1.2 Breve Histórico

Com o advento do computador, a Álgebra Linear Computacional cresceu em importância, e mais especificamente a solução de problemas de autovalor, pôde receber uma nova abordagem. Métodos matriciais desenvolvidos por Schur e Jacobi na segunda metade do século XIX puderam finalmente ser implementados para a

solução de problemas de ordem satisfatória, deixando de lado o tratamento polinomial e suas dificuldades de implementação numérica.

No início dos anos 50, LANCZOS (1950) desenvolveu um método para a solução de problemas de autovalor simétricos, empregando transformações similares, obtendo uma matriz da qual fosse mais simples obter seus autovalores do que a matriz original do problema. ARNOLDI em (1951) generalizou o método, estendendo-o para problemas não simétricos.

Devido as limitações dos recursos computacionais da época, o método de Arnoldi foi abandonado, sendo praticamente deixado de lado por mais de uma década até que WILKINSON (1965) o retomou, publicando uma análise do método e associando-o ao subespaço de Krylov.

O principal impulso para o método foi dado por SAAD (1980), que sugeriu uma série de variações para o método de Arnoldi. Baseado nos trabalhos de SAAD, SORENSEN (1992) desenvolveu o Método de Arnoldi com Reinício Implícito, o qual deu origem ao pacote já citado, ARPACK.

1.3 Objetivo do Trabalho

O objetivo desse trabalho consiste em desenvolver um algoritmo para a solução de problemas de autovalor generalizado, utilizando uma variação do método de Arnoldi, especificamente o Método de Arnoldi com Reinício Implícito. A escolha de uma variação do método de Arnoldi deu-se por causa de problemas que serão melhor expostos no Capítulo 4.

O problema estudado por MAGLUTA (1993) serviu como motivação, porém não se trata de um algoritmo só para a solução de um problema específico. Buscou-se

desenvolver rotinas as mais generalistas possíveis, capazes de serem utilizadas em qualquer aplicação que necessite da solução de um problema de autovalor tanto generalizado, quanto o padrão.

Para se comparar o algoritmo desenvolvido, foram utilizadas rotinas com implementações de métodos já consagrados inclusive o ARPACK. Estas rotinas serão melhores detalhadas nos capítulos seguintes.

É importante ressaltar que não é objetivo do presente trabalho desenvolver uma rotina para competir com o ARPACK. Trata-se, pois, de um trabalho que visa discutir e estabelecer conclusões sobre os detalhes matemáticos e da implementação numérica, apresentando as soluções adotadas.

1.4 Organização da Tese

No que diz respeito a organização deste trabalho, o mesmo está organizado da seguinte forma:

a. No Capítulo 2 será apresentado o problema de redução de vibrações com o usos de sistemas dinâmicos passivos. Começando com um modelo de um grau de liberdade e estendendo este modelo para "n" graus de liberdade. Neste capítulo será apresentado o problema de autovalor que serviu como motivação para o estudo do Método de Arnoldi.
b. O Capítulo 3 apresenta a teoria matemática necessária para o estudo do problema de autovalor. Inicialmente só serão abordados os aspectos concernentes ao problema padrão. Um maior enfoque será dado ao estudo do subespaço de Krylov, para só então apresentar o Método de Arnoldi.

c. No Capítulo 4 estão descritas as implementações do Método de Arnoldi e o Método de Arnoldi com Reinício Implícito, o qual é uma modificação daquele para contornar os problemas que serão futuramente descritos. É neste capítulo que se faz a extensão do método para problemas de autovalor generalizado.
d. O Capitulo 5 apresenta as aplicações para a validação da metodologia adotada e sua comparação com outras rotinas como o ARPACK e outros métodos como o algoritmo QZ (MOLER E STEWART (1973)).
e. No Capítulo 6 serão expostas as conclusões deste trabalho e a apresentação de sugestões para trabalhos futuros, sugestões estas que surgiram no decorrer do desenvolvimento do mesmo e que, por causa do tempo, não puderam ser implementadas.
f. Finalizando, segue uma lista das referências bibliográficas utilizadas durante a elaboração deste trabalho.

Capítulo 2

2 Teoria para análise dinâmica de estruturas

2.1 Introdução

Será apresentada nesse capítulo a teoria necessária para a análise dinâmica de estruturas no domínio da frequência, que, como já foi dito anteriormente, foi o tema que serviu como motivação para o estudo e implementação do Método de Arnoldi.

O uso de sistemas auxiliares para a atenuação de vibrações foi largamente estudado por MAGLUTA (1993), o qual, na ocasião, chegou a matrizes que tinham autovalores complexos devido a sua matriz de amortecimento ser linearmente independente da massa e da rigidez da estrutura principal, como será exposto a seguir.

2.2 Equação diferencial do movimento para sistemas com dois graus de liberdade

Por simplicidade será apresentado o modelo para dois graus de liberdade, considerando como sendo uma das partes a estrutura principal reduzida a um grau de liberdade e a outra o sistema de absorção conforme apresentado na Figura 2.1. As equações do movimento para este problema são:

$$M_p\left(\frac{\partial^2 x_p}{\partial t^2}\right) + C_p\left(\frac{\partial x_p}{\partial t}\right) + K_p x_p - C_a\left(\frac{\partial x_a}{\partial t} - \frac{\partial x_p}{\partial t}\right) - K_a(x_a - x_p) = F(t) \tag{2.1}$$

$$M_a\frac{\partial^2 x_a}{\partial t^2} + C_a\left(\frac{\partial x_a}{\partial t} - \frac{\partial x_p}{\partial t}\right) + K_a(x_a - x_p) = 0 \tag{2.2}$$

onde os subíndices “a” e “p” referem-se, respectivamente, à estrutura principal e ao sistema de absorção e,

M_p, M_a - Massa;

C_p, C_a - Coeficientes de amortecimento;

K_p, K_a - Rigidez;

x_p, x_a – Deslocamento;

F(t) – Força Aplicada em Função do Tempo.

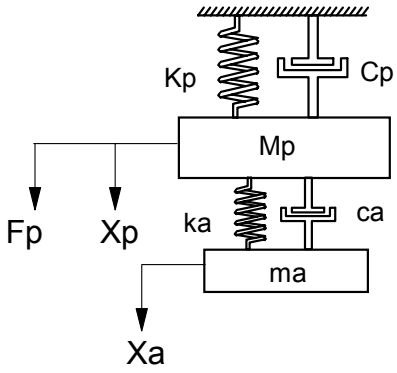

Figura 2.1 –Esquema de dois graus de liberdade do sistema de absorção em estudo

Expressando as eqs. (2.1) e (2.2) em forma matricial:

$$\underline{M}\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \underline{C}\frac{\partial x}{\partial t} + \underline{K}\underline{x} = \underline{F}(t) \tag{2.3}$$

onde,

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} M_p & 0 \\ 0 & M_a \end{bmatrix} \tag{2.4}$$

é a matriz de massa,

$$\underline{C} = \begin{bmatrix} C_p + C_a & -C_a \\ -C_a & C_a \end{bmatrix} \tag{2.5}$$

é a matriz amortecimento,

$$\underline{K} = \begin{bmatrix} K_p + K_a & -K_a \\ -K_a & K_a \end{bmatrix} \tag{2.6}$$

é a matriz de rigidez,

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} x_p \\ x_a \end{bmatrix} \tag{2.7}$$

é o vetor de deslocamentos,

$$\underline{F}(t) = \begin{bmatrix} F_p \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

é o vetor da força aplicada.

Inicialmente, o amortecimento do sistema será considerado através da aproximação de Rayleigh, isto é, uma combinação linear da massa e da rigidez :

$$\underline{C} = a\underline{M} + b\underline{K} \tag{2.9}$$

onde,

a e b - são constantes reais.

Considerando o amortecimento como foi expresso na eq. (2.9) os autovalores e autovetores do problema amortecido são aproximadamente iguais aos do problema não amortecido:

$$(\underline{K} - \underline{M}\omega_r^2)\underline{\varphi}_r = \underline{0} \tag{2.10}$$

onde,

$\underline{\varphi}_r$ - vetor que representa o r-ésimo modo de vibração;

ω_r- frequência natural associada ao r-ésimo modo de vibração.

Para uma força do tipo:

$$\underline{F}(t) = \underline{F}e^{i\omega t} \tag{2.11}$$

As soluções do sistema não-amortecido são dadas por:

$$\underline{x}(t) = A_r \, \underline{\varphi}_r \, e^{i\omega t} \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial \underline{x}(t)}{\partial t} = i\omega A_r \underline{\varphi}_r \, e^{i\omega t} \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial^2 \underline{x}(t)}{\partial t^2} = - \omega^2 A_r \underline{\varphi}_r \, e^{i\omega t} \tag{2.14}$$

onde,

ω – Frequência de excitação

A_r – Amplitude de resposta

Substituindo as eqs. (2.12), (2.13) e (2.14) em (2.2) e pré-multiplicando por $\underline{\varphi}_r^T$ e considerando a propriedade de ortonormalidade dos autovetores, obtêm-se um sistema de "n" equações desacopladas, e a "r-ésima" equação fica:

$$A_r(-\omega^2 m_r + i\omega c_r + k_r) = \underline{\varphi}_r^T F \tag{2.15}$$

onde,

$m_r = \underline{\varphi}_r^T \underline{M} \underline{\varphi}_r$ - Massa modal;

$k_r = \underline{\varphi}_r^T \underline{K} \underline{\varphi}_r$ - Rigidez modal;

$c_r = \underline{\varphi}_r^T \underline{C} \underline{\varphi}_r$ - Amortecimento modal;

$F_r = \underline{\varphi}_r^T \underline{F}$ - Força que atua no "r-ésimo" modo – força generalizada.

Explicitando a amplitude de resposta, A_r, tem-se:

$$A_r = \frac{\underline{\varphi}_r^T \underline{F}}{(k_r - \omega^2 m_r) + i\omega c_r} \tag{2.16}$$

Substituindo a eq (2.16) em (2.12), e somando as contribuições dos modos tem-se:

$$\underline{x}(t) = \sum_{r=1}^{N} \frac{\varphi_r \varphi_r^T \underline{F}}{(k_r - \omega^2 m_r) + i\omega c_r} e^{i\omega t} \tag{2.17}$$

ou, na forma compacta:

$$\underline{x}(t) = \underline{\alpha}(\omega)\underline{F}(t) \tag{2.18}$$

onde $\underline{\alpha}(\omega)$ é a função de resposta em frequência (F.R.F.).

2.3 Sistema de dois graus de liberdade com amortecimento não-proporcional

A hipótese de amortecimento como sendo combinação linear da massa e da rigidez não é válida para os casos de uso de sistemas de absorção, pois, usualmente, o sistema absorsor taxas de amortecimento muito altas em comparação com as taxas de amortecimento da estrutura principal, por isso será adotada a hipótese de amortecimento não proporcional.

Essa hipótese implica em um sistema acoplado e autovalores complexos. Substituindo as eqs (2.12), (2.13) e (2.14) na eq. (2.2), obtém-se:

$$(-\omega^2\underline{M} + i\omega\underline{C} + \underline{K})\,\underline{x}(t) = \underline{F}(t) \tag{2.19}$$

Sendo,

$$\underline{\beta}(\omega) = (-\omega^2\underline{M} + i\omega\underline{C} + \underline{K}) \tag{2.20}$$

A forma inversa de $\underline{\beta}(\omega)$ é dada por:

$$\underline{\beta}(\omega)^{-1} = \frac{(\underline{\beta}(\omega))^A}{\det(\underline{\beta}(\omega))} \tag{2.21}$$

Onde $(\underline{\beta}(\omega))^A$ representa a forma adjunta.

Portanto:

$$\underline{\beta}(\omega)^{-1} = \frac{(-1)^{j+k}\beta_{kj}(\omega)}{\det(\underline{\beta}(\omega))} \tag{2.22}$$

Fazendo $\det(\underline{\beta}(\omega)) = 0$, pode-se calcular as quatro raízes do sistema que, neste caso, serão complexas e conjugadas:

$$\lambda_1 = \xi_1\omega_1 + \omega_1(1 - \xi_1^2)^{\frac{1}{2}}\, i \tag{2.23}$$

$$\lambda_2 = \xi_2\omega_2 + \omega_2(1 - \xi_2^2)^{\frac{1}{2}}\, i \tag{2.24}$$

$$\overline{\lambda}_1 = \xi_1\omega_1 - \omega_1(1 - \xi_1^2)^{\frac{1}{2}}\, i \tag{2.25}$$

$$\overline{\lambda}_2 = \xi_2\omega_2 - \omega_2(1 - \xi_2^2)^{\frac{1}{2}}\, i \tag{2.26}$$

Onde,

ω_1, ω_2- frequências naturais do 1º e 2º modos;

ξ_1, ξ_2- taxas de amortecimento do 1º e 2º modos

i – número complexo = $\sqrt{-1}$.

De maneira semelhante pode-se obter a expressão que fornece os autovetores associados (MAGLUTA (1993)):

$$\varphi_j = (2\omega_r A_{jj} i)^{\frac{1}{2}} \tag{2.27}$$

Os modos de vibração são compostos por números complexos e ortonormalizados em relação à matriz de massa. Os modos reais representam um autovetor onde todos os pontos da estrutura passam por uma posição de equilíbrio no mesmo instante de tempo; nos modos complexos a forma modal “trafega” pela estrutura.

2.4 Sistema com muitos graus de liberdade

Agora, com o modelo para dois graus de liberdade já desenvolvido, o próximo passo é estender o mesmo para casos com vários graus de liberdade. A principal mudança a ser feita é no processo de cálculo das freqüências naturais e modos de vibração. Uma matriz de amortecimento não-proporcional implica em modos complexos, sendo que a não-proporcionalidade é introduzida pelo uso de sistemas de absorção de vibrações.

2.4.1 Cálculo da matriz de amortecimento da estrutura original

Para a montagem da matriz de amortecimento da estrutura principal, foi utilizada uma técnica que utiliza os dados experimentais disponíveis, já que a taxa de amortecimento da estrutura é um dado puramente experimental. Utilizando a matriz de amortecimento modificada (CLOUGH (1996)):

$$\underline{C} = \underline{M}\sum a_b(\underline{M}^{-1}\underline{K})^b \tag{2.28}$$

onde b representa o número de dados experimentais e a_b são constantes a determinar. Pré e pós-multiplicando a eq. (2.28) por $\underline{\varphi}_r^T$ e $\underline{\varphi}_r$, tem-se:

$$c_r = \underline{\varphi}_r^T\underline{C}\underline{\varphi}_r = 2\xi_r\omega_r m_r = \underline{\varphi}_r^T\underline{M}\sum_{b=0}^{n_e} a_b(\underline{M}^{-1}\underline{K})^b\underline{\varphi}_r \tag{2.29}$$

onde n_e representa o número de dados experimentais.

Como $\underline{K}\underline{\varphi}_r = \omega_r\underline{M}\underline{\varphi}_r$:

$$c_r = \sum_{b=0}^{M} a_b\underline{\varphi}_r^T\underline{M}\underline{\varphi}_r\omega_r^{2b} \tag{2.30}$$

Explicitando o ξ_r:

$$\xi_r = 0.5 \sum_{b=0}^{M} a_b \omega_r^{2b-1} \tag{2.31}$$

Na forma matricial:

$$\underline{\xi} = \underline{Q}\underline{a} \tag{2.32}$$

onde,

$\underline{\xi}$ - Vetor das taxas de amortecimento;

$\underline{Q}$ - Matriz com os termos $Q_{rb} = 0.5\omega_r^{2b-1}$;

$\underline{a}$ - Vetor dos coeficientes.

Com a forma inversa da eq (2.32) e de posse de alguns dados experimentais pode-se determinar os coeficientes $\underline{a}$ através de:

$$\underline{a} = \underline{Q}^{-1}\underline{\xi} \tag{2.33}$$

2.4.2 Determinação das frequências e modos de vibração para estruturas com amortecimento não-proporcional

Com a condição da não-proporcionalidade da matriz de amortecimento em relação às matrizes de massa e rigidez, deve-se considerá-la no cálculo das frequências naturais e modos de vibração. A eq. (2.10) adaptada para "n" graus de liberdade deverá incluir a matriz de amortecimento, mas, antes, faz-se necessário utilizar a seguinte mudança de variável:

$$\underline{U} = \begin{bmatrix} \underline{x} \\ \dfrac{\partial \underline{x}}{\partial t} \end{bmatrix}_{(2n\times 1)} \Rightarrow \dot{\underline{U}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \underline{x}}{\partial t} \\ \dfrac{\partial^2 \underline{x}}{\partial t^2} \end{bmatrix}_{(2n\times 1)} \tag{2.34}$$

A equação diferencial do movimento fica:

$$\begin{bmatrix} \underline{C} & \underline{M} \end{bmatrix}_{(n\times 2n)} \begin{bmatrix} \dot{\underline{x}} \\ \ddot{\underline{x}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{K} & \underline{0} \end{bmatrix}_{(n\times 2n)} \begin{bmatrix} \underline{x} \\ \dot{\underline{x}} \end{bmatrix} = \underline{0} \tag{2.35}$$

A eq. (2.35) possui "2n" incógnitas, logo impossível de serem determinadas. Para se contornar esse problema soma-se à mesma a seguinte identidade:

$$\begin{bmatrix} \underline{M} & \underline{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\underline{x}} \\ \ddot{\underline{x}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \underline{0} & -\underline{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{x} \\ \dot{\underline{x}} \end{bmatrix} = \underline{0} \tag{2.36}$$

Resultando:

$$\underline{A}\,\underline{U} + \underline{B}\,\dot{\underline{U}} = \underline{0} \tag{2.37}$$

sendo,

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} \underline{K} & \underline{0} \\ \underline{0} & -\underline{M} \end{bmatrix} \tag{2.38}$$

$$\underline{B} = \begin{bmatrix} \underline{C} & \underline{M} \\ \underline{M} & \underline{0} \end{bmatrix} \tag{2.39}$$

Assumindo como possíveis soluções do sistema:

$$\underline{U} = \varphi e^{\lambda t} \Rightarrow \dot{\underline{U}} = \lambda \varphi e^{\lambda t} \tag{2.40}$$

e substituindo (2.40) em (2.37), resulta o seguinte problema de auto-valor:

$$(\underline{A} + \lambda \underline{B})\varphi = \underline{0} \tag{2.41}$$

Lembrando-se que λ é número complexo e o vetor φ também é complexo. O objetivo agora é, dados $\underline{A}$ e $\underline{B}$, obter os autovalores e autovetores. Note que os

autovalores e autovetores podem ser complexos conjugados, porém as matrizes $\underline{A}$ e $\underline{B}$ são reais.

Métodos consagrados como a iteração por subespaço (BATHE (1996)), não são apropriados para problemas de autovalor generalizado cujas matrizes não sejam positivo definidas, como o problema descrito.

MAGLUTA (1993) adotou como solução deste problema a rotina QZ (MOLER e STEWART (1973)) e para a obtenção da calibração ideal dos sistemas de absorção um método de otimização. Desta forma, o problema de autovalor deveria ser resolvido centenas de vezes, demandando assim um elevado custo computacional. De modo geral, o projeto de sistemas de absorção necessita que apenas poucos modos sejam calculados. No entanto, a rotina QZ, apesar de bastante precisa, não permite essa flexibilidade, necessitando calcular todos os autovalores do problema. Para contornar essa dificuldade, a solução adotada na época foi a utilização de uma estratégia de sub-estruturação para reduzir a ordem das matrizes do problema. Porém, esta estratégia introduz pequenas imprecisões no cálculo dos autovetores que são bastante amplificadas na estimativa dos esforços internos.

Métodos baseados no subespaço de Krylov têm sido amplamente estudados principalmente a partir da década de oitenta. Desde então, aplicações bem sucedidas desses métodos em solução de problemas de autovalor e na solução de sistemas de equações lineares vêm sendo testadas. Para a solução do problema de autovalor apresentado na equação (2.41) foi escolhido o Método de Arnoldi (ARNOLDI (1951)). Esse método originou-se da generalização do método proposto por LANCZOS (1950) e sua derivação pode ser justificada pelo subespaço de Krylov. O próximo capítulo trará os detalhes matemáticos que do método.

Capítulo 3

3 Teoria Matemática

3.1 Introdução

O objetivo desse capítulo é apresentar a teoria matemática necessária para a solução do problema de autovalor pelo Método de Arnoldi.

Inicialmente o enfoque matemático será dado ao problema de autovalor padrão, sendo posteriormente estendido ao problema generalizado. O método desenvolvido por ARNOLDI (1951) é um método baseado no subespaço de Krylov, o qual será detalhado mais adiante.

3.2 O problema de autovalor e definições

Define-se como sendo autovalores as "n" raízes do polinômio característico representado pela equação :

$$p_A = \det(\underline{A} - \lambda \underline{I}) = \prod_{j=1}^{n} (\lambda - \lambda_j)^{dj} \qquad (3.1)$$

onde,

$\underline{A}$ - Matriz quadrada de ordem "n", da qual se deseja obter os autovalores.

$\underline{I}$ - Matriz identidade da mesma ordem de $\underline{A}$

λ - Autovalor

p_A - Polinômio característico de ordem "n", onde o expoente d_j representa a multiplicidade algébrica do autovalor λ_j.

$\underline{x}$ - Autovetor

As raízes de (3.1) tornam a seguinte igualdade verdadeira:

$$\underline{A}\underline{x} = \lambda\underline{x} \tag{3.2}$$

Na verdade $\underline{x}$ é chamado de autovetor à direita associado ao autovalor λ. Ainda tem-se[1]:

$$\underline{t}^H\underline{A} = \lambda\underline{t}^H \tag{3.3}$$

onde,

$\underline{t}$ - Autovetor à esquerda.

Quando o presente texto se referir a autovetor deve-se entender como sendo autovetor à direita.

Define-se ainda a eq. (3.2) como sendo problema de autovalor padrão diferenciando-se, dessa forma do problema de autovalor generalizado:

$$\underline{A}\underline{x} = \lambda\underline{B}\underline{x} \tag{3.4}$$

Onde,

$\underline{B}$ - Matriz quadrada de ordem igual à matriz $\underline{A}$.

O conjunto discreto formado pelas "n" raízes de (3.1) é chamado de espectro de $\underline{A}$:

$$\sigma(\underline{A}) = \{\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_n\} \tag{3.5}$$

onde,

$\sigma(\underline{A})$ - Espectro de $\underline{A}$.

[1] Considerando a possibilidade da obtenção de autovalores e autovetores complexos, deve-se generalizar o conceito de autovalor à esquerda adotando a operação de transposta-conjugada para englobar as grandezas vetoriais complexas.

3.3 Subespaços invariantes e transformações similares

Um autovetor é um subespaço invariante unidimensional em relação a $\underline{A}$. Um subespaço invariante é definido por:

$$\underline{x} \in \vec{S} \Rightarrow \underline{A}\underline{x} \in \vec{S}, \vec{S} \in C^n \tag{3.6}$$

onde,

$\vec{S}$ - Subespaço de ordem "n".

Seja $\underline{X}$ a matriz cujas colunas contêm os vetores que formam uma base que gera $\vec{S}$ e $\underline{X}$ satisfaz:

$$\underline{A}\underline{X} = \underline{X}\underline{G} \tag{3.7}$$

E define-se o problema de Autovalor de $\underline{G}$,

$$\underline{G}\underline{y} = \lambda\underline{y} \tag{3.8}$$

Caso $\underline{A}$ e $\underline{G}$ sejam da mesma ordem:

$$\underline{G} = \underline{X}^{-1}\underline{A}\underline{X} \tag{3.9}$$

Substituindo-se (3.9) em (3.8), e pré-multiplicando ambos os lados da equação por $\underline{X}$, tem-se:

$$\underline{A}\underline{X}\,\underline{y} = \lambda\underline{X}\,\underline{y} \tag{3.10}$$

Comparando com (3.2) conclui-se que $\underline{x} = \underline{X}\underline{y}$ e $\lambda(\underline{G}) \subseteq \lambda(\underline{A})$, se $\underline{A}$ e $\underline{G}$ forem da mesma ordem então $\lambda(\underline{A}) = \lambda(\underline{G})$.

A matriz $\underline{A}$ é dita como sendo similar à $\underline{G}$ sob a transformação $\underline{X}$.

Para a solução numérica de problemas de autovalor, existe uma transformação similar extremamente importante, trata-se da decomposição de Schur. Schur provou que toda matriz quadrada é unitariamente similar a uma matriz triangular superior $\underline{R}$:

Teorema 3.1 (Decomposição de Schur) (GOLUB , VAN LOAN (1997)) : "Seja $\underline{A} \in C^{nxn}$. Então existe uma matriz unitária Q e uma matriz triangular superior R tal que" :

$$\underline{A}\,\underline{Q} = \underline{Q}\,\underline{R} \tag{3.11}$$

onde,

Q - Matriz unitária, ou seja $Q^H Q = Q Q^H = I$

R - Matriz triangular superior, cujos elementos da diagonal principal são os autovalores de A .

Quando A é real e simétrica, seus autovalores são reais. Quando a matriz do problema de autovalor padrão, eq. (3.2), deixa de ser simétrica seus autovalores podem ser números complexos, sempre acompanhados dos seus respectivos conjugados. No que se refere ao problema de autovalor generalizado, eq. (3.4), a simetria das matizes A e B não é condição suficiente para a ocorrência exclusiva de autovalores reais, para que isto ocorra, é necessário que qualquer combinação linear de A e B seja positivo-definida.

Numericamente quando as matrizes são reais e possuem autovalores complexos, a decomposição de Schur não pode ser obtida tal como foi expressa no Teorema 3.1, pois R não convergirá para uma matriz real e triangular superior com os autovalores em sua diagonal principal, porém, pode-se escolher U de tal forma que a transformação similar ortogonal conduza A à matriz de Hessenberg superior. Uma matriz quadrada é dita matriz de Hessenberg superior se os seus elementos h_{ij} forem iguais a zero para todo $i \geq j+2$.

$$\underline{H} = \underline{U}^T \underline{A}\,\underline{U} \tag{3.12}$$

onde,

$\underline{U}$ – Matriz ortogonal $\in \Re^{nxn}$

$\underline{A}$ – Matriz $\in \Re^{nxn}$, não simétrica

$\underline{H}$ – Matriz real quadrada de ordem "n".

O uso da matriz de Hessenberg para facilitar a solução de um problema de autovalor baseia-se no seguinte lema (GOLUB, VAN LOAN (1996)):

Lema (3.1)- "Se $\underline{H} \in C^{nxn}$ e pode ser particionada como se segue :

$$\underline{H} = \begin{bmatrix} \underline{H}_{11} & \underline{H}_{12} \\ \underline{0} & \underline{H}_{22} \end{bmatrix} \tag{3.13}$$

Então, $\lambda(\underline{H}) = \lambda(\underline{H}_{11}) \cup \lambda(\underline{H}_{22})$ (3.14)

Baseado no lema (3.1), pode-se usar um método que faça com que os autovalores da matriz de Hessenberg sejam boas aproximações dos autovalores de $\underline{A}$.

3.4 Subespaço de Krylov

O subespaço de Krylov (WILKINSON (1965)) é o subespaço de ordem "k" definido por:

$$K_K(\underline{A}, \underline{v}_1) = \text{gerado por } \left\{\underline{v}_1, \underline{A}\underline{v}_1, \underline{A}^2\underline{v}_1, ..., \underline{A}^{k-1}\underline{v}_1\right\} \tag{3.15}$$

onde,

K_k – Subespaço de Krylov

$\underline{v}_1$ – Vetor de partida não-nulo.

O Subespaço de Krylov é o subespaço de todos os vetores pertencentes a $C^{n\times n}$ que podem ser escritos como:

$$\underline{w} = q\,(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{3.16}$$

onde q é um polinômio de grau menor que "k".

Métodos de projeção nesse subespaço foram estudados e desenvolvidos por STEWART (1973), dando origem a métodos iterativos de solução de sistemas de equações lineares e problemas de autovalor. No que se aplica a problemas de autovalor, o objetivo é obter as melhores aproximações possíveis dos autovetores a partir desse subespaço.

Um vetor $\underline{x} \in K_k$ é um vetor de Ritz com o correspondente valor de Ritz θ se a condição de Galerkin for satisfeita:

$$<\underline{w}, \underline{A}\underline{x} - \underline{x}\,\theta> = 0, \quad \text{para todo} \quad \underline{w} \in K_k(\underline{A}, \underline{v}_1) \tag{3.17}$$

Onde,

$< , >$ - É o símbolo de produto interno

O atendimento dessa condição resulta em aproximações dos autovalores e autovetores e traz consigo algumas conseqüências imediatas: seja $\underline{W}$ uma matriz cujas colunas formam uma base ortonormal de $K_k(\underline{A}, \underline{v}_1)$, então :

$$\underline{P} = \underline{W}\,\underline{W}^H \tag{3.18}$$

onde,

$\underline{P}$ – Projetor ortogonal em $K_k(\underline{A}, \underline{v}_1)$

Pode-se definir:

$$\hat{\underline{A}} = \underline{P}\,\underline{A} \tag{3.19}$$

e,

$$\underline{G} = \underline{W}^H \underline{A}\,\underline{W} \tag{3.20}$$

Lema (3.2) (LEHOUCQ et al. (1998)). $(\underline{x}, \theta)$ é um par de Ritz se e somente se $\underline{x} = \underline{W}\underline{y}$ com $\underline{G}\underline{y} = \underline{y}\,\theta$ e independe da escolha da base ortonormal $\underline{W}$.

O lema (3.2) é uma consequência direta da imposição da condição de Galerkin como se pode ver adiante:

$$\underline{G}\underline{y}=\underline{y}\theta \tag{3.21}$$

Substituindo (3.20) em (3.21), tem-se:

$$\underline{W}^{H}(\underline{A}\underline{W}\underline{y}-\underline{W}\underline{y}\theta)=0 \tag{3.22}$$

Como $\underline{x} = \underline{W}\underline{y}$, e comparando com a condição de Galerkin (eq. (3.17)), fica provado que o lema (3.2) é uma consequência direta da imposição da referida condição.

A indiferença quanto a escolha da base ortonormal $\underline{W}$ pode ser demonstrada da seguinte forma:

$\underline{V}$ é uma base ortonormal de $K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$ se e somente se :

$$\underline{V}=\underline{W}\underline{Q} \tag{3.23}$$

onde,

$\underline{Q}$ – Matriz unitária qualquer, de ordem k.

Utilizando a matriz $\underline{V}$, faz-se a seguinte mudança de base :

$$\underline{H}=\underline{V}^{H}\underline{A}\underline{V} \tag{3.24}$$

Usando (3.23) e (3.24) :

$$\underline{H}=\underline{Q}^{H}\underline{W}^{H}\underline{A}\underline{W}\underline{Q} \tag{3.25}$$

E, substituindo (3.20):

$$\underline{H}=\underline{Q}^{H}\underline{G}\underline{Q} \tag{3.26}$$

A eq (3.26) demonstra que $\underline{H}$ é unitariamente similar à $\underline{G}$ (vide eq. (3.9)), o uso da expressão é justificado pela matriz unitária $\underline{Q}$, isto é, $\underline{H}$ é similar a $\underline{G}$ sob a transformação unitária $\underline{Q}$. Como já foi explicado, matrizes semelhantes de mesma

ordem, possuem os mesmos autovalores o que resulta na conservação dos valores de Ritz, quanto aos vetores de Ritz :

$$\underline{x} = \underline{W}\underline{y} = \underline{V}\,\underline{\hat{y}} \tag{3.27}$$

onde,

$\underline{x}$ – vetor de Ritz

Sendo,

$$\underline{\hat{y}} = \underline{Q}^{H}\underline{y} \tag{3.28}$$

As propriedades do subespaço de Krylov podem ser melhor analisadas usando polinômios, partindo do tratamento polinomial feito por SAAD (1992). Com base em (3.16) e usando as transformações similares juntamente com as propriedades de invariância do subespaço de Krylov, chega-se ao seguinte lema, o qual será enunciado em quatro partes:

Lema (3.3.a) (LEHOUCQ et al. (1998)) – Se q é um polinômio de grau menor que k então:

$$q(\underline{A})\,\underline{v}_1 = q(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 = \underline{W}q(\underline{G})\underline{z}_1 \tag{3.29}$$

onde,

$$\underline{v}_1 = \underline{W}\underline{z}_1 \tag{3.30}$$

E se o polinômio q for de grau k então:

$$\underline{P}q(\underline{A})\underline{v}_1 = q(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 \tag{3.31}$$

Demonstração:

A prova dessa parte do lema será feita por indução, assumindo que:

$q(\underline{A})\underline{v}_1 = q(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1$ seja verdade, para q(t) = 1 é fácil concluir que realmente é verdadeira a expressão.

Adota-se o sub-índice *i* para designar a ordem do polinômio, portanto:

$$q_i(\underline{A})\underline{v}_1 = q_i(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.32}$$

Multiplicando ambos os lados por $\underline{A}$:

$$q_{i+1}(\underline{A})\underline{v}_1 = \underline{A}q_i(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.33}$$

Se $i+1 \leq k-1$, o vetor do lado esquerdo da equação pertence ao subespaço de Krylov. Multiplicando agora os dois lados por $\underline{P}\underline{A}$, chega-se a:

$$\underline{P}q_{i+1}(\underline{A})\underline{v}_1 = \underline{P}\underline{A}q_i(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.34}$$

Deve-se notar que $q_i(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \in K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$ e recorrendo a eq. (3.19):

$$q_{i+1}(\underline{A})\underline{v}_1 = q_{i+1}(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.35}$$

A eq. (3.35) prova a validade para $i+1 \leq k-1$, falta ainda provar a validade para $i+1=k$, para tanto basta multiplicar os dois lados da seguinte igualdade por $\underline{P}\underline{A}$:

$$q_{i-1}(\underline{A})\underline{v}_1 = q_{i-1}(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.36}$$

Resultando em:

$$\underline{P}q_i(\underline{A})\underline{v}_1 = q_i(\hat{\underline{A}})\underline{v}_1 \tag{3.37}$$

Lema (3.3.b) (SAAD (1992)) – Se $\hat{p}(\lambda)=\det(\underline{G}-\lambda\underline{I})$ é o polinômio característico de $\underline{G}$ então $\hat{p}(\hat{\underline{A}}) = 0$ (Teorema de Cayley-Hamilton (STEWART (1991)) e $\| \hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \| \leq \| q(\underline{A})\underline{v}_1 \|$, i.e., $\hat{p}$ minimiza a norma de qualquer polinômio mônico[2] de grau k.

A justificativa do lema (3.3.b) pode ser efetuada partindo do Teorema de Cayley-Hamilton. Tem-se que:

[2] Um polinômio de grau n é dito como sendo mônico quando o coeficiente do termo de ordem mais alta é igual a 1.

$$\hat{p}\,(\underline{\hat{A}}) = 0 \tag{3.38}$$

e portanto:

$$< \hat{p}\,(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 \,,\, \underline{w} > = 0,\ \forall\, w \in K_k(\underline{A},\underline{v}_1) \tag{3.39}$$

Pela proposição anterior (eq. (3.37)):

$$< \underline{P}\,\hat{p}\,(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 \,,\, \underline{w}) = 0,\ \forall\, w \in K_k(\underline{A},\underline{v}_1) \tag{3.40}$$

Como o projetor ortogonal $\underline{P}$ é auto-adjunto:

$$< \hat{p}\,(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 \,,\, \underline{P}\underline{w} > = 0,\ \forall\, w \in K_k(\underline{A},\underline{v}_1) \tag{3.41}$$

Como $\underline{w}$ é um vetor pertencente ao Subespaço de Krylov:

$$\underline{w} = \underline{A}^j\underline{v}_1 \tag{3.42}$$

A eq. (3.41) pode ser escrita assim:

$$< \hat{p}\,(\underline{\hat{A}})\underline{v}_1 \,,\, \underline{P}\underline{w} > = 0,\ j = 0,\ldots,\ k-1 \tag{3.43}$$

Escrevendo $\hat{p}\,(t) = t^k - s(t)$, onde $s(t)$ é de ordem k-1, obtem-se:

$$< \underline{A}^k - s(\underline{A})\underline{v}_1 \,,\, \underline{A}^j\underline{v}_1 > = 0\ ,\ j = 0,\ldots,\ k-1 \tag{3.44}$$

O produto escalar representado na eq. (3.44) representa a minimização da norma de $q(\underline{A})\underline{v}_1$, sendo $q(\underline{A})$ um polinômio mônico de ordem k.

Lema (3.3.c) (LEHOUCQ et al. (1998))- Se $\underline{y}$ é um vetor qualquer em C^k e atende a (3.27) então:

$$\underline{A}\underline{W}\underline{y} - \underline{W}\underline{G}\underline{y} = \gamma\hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \quad , \text{ para qualquer escalar } \gamma \ . \tag{3.45}$$

Lema (2.3.d) (LEHOUCQ (1998))- Se $(\underline{x}\ ,\theta)$ é um par de Ritz de $\underline{A}$ com respeito a $K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$ então :

$$\underline{A}\underline{x} - \underline{x}\theta = \gamma\,\hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \quad \text{, para qualquer escalar } \gamma. \tag{3.46}$$

A primeira parte do lema deriva da propriedade de invariância do subespaço de Krylov e da possibilidade anteriormente citada de se escrever qualquer vetor pertencente a esse subespaço a partir de um polinômio em função da matriz $\underline{A}$, nota-se que esse polinômio é simplesmente uma combinação linear dos vetores que formam o subespaço de Krylov. As proposições do lema (3.2.c) e (3.2.d) podem ser justificadas partindo da eq. (3.22) e conforme (1.28):

$$\underline{A}\underline{W}\underline{y} - \underline{W}\underline{y}\theta = \gamma\,\hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{3.47}$$

Conforme (2.13.a):

$$\underline{A}\underline{W}\underline{y} - \underline{W}\underline{G}\underline{y} = \gamma\,\hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{3.48}$$

Partindo de (1.37) , tenta-se estabelecer uma base ortonormal (3.23) e a partir dela, passo a passo, gerar os vetores dessa mesma base. Utilizando uma transformação padrão de Householder (GOLUB, VAN LOAN (1996)) para gerar uma matriz unitária $\underline{Q}$ de ordem “k” , tal que:

$$\underline{v}_1 = \underline{V}\underline{e}_1 \tag{3.49}$$

onde,

$$\underline{V} = \underline{W}\underline{Q} \tag{3.50}$$

,e,

$$\underline{H} = \underline{Q}^H\underline{G}\underline{Q} \tag{3.51}$$

De forma que $\underline{H}$ seja uma matriz de Hessenberg superior com elementos da subdiagonal não-negativos. As eqs. (1.36), (3.49), (3.51) e a base expressada em (3.50) leva a uma forma particular da decomposição de Krylov, a fatoração de Arnoldi:

$$\underline{A}\underline{V}_k = \underline{V}_k\underline{H}_k + \underline{f}\underline{e}^T \tag{3.52}$$

onde,

$$\underline{f} = \gamma\hat{p}(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{3.53}$$

Se todo $w \in K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$ e, portanto pode ser escrito tal como (1.17), $K_k(\underline{A},\underline{v}_1)$ é um subespaço invariante de $\underline{A}$ se o vetor de partida $\underline{v}_1$ pode ser escrito como combinação linear de um subespaço invariante de $\underline{A}$ .Uma forma de tornar o vetor resíduo $\underline{f}$ nulo é fazer com que $\underline{v}_1$ seja combinação linear dos autovetores de $\underline{A}$, nesse caso $\underline{V}$ é uma base ortonormal de um subespaço invariante de $\underline{A}$. Os valores de Ritz de $\underline{A}$ estão contidos no espectro de $\underline{A}$, e os correspondentes vetores de Ritz são aproximações para os autovetores de $\underline{A}$.

3.5 Método de Arnoldi

O método desenvolvido por Arnoldi (1951) é um método de projeção ortogonal no subespaço de Krylov. O método tem por objetivo reduzir uma matriz densa em uma matriz de Hessenberg de ordem menor do que a ordem original do problema, fazendo com que os autovalores e autovetores dessa matriz se aproximem dos valores e vetores de Ritz, que por sua vez são aproximações para os autovalores e autovetores da matriz de Hessenberg. Esse processo é feito em"k" passos de tal forma que $k \leq n$, o fato de k ser menor que n não é obstáculo para a obtenção de boas aproximações para os autovalores de matrizes esparsas.

Definição: Se $\underline{A} \in C^{nxn}$ então a relação :

$$\underline{A}\underline{V}_k = \underline{V}_k\underline{H}_k + \underline{f}_k\underline{e}_k^T \tag{3.54}$$

onde,

$\underline{V}_k$ – Matriz $\in C^{nxn}$ cujas colunas são vetores ortonormais, tal que $\underline{V}_k^H\underline{f} = 0$

$\underline{H}_k$ – Matriz de Hessenberg superior $\in C^{nxn}$

A eq. (3.54) é chamada de fatoração de Arnoldi em "k" passos, pois passo a passo vai se construindo os vetores da base ortonormal $\underline{V}_k$, os vetores que formam as colunas dessa matriz são conhecidos como vetores de Arnoldi. A mesma equação provem da projeção ortogonal imposta pela condição de Galerkin (eq. (1.17)), uma outra maneira de analisar sua origem é encará-la como sendo um truncamento da redução de $\underline{A}$ para a forma de Hessenberg, igualando as primeiras "k" colunas em ambos os lados da redução completa $\underline{A}\underline{V} = \underline{V}\underline{H}$.

Os pares de Ritz atendendo a condição de Galerkin exposta na eq. (1.18) são imediatamente obtidos dos autovalores e autovetores da matriz projetada $\underline{H}_k$:

$$\underline{H}_k\underline{y} = \underline{y}\theta \tag{3.55}$$

e,

$$\underline{x} = \underline{V}_k\underline{y} \tag{3.56}$$

De tal forma que seja satisfeita:

$$\| \underline{A}\underline{x} - \underline{x}\theta \| = \| (\underline{A}\underline{V}_k - \underline{V}_k\underline{H}_k)\underline{y} \| = | \beta_k \underline{e}_k^T \underline{y} | \tag{3.57}$$

onde,

$$\beta_k = \| \underline{f}_k \| \tag{3.58}$$

Sendo $(\theta,\underline{x})$ um par de Ritz, conclui-se que :

$$\theta = \underline{y}^H\underline{H}_k\underline{y} = (\underline{V}_k\underline{y})^H\underline{A}(\underline{V}_k\underline{y}) = \underline{x}^H\underline{A}\underline{x} \tag{3.59}$$

A eq.(1.47) é um quociente de Rayleigh (assumindo que $\| \underline{y} \| = 1$) e o resíduo do quociente de Rayleigh ($r(\underline{x}) = \underline{A}\underline{x} - \underline{x}\theta$) satisfaz a seguinte equação :

$$\| r(\underline{x}) \| = | \beta_k \underline{e}_k^T \underline{y} | \tag{3.60}$$

Como o vetor $\underline{f}$ pode ser caracterizado como o vetor resíduo da fatoração, é bastante razoável afirmar que em aritmética exata, um vetor $\underline{f} = 0$ implica que os autovalores da matriz de Hessenberg são iguais aos autovalores da matriz do problema e matriz $\underline{V}$ é uma base de um subespaço invariante de $\underline{A}$. Como o processo introduzirá erros, pode-se dizer que os autovalores de $\underline{H}$ são os autovalores de uma matriz bem próxima a matriz do problema. Essa perturbação pode ser vista quando se rearruma a eq. (3.54) :

$$(\underline{A} - \underline{f}_k \underline{v}_k^H) \underline{V}_k = \underline{V}_k \underline{H}_k \tag{3.61}$$

Lembrando-se que $\underline{v}_k = \underline{V}_k \underline{e}_k$ (3.62)

3.6 Critérios para a análise da acurácia dos autovalores

Nesta seção serão considerados critérios para a avaliação de quão próximos são os autovalores da matriz de Hessenberg, obtida após o processo de Arnoldi, da matriz original do problema. Estes critérios serão importantes quando se abordar os detalhes da implementação numérica do problema.

Partindo das eqs. (1.43) e (1.44) e tomando $\| \underline{y} \| = 1$ então:

$$\| \underline{A} \underline{V}_k \underline{y} - \underline{V}_k \underline{H}_k \underline{y} \| = \| \underline{f}_k \| \, | \underline{e}_k^T \underline{y} | \tag{3.63}$$

A eq. (3.63) deixa claro que o par de Ritz $(\underline{x},\theta)$ é uma boa aproximação do par autovalor/autovetor de $\underline{A}$ se a último coordenada do autovetor de $\underline{H}_k$ tende a zero. WILKINSON (1965) demonstrou que se uma matriz de Hessenberg é irredutível, o que implica que ela possui elementos diferentes de zero na sua subdiagonal, então:

$$| \underline{e}_k^T \underline{y} | \neq 0 \tag{3.64}$$

Porém pode-se fazer com que a quantidade mostrada na eq. (3.64) seja pequena se os elementos da matriz $\underline{H}$ forem suficientemente distantes de zero. No que tange às

matrizes hermitianas (simétrico no que se refere ao conjunto dos números reais), um $\| \underline{f}_k \|$ pequeno implica que os autovalores calculados são excelentes aproximações para os autovalores do problema; porém quando se trata de um problema de autovalor de matrizes não-hermitianas (não-simétricas) a simples análise da ordem de grandeza da norma do vetor residual $\underline{f}_k$ não é suficiente para avaliar a acurácia dos autovalores, é necessário também considerar aspectos relativos a sua defectividade. Uma matriz é dita defectiva se ela possui autovalores defectivos, por sua vez, um autovalor é dito defectivo se sua multiplicidade geométrica é menor que sua multiplicidade algébrica (WILKINSON (1965)).

Tomando a eq. (1.51) como ponto de partida, é fácil intuir que:

$$(\underline{A} + \underline{E})\underline{x} = \underline{x}\theta \tag{3.65}$$

onde,

$$\underline{E} = - (\underline{e}_k^T \underline{y})\underline{x}^H \tag{3.66}$$

Quando se faz referência a um problema hermitiano (simétrico) basta que $\| \underline{f}_k \|$ ou $| \underline{e}_k^T \underline{y} |$ seja pequeno para que a aproximação seja suficientemente acurada, mas, nos casos não-hermitianos e não simétricos, essa condição não basta. O teorema (2.2) justifica o porquê disso:

Teorema 3.2 (LEHOUCQ et al. (1998)) – Seja λ um autovalor único de $\underline{A}$ e seja θ um autovalor de $\underline{A} + \underline{E}$, ou seja θ é uma aproximação de λ. Denota-se $\underline{s}$ e $\underline{x}$ como sendo os autovetores de comprimento à esquerda e à direita respectivamente, associados a λ, então:

$$| \lambda - \theta | \leq \frac{\| \underline{E} \|}{\| \underline{y}^H \underline{x} \|} + O(\| \underline{E} \|^2) \tag{3.67}$$

No caso hermitiano (simétrico), $\underline{y} = \underline{x}$, logo $\| \underline{y}^H \underline{x} \| = 1$ e por isso θ é uma boa aproximação de λ. LEHOUCQ (1998), no guia de usuário do ARPACK, que também usa o método de Arnoldi para solução de problema de autovalor recomenda o uso do seguinte critério de convergência:

$$\| \underline{f}_k \| | \underline{e}_k^T \underline{y} | \leq tol | \theta | \tag{3.68}$$

onde *tol* indica a tolerância do algoritmo, sendo definida pelo usuário, caso nenhuma tolerância seja especificada recomenda-se usar $tol = \varepsilon_{mach}$, onde ε_{mach} é a precisão da máquina, que mede a precisão dos números em ponto flutuante do sistema. Ficará mais clara a escolha de um critério de convergência, no capítulo 4 o qual trará os detalhes da implementação numérica do Método de Arnoldi e do Método de Arnoldi com Reinício Implícito, o qual foi o método escolhido (os motivos também serão apresentados).

Capítulo 4

4 Implementação Numérica

4.1 Introdução

Após a abordagem matemática do problema, faz-se necessária agora, a abordagem dos aspectos computacionais do Método de Arnoldi correlacionando com os detalhes dos exemplos que serão apresentados no próximo capítulo.

Dentre os diversos pontos abordados neste capítulo, dois merecem especial atenção. O primeiro ponto é referente à implementação do Método de Arnoldi para a solução de problemas de autovalor generalizado. O segundo ponto está relacionado com a aproximação dos autovalores da matriz de Hessenberg reduzida em relação aos autovalores do problema físico. Para esta aproximação foi utilizada uma técnica que melhora a acurácia sem acarretar num aumento substancial na ordem do sistema reduzido.

4.2 Aspectos computacionais do Método de Arnoldi

O algoritmo do método de Arnoldi consiste num processo em "k" passos, no qual dada a matriz $\underline{A}$ e um vetor de partida $\underline{v}_1$, se constrói uma base (matriz $\underline{V}$) para o subespaço de Krylov de ordem "k" e projeta-se a matriz do problema nesse subespaço. A matriz projetada é uma matriz de Hessenberg superior.

A Figura 4.1 mostra em pseudolinguagem o algoritmo da Fatoração de Arnoldi em k-Passos:

$Entrada : (\underline{A}, \underline{v}_1)$

$\underline{v}_1 = \frac{\underline{v}_1}{\|\underline{v}_1\|}; \underline{w} = \underline{A}\underline{v}_1; \alpha = \underline{v}_1{}^H \underline{w};$

$\underline{f}_1 = \underline{w} - \alpha \underline{v}_1; \underline{V}_1 = (\underline{v}_1); \underline{H}_1 = (\alpha);$

Para $j = 1,2,...,k-1$

$(a.1)\beta_j = \|\underline{f}_j\|; \underline{v}_{j+1} = \frac{\underline{f}_j}{\beta_j};$

$(a.2)\underline{V}_{j+1} = (\underline{V}_j, \underline{v}_{j+1}); \underline{\hat{H}}_j = \begin{pmatrix} \underline{H}_j \\ \beta_j \underline{e}_j^T \end{pmatrix};$

$(a.3)\underline{w} = \underline{A}\underline{v}_{j+1};$

$(a.4)\underline{h} = \underline{V}_{j+1}^H \underline{w}; \underline{f}_{j+1} = \underline{w} - \underline{V}_{j+1}\underline{h};$

$(a.5)\underline{H}_{j+1} = (\underline{\hat{H}}_j, \underline{h});$

Fim do Para

Figura 4.1: Algoritmo da Fatoração de Arnoldi em k-Passos

O algoritmo da Figura 4.1 obtém após "k" passos a matriz de Hessenberg ($\underline{H}$), a qual é obtida a um custo de O(k·n) flops (operações em ponto flutuante). A acurácia do processo está diretamente relacionada com a escolha do vetor de partida $\underline{v}_1$. Se $\underline{v}_1$ for uma combinação linear dos "k" autovetores, então o vetor resíduo $\underline{f}_k$ (calculado no passo (a.4) do algoritmo) é nulo, isto significa que o subespaço de Krylov gerado é um subespaço invariante em relação a $\underline{A}$ e que $\underline{V}$ é uma base exata para este subespaço. Isto implica que os autovalores da matriz $\underline{H}_k$ estão contidos no espectro de $\underline{A}$.

Como se pode observar neste algoritmo, as matrizes $\underline{V}$ (base do subespaço) e $\underline{f}_m\underline{e}_m{}^H$ (matriz de resíduo) são montadas coluna a coluna, enquanto a matriz $\underline{H}$ vai aumentando a sua ordem a cada iteração. Desse processo resulta uma matriz $\underline{V}$ (ordem n × k), a matriz $\underline{f}_m\underline{e}_m{}^H$ (ordem n × k) e a matriz de Hessenberg (ordem k × k) a qual possui a seguinte forma:

$$\underline{H}_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & h_{15} \\ h_{12} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & h_{25} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & h_{34} & h_{35} \\ 0 & 0 & h_{43} & h_{44} & h_{45} \\ 0 & 0 & 0 & h_{54} & h_{55} \end{bmatrix} \tag{4.1}$$

O algoritmo requer freqüentemente o produto de uma matriz por um vetor, por isso foi usado, quando possível, rotinas que efetuem essas operações, aproveitando o máximo possível a estrutura esparsa da matriz, bem como sua simetria (quando o problema for simétrico).

Na prática qualquer informação preliminar sobre os autovetores é muito difícil de se obter, portanto o vetor de partida, de modo geral, é escolhido de forma aleatória. No entanto para algumas simulações realizadas pôde-se verificar que isto não é um grande empecilho para o processo. Isto vem a comprovar que o par de Ritz independe da escolha da base ortonormal utilizada $\underline{V}$ (vide Lema 2.2). A princípio a acurácia do processo pode ser melhorada com o aumento do número de passos "k". Porém à medida que o número de passos cresce, há perda da ortogonalidade da matriz $\underline{V}_k$. Essa perda de ortogonalidade é devida a erros inseridos por arredondamento. Outro aspecto preponderante é que fica proibitivo um grande número de passos, pois como a ordem da matriz de Hessenberg superior obtida no processo é igual ao número de iterações, implica que serão necessárias $\mathbf{O(k^3)}$ operações para a obtenção dos autovalores da referida matriz. Será exposto no próximo item o procedimento para atingir uma boa aproximação dos autovalores, evitando um excessivo incremento no número de passos.

4.3 Método de Arnoldi com Reinício Implícito

No item anterior foram feitas considerações sobre a quantidade de passos necessários para que se consiga boas aproximações para os autovalores.

Uma alternativa para os problemas identificados anteriormente foi proposta por SAAD (1984) baseado em filtros polinomiais de aceleração de convergência desenvolvidos por MANTEUFELL (1978) aplicados a sistemas lineares. SAAD propôs uma modificação no Método de Arnoldi transformando-o num processo iterativo de maneira que o vetor de partida $\underline{v}_1$ fosse pré-condicionado. O pré-condicionador tratava-se de um polinômio cujas raízes são alguns autovalores da matriz de Hessenberg computada na iteração anterior. O polinômio funciona como filtro "amortecendo" o espectro indesejado e melhorando a convergência para o espectro desejado.

SORENSEN (1992) desenvolveu uma técnica mais eficiente e numericamente mais estável. Esta técnica combina o método da Fatoração QR com Deslocamento Implícito (para mais detalhes ver WATKINS e ELSNER (1991)) e a fatoração de Arnoldi. Esse esquema de aceleração consiste em usar "p" autovalores da matriz de Hessenberg obtida após "m" passos do método de Arnoldi, onde m pode ser definido como $k + p$. Neste processo os "p" autovalores são utilizados como "deslocamento" para uma Fatoração QR com Deslocamento Implícito sobre a matriz de Hessenberg $\underline{H}$. Esse método ficou conhecido como Método de Arnoldi com Reinício Implícito, IRAM para simplificar (obedecendo as iniciais do método na língua inglesa, tal como foi batizado pelos seus idealizadores).

A Figura 4.2 mostra em pseudolinguagem o algoritmo do IRAM, deve-se destacar que a rotina ARPACK disponibiliza um algoritmo semelhante a este:

Entrada $\left(\underline{A},\underline{V}_m,\underline{H}_m,\underline{f}_m\right)$ Obtidos após m passos do algoritmo da figura 1

Para $l = 1,2,...,$ *até* convergência

(b.1) Calcular o espectro de $\underline{H}_m$ e selecionar p deslocamentos $\mu_1,\mu_2,...,\mu_p$

(b.2)$\underline{q}^H = \underline{e}_m^T$;

(b.3) Para j = 1,2,...,p

(b.4)$Fatorar\left[\underline{Q},\underline{R}\right] = qr(\underline{H}_m - \mu_j)$;

(b.5)$\underline{H}_m = \underline{Q}^H \underline{H}_m \underline{Q}; \underline{V}_m = \underline{V}_m \underline{Q}$;

(b.6)$\underline{q} = \underline{q}^H \underline{Q}$;

Fim de para

(b.7)$\underline{f}_k = \underline{v}_{k+1}\beta_k + \underline{f}_m \sigma_k$;

(b.8)$\underline{V}_k = \underline{V}_m(1:n,1:k); \underline{H}_k = \underline{H}_m(1:k,1:k)$;

(b.9) Recomeçar uma nova Decomposição com o Método de Arnoldi partindo do k-ésimo passo, aplicando mais "p" passos até atingir uma nova "m-step Arnoldi Factorization"

Teste de Convergência

Fim de Para

Figura 4.2 – Algoritmo do Método de Arnoldi com Reinício Implícito

A nova matriz de Hessenberg é usada para iniciar a próxima fatoração de Arnoldi em "p" passos adicionais partindo do k-ésimo passo, de tal forma que os elementos da subdiagonal de $\underline{H}$ tendam a zero. O número de deslocamentos a serem dados na matriz $\underline{H}$ é igual ao número de autovalores desejados, e os valores adotados para os deslocamentos dependerão da porção do espectro que se deseja calcular. Conforme pode ser visto na Figura 4.2, no início do algoritmo o passo (b.9) faz uso do algoritmo mostrado na Figura 4.1. Deve-se destacar que para o passo (b.9) o algoritmo do Método de Arnoldi é iniciado a partir do "k-ésimo" passo, isto é, com as matrizes $\underline{V}_k$,$\underline{H}_k$, e o vetor $\underline{f}_k$. Deve-se destacar que não é necessário recalcular os primeiros "k" passos a cada iteração, basta tomar uma submatriz de ordem "k" da matriz de Hessenberg, o mesmo ocorrendo com a matriz $\underline{V}_k$, bastando tomar as primeiras "k" colunas. Isto pode ser feito porque a matriz $\underline{H}$ no processo de Arnoldi

tem sua ordem acrescida a cada passo e é adicionada a matriz $\underline{V}$ uma nova coluna como já foi descrito no item anterior. Por exemplo, dado um problema de autovalor do qual se desejam obter os "p" autovalores de menor magnitude, deve-se utilizar "p" autovalores de maior magnitude da matriz de Hessenberg.

Os deslocamentos impostos à matriz de Hessenberg para realizar a decomposição QR podem ser complexos, conduzindo assim à manipulação de matrizes complexas, as quais demandariam um custo computacional mais elevado. Com o intuito de se contornar este problema foi utilizado o esquema de Deslocamento Duplo desenvolvido por FRANCIS (1961). Nesse procedimento são aplicados dois deslocamentos, um dos deslocamentos é o autovalor da matriz de Hessenberg e o outro é o seu conjugado.

A utilização da decomposição QR para a atualização do m-ésimo passo do Método de Arnoldi pode ser justificada como mostrado a seguir.

Como já foi dito anteriormente qualquer vetor pertencente ao subespaço de Krylov pode ser escrito como um produto de um polinômio em função da matriz $\underline{A}$ pelo vetor de partida $\underline{v}_1$:

$$\underline{v}_+ = q(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{4.2}$$

onde,

$\underline{v}_+$ - Novo vetor de partida.

Pode-se reescrever o problema de autovalor da seguinte forma:

$$q(\underline{A})\underline{x} = q(\lambda)\underline{x} \tag{4.3}$$

A escolha ideal para o vetor de partida $\underline{v}_1$ é uma combinação linear dos autovetores:

$$\underline{v}_1 = a_1\underline{x}_1 + ... + a_n\underline{x}_n \tag{4.4}$$

onde,

$\underline{x}_i$ – é o autovetor associado ao autovalor λ_i.

Recorrendo à eq. (4.3), o novo vetor $\underline{v}_+$ adquire a seguinte expressão:

$$\underline{v}_+ = a_1 q(\lambda_1)\underline{x}_1 + ... + a_n q(\lambda_n)\underline{x}_n \tag{4.5}$$

Pode-se verificar a partir da eq. (4.5) que quanto maior for o número de termos que compõem o vetor $\underline{v}_+$, melhor é a precisão do espectro calculado a partir do subespaço de Krylov. Isto implica que mesmo que o número de autovalores desejados do problema seja pequeno, torna-se necessário expandir a ordem da base a fim de garantir uma melhor precisão destes.

O IRAM contém uma estratégia que equivale a uma atualização do vetor de partida a fim de melhorar as aproximações do espectro calculado. Esta estratégia é uma Fatoração QR com Deslocamento Duplo Implícito aplicada na matriz de Hessenberg, indicada no passo (b.4) do algoritmo mostrado no algoritmo da Figura 4.2. O polinômio que será usado no vetor de partida funciona como um filtro "amortecendo" componentes indesejados no espectro. A equação do novo vetor de partida é :

$$\underline{v}_+ = \psi(\underline{A})\underline{v}_1 \tag{4.6}$$

onde,

$$\psi(\lambda) = \prod_{1}^{p}(\lambda - \mu_j) \tag{4.7}$$

sendo,

μ_j – São os deslocamentos escolhidos de acordo com o espectro desejado.

Há três importantes propriedades relacionadas à matriz ortogonal $\underline{Q}$, matriz esta obtida na fatoração QR:

A matriz de Hessenberg é atualizada através da seguinte equação: $\underline{H}_{m+} = \underline{Q}^T \underline{H}_m \underline{Q}$

A matriz ortogonal $\underline{Q}$ também é Hessenberg superior.

A primeira coluna de $\underline{Q}$ atende a seguinte equação:

$$\underline{Q}\underline{e}_1 = \alpha(H_m - \mu_p \underline{I})(\underline{H}_m - \mu_{p-1} \underline{I})...(\underline{H}_m - \mu_1 \underline{I})\underline{e}_1 \quad (4.8)$$

onde,

α – é um escalar qualquer.

As duas primeiras propriedades são justificadas pela essência da própria fatoração QR (para mais detalhes ver FRANCIS (1961)). A prova para a terceira propriedade é feita assumindo que para p = 2 tem-se por definição que:

$$\underline{Q} = \underline{Q}_1 \underline{Q}_2 \quad (4.9)$$

$$\underline{R} = \underline{R}_2 \underline{R}_1 \quad (4.10)$$

onde,

$\underline{Q}_i$ – Matriz ortogonal obtida na Fatoração QR com Deslocamento Duplo Implícito, onde o índice i refere-se ao shift usado.

$\underline{R}_i$ – Matriz triangular superior obtida no mesmo processo já mencionado.

$\underline{Q}\underline{R}_2\underline{R}_1 = \underline{Q}_1(\underline{Q}_2\underline{R}_2)\underline{R}_1 = \underline{Q}_1(\underline{H}^{(2)} - \mu_2 \underline{I})\underline{R}_1$ onde,

$\underline{H}^{(2)} = \underline{Q}^T_{(1)} \underline{H}^{(1)} \underline{Q}_{(1)}$ e assim em diante.

O índice indica a iteração a qual é referente ao “shift”.

E dessa forma:

$$\underline{Q}\underline{R}_1\underline{R}_2 = \underline{Q}_1(\underline{Q}_1^T \underline{H}^{(1)} \underline{Q}_1 - \mu_2\underline{I}) \underline{R}_1 = (\underline{H}^{(1)} - \mu_2\underline{I})\underline{Q}_1\underline{R}_1$$

$$= (\underline{H}^{(1)} - \mu_2\underline{I})(\underline{H}^{(1)} - \mu_1\underline{I})$$

Como $\underline{R}_2\underline{R}_1$ é triangular superior, isto é, o produto de duas matrizes triangulares superiores é uma matriz triangular superior[3], e multiplicando os dois lados da eq. (4.8) por $\underline{e}_1$ obtém-se a primeira coluna de $\underline{V}$ multiplicada pelo escalar α, onde esse escalar representa o elemento r_{11} do produto $\underline{R}_2\underline{R}_1$.

Agora será feita a analogia do algoritmo da Fatoração QR com Deslocamento Duplo Implícito ao método de Arnoldi, primeiro faz-se necessárias fazer a seguinte definição:

$$(\underline{H}_m - \mu\underline{I}) = \underline{Q}\underline{R} \tag{4.11}$$

e, por definição:

$$\underline{H}_+ = \underline{Q}^T\underline{H}_m\underline{Q} \tag{4.12}$$

$$\underline{V}_+ = \underline{V}_m\underline{Q} \tag{4.13}$$

logo,

$$\underline{V}_m = \underline{V}_+\underline{Q}^T \tag{4.14}$$

Sendo a Fatoração de Arnoldi em "m"-passos definida por:

$$\underline{A}\underline{V}_m = \underline{V}_m\underline{H}_m + \underline{f}_m\underline{e}_m^H \tag{4.15}$$

[3] A fatoração QR decompõe uma matriz qualquer, obtendo duas matrizes uma ortogonal, outra triangular superior.

Adicionado aos dois lados da eq. o termo -$\mu\underline{I}$:

$\underline{A}\underline{V}_m - \mu\underline{I} = \underline{V}_m\underline{H}_m - \mu\underline{I} + \underline{f}_m\underline{e}_m^H$ e reorganizando de tal modo que:

$$(\underline{A} - \mu\underline{I})\underline{V}_m = \underline{V}_m(\underline{H}_m - \mu\underline{I}) + \underline{f}_m\underline{e}_m^H \quad (4.16)$$

Fazendo uso da eq. (4.11):

$$(\underline{A} - \mu\underline{I})\underline{V}_m - \underline{V}_m(\underline{Q}\underline{R}) = \underline{f}_m\underline{e}_m^H \quad (4.17)$$

Multiplicando os dois lados da eq. (4.17) por $\underline{Q}$:

$$\underline{A}\underline{V}_m\underline{Q} - \underline{V}_m\underline{Q}(\underline{R}\underline{Q} + \mu\underline{I}) = \underline{f}_m\underline{e}_m^H\underline{Q} \quad (4.18)$$

É fácil mostrar que $\underline{H}_+ = (\underline{R}\underline{Q} - \mu\underline{I})$ e recorrendo à eq. (4.13):

$$\underline{A}\underline{V}_+ = \underline{V}_+\underline{H}_+ + \underline{f}_m\underline{e}_m^H\underline{Q} \quad (4.19)$$

Analisando a matriz $\underline{f}_m\underline{e}_m^H\underline{Q}$, conclui-se que pelo fato de $\underline{Q}$ ser Hessenberg superior a matriz resultante é:

$$\underline{f}_+ = \kappa\underline{f}_m\underline{e}_m^H \quad (4.20)$$

onde,

κ – é o elemento q_{11} da matriz $\underline{Q}$.

Desse modo a eq. (4.19) apresenta-se:

$$\underline{A}\underline{V}_+ = \underline{V}_+\underline{H}_+ + \underline{f}_+\underline{e}_m^H \quad (4.21)$$

A eq. (4.21) representa a nova Fatoração de Arnoldi em k-Passos. O uso da Fatoração QR com Deslocamentos Implícitos consegue obter as informações do problema de autovalor extraída do subespaço de Krylov de ordem "m" e é a partir dela que serão aplicados mais "p" passos para se obter a nova Fatoração de Arnoldi em "m"-passos. Um dos aspectos interessantes dessa estratégia é que após se aplicar a

Fatoração QR com Deslocamentos Implícitos a matriz de Hessenberg tem o seguinte aspecto (exemplo para m = 5):

$$\underline{H}_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & h_{15} \\ & h_{22} & h_{23} & h_{24} & h_{25} \\ & h_{32} & h_{33} & h_{34} & h_{35} \\ & & & h_{44} & h_{45} \\ & & & h_{54} & h_{55} \end{bmatrix} \tag{4.22}$$

onde só os elementos não nulos estão representados. Comparando com a matriz de Hessenberg obtida no Método de Arnoldi, (vide eq. (4.1)) pode-se observar que essa nova matriz é mais próxima a uma matriz triangular superior. As aproximações para os autovalores estão contidas em submatrizes de ordem dois ou ordem um ao longo da diagonal principal.

A estratégia de uso dos autovalores da matriz de Hessenberg obtida preliminarmente como deslocamentos para "amortecer" os autovalores indesejados e melhorar a precisão do cálculo do espectro desejado é repetida até que se obtenha a convergência dos autovalores calculados como mostrado na Figura 4.2. Como critério de convergência usou-se a eq. (3.56).

Com o método todo desenvolvido é necessário estendê-lo para o problema generalizado. Uma vantagem do Método de Arnoldi é que o processo para a solução do problema padrão pode ser usado para o problema generalizado, bastando apenas algumas modificações no tratamento do problema, sem necessitar a modificação no núcleo do processo.

4.4 O problema de autovalor generalizado

Na Engenharia, Física e Matemática aplicada, o problema de autovalor se apresenta na sua forma generalizada, como, por exemplo, são as eqs. (3.10) e (3.41). Toda a abordagem matemática e numérica do problema foi dada ao problema padrão mostrado na eq (2.2). Chegou o momento de apresentar as soluções numéricas que fazem com que o método para o problema padrão possa ser usado para o problema generalizado.

Ao deparar-se com a eq. (2.4) ($\underline{A}\underline{x} = \lambda\underline{B}\underline{x}$) é quase que intuitivo a idéia de se pré-multiplicar os dois lados pela inversa da matriz $\underline{B}$, resultando dessa forma um problema padrão:

$$\underline{C}\underline{x} = \lambda\underline{x} \tag{4.23}$$

onde,

$$\underline{C} = \underline{B}^{-1}\underline{A} \tag{4.24}$$

O que do ponto de vista da álgebra linear é coerente, numericamente pode trazer uma série de incômodos, pois o processo de inversão de uma matriz é instável principalmente se as matrizes forem mal condicionadas, que é o caso dos problemas aqui analisados. Há duas alternativas para se evitar o uso da eq. (4.24) no processo de cálculo dos autovalores. Uma alternativa para esse problema é obter a forma padrão implicitamente, e quando for necessário o produto da matriz $\underline{C}$ pelo vetor de iteração $\underline{v}$, o produto deve ser realizado em dois passos:

1. Produto Matriz-vetor: $\underline{z} = \underline{A}\underline{v}$;

2. Resolver o sistema em função de $\underline{w}$:

$$\underline{B}\underline{w} = \underline{z} \tag{4.25}$$

Tratando especificamente do problema de autovalor generalizado cujas matrizes foram expressas nas eqs. (2.38) e (2.39), foi constatado que o uso de métodos diretos tais como eliminação Gaussiana e fatoração LU para solução do sistema de equações mostrado na eq. (4.25) é inadequado. A inadequação é justificada analisando o grau de condicionamento do sistema, através da rotina do conjunto de álgebra linear de domínio público, o LAPACK (Linear Algebra Package, ANDERSON et al. (1995)). O grau de condicionamento do sistema é dado pela seguinte equação:

$$\nu = \| \underline{B} \| \cdot \| \underline{B}^{-1} \| \tag{4.26}$$

onde,

ν – Número que mede o condicionamento de uma matriz.

O grau de condicionamento mede o quanto uma matriz é próxima à singularidade, logo ν tem que ser um número de valor absoluto modesto, é claro que esse conceito é bastante subjetivo, mas serve de parâmetro para avaliar o comportamento da matriz.

Com a constatação da impossibilidade do uso de um método direto, COUTINHO (2002b) sugeriu que fosse adotada uma estratégia que aproveitasse o particionamento da matriz $\underline{B}$ (ver eq. (2.39)) recorrendo-se diretamente às matrizes de massa e amortecimento da estrutura. Dessa forma a eq. (4.25) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \underline{C} & \underline{M} \\ \underline{M} & \underline{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{w}_1 \\ \underline{w}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{z}_1 \\ \underline{z}_2 \end{bmatrix} \tag{4.27}$$

ou então:

$$\begin{cases} \underline{C}\underline{w}_1 + \underline{M}\underline{w}_2 = \underline{z}_1 \ (\text{i}) \\ \underline{M}\underline{w}_1 = \underline{z}_2 \ (\text{ii}) \end{cases} \tag{4.28}$$

Após reescrever as eqs. , resolve-se o sistema de equações (ii) em função de $\underline{w}_1$ e em seguida substituí-lo em (i) obtendo-se dessa forma $\underline{w}_2$. Testes realizados com essa estratégia mostraram que utilizando o algoritmo do Método de Arnoldi com Reinício Implícito não se conseguiu a convergência para os autovalores da matriz de Hessenberg para os autovalores do problema de autovalor generalizado. A opção adotada passou a ser um método iterativo.

SAAD (1981) mostrou que o Subespaço de Krylov pode ser usado na solução de sistemas lineares. Um método iterativo usando o método de Arnoldi foi implementado (JIA (2000)) utilizando o mesmo algoritmo apresentado na Figura 4.1, fazendo apenas algumas modificações. Gera-se um vetor $\underline{w}_o$ randomicamente (caso não seja a primeira iteração, pode-se usar o vetor $\underline{w}$ da iteração anterior) e calcula-se o resíduo inicial $\underline{r}_o = \underline{z} - \underline{B}w_o$, esse vetor resíduo será usado para gerar o Subespaço de Krylov utilizado no algoritmo:

Entrada: $(B;r_o,tol)$

$v_1 = \dfrac{r_o}{\| r_o \|}$;

Para j = 1,2,...,até convergência

$u = Bv_j$;

Para i = 1,2,...,j

$h_{i,j} = v_i^H u$; $u = u - h_{i,j}v_i$

$h_{j+1,j} = \| u \|$; $v_{j+1} = \dfrac{u}{h_{j+1,j}}$;

Fim de Para

Resolver o sistema:

$H_j y_j = \beta e_i$, onde $\beta = \| r_o \|$

$t_j = V_j y_j$; $w_j = w_o + t_j$; onde $V_j = (v_1,v_2,...,v_j)$

Calcular a norma do vetor r_j:

$\| r_j \| = h_{j+1,j} | (e_j)^T y_j |$

Testar a convergência: Se $\| r_j \| \leq tol$ então fim, se não continue

Fim de Para

Figura 4.3 – Algoritmo de solução de sistema linear

Esse algoritmo mostrado na Figura 4.3 requer a solução de um sistema de

equações representado por:

$$\underline{H}_j \underline{y}_j = \beta \underline{e}_1 \tag{4.29}$$

A solução desse sistema pode ser obtida de uma maneira mais "barata" em termos computacionais (JIA (2000)), após uma primeira inversão da matriz através da fatoração LU (FLANERRY et al (1995)). Pode-se obter a inversa da matriz de Hessenberg para o próximo passo usando a seguinte equação:

$$\underline{H}_{j+1}^{-1} = \begin{pmatrix} H_j^{-1} + \dfrac{H_j^{-1} c_j d_j^T H_j^{-1}}{u_{j+1,j+1}} & -\dfrac{H_j^{-1} c_j}{u_{j+1,j+1}} \\ -\dfrac{d_j^T H_j^{-1}}{u_{j+1,j+1}} & \dfrac{1}{u_{j+1,j+1}} \end{pmatrix} \tag{4.30}$$

onde,

$\underline{H}_{j+1}$ – Matriz de Hessenberg para o passo "j+1"

$$\underline{c}_j = (h_{1,j+1}, h_{2,j+1}, ..., h_{j,j+1})^T \tag{4.31}$$

$$\underline{d}_j = h_{j+1,j} \underline{e}_j \tag{4.32}$$

$$u_{j+1,j+1} = h_{j+1,j+1} - \underline{d}_j^T \underline{H}_j^{-1} \underline{c}_j \tag{4.33}$$

Esse processo é computacionalmente mais "barato" pois evita, até que se obtenha a convergência, a necessidade da solução de um sistema de equações de ordem igual ao número de passos, bastando apenas um produto matriz-vetor.

4.5 Transformação Espectral

A estratégia aqui apresentada apesar de resolver problemas de mal condicionamento na eq. (4.25), não é suficiente para garantir que os autovalores calculados sejam uma boa aproximação, pois ela ignora a influência do mal condicionamento no cálculo dos autovalores. Um parâmetro de condicionamento alto implica que os autovalores e os subespaços invariantes são sensíveis a perturbações introduzidas por erro de aproximações da aritmética de precisão finita. A separação dos autovalores e o ângulo entre os subespaços invariantes também são fatores que influenciam na precisão do espectro calculado pelo método de Arnoldi.

No trabalho de LEHOUCQ (1998) há um método que melhora a precisão no espectro que se deseja obter. Esse método consiste em se realizar uma transformação no espectro a ser calculado. A transformação dar-se-á pela introdução de um deslocamento, de modo que se obtenha melhores taxas de convergência durante o Método de Arnoldi com Reinício Implícito. A essa transformação foi dado o nome de transformação espectral. A transformação do problema se dará da seguinte forma:

$$\underline{A}\underline{x} = \lambda \underline{B}\underline{x}$$

Nos dois lados da equação do problema original será introduzido mais um termo e mantendo a igualdade:

$$\underline{A}\underline{x} - \mu\underline{B}\underline{x} = \lambda\underline{B}\underline{x} - \mu\underline{B}\underline{x} \tag{4.34}$$

Reorganizando a (4.34) obtém-se:

$$(\underline{A} - \mu\underline{B})^{-1} \underline{B}\underline{x} = \tau\underline{x} \tag{4.35}$$

onde,

$$\tau = \frac{1}{\lambda - \mu} \tag{4.36}$$

Os novos autovalores a serem calculado são τ a equação que se deve recorrer para a obtenção dos autovalores do problema original é:

$$\lambda = \mu + \frac{1}{\tau} \tag{4.37}$$

É importante destacar que ao aplicar o IRAM com a transformação espectral, deve-se estar atento ao seguinte detalhe: caso se deseja calcular o menor espectro do problema original, os deslocamentos deverão filtrar o menor espectro do problema modificado, pois eles são inversamente proporcionais ao problema original.

Novamente encontra-se a necessidade da inversão para se obter a forma padrão do problema com a transformação espectral, o procedimento para a obtenção da inversa implicitamente será o mesmo descrito anteriormente, só que agora há a necessidade da solução do seguinte sistema:

1. Produto Matriz-vetor: $\underline{z} = \underline{\underline{B}}\underline{v}$;

2. Resolver o sistema em função de $\underline{w}$:

$$(\underline{\underline{A}} - \mu\underline{\underline{B}})\underline{w} = \underline{z} \tag{4.38}$$

4.6 Cálculo dos Autovetores

Após a obtenção dos autovalores, é necessário obter agora os autovetores. Para isso foi implementada uma rotina que para um dado autovalor da matriz de Hessenberg, é obtido seu respectivo autovetor através de iteração inversa. Para tal foi utilizada a rotina do LAPACK *DHSEIN* (ANDERSON et al. (1995)).

Lembrando-se que na verdade é calculado o autovetor da matriz de Hessenberg, (eq. (3.55)), para obter o autovetor do problema original é necessário fazer uso da

seguinte equação:

$$\underline{x} = \underline{V}_m \underline{y} \tag{4.39}$$

onde,

$\underline{x}$ – Autovetor do problema original;

$\underline{y}$ – Autovetor relacionado aos autovalores da matriz de Hessenberg.

Capítulo 5

5 Aplicações

Nesse capítulo serão apresentadas as aplicações da metodologia desenvolvida para a resolução de problemas de autovalor. Para a validação do método foram escolhidos dois exemplos: um problema padrão e outro generalizado. Para este último foram analisadas três estruturas discretizadas através do Método dos Elementos Finitos.

5.1 Metodologia para Avaliação do Método.

Antes de qualquer avaliação das rotinas implementadas e comparação com outros métodos, serão descritos os parâmetros que serão usados para realizar as avaliações e comparações.

A acurácia dos autovalores e autovetores será avaliada através das seguintes equações:

$$r_j = \| \underline{\underline{A}}\underline{x} - \lambda_j \underline{x} \| \tag{5.1}$$

onde,

r_j – Norma do vetor resíduo referente ao "j-ésimo" autovalor e respectivo autovetor.

λ_j e $\underline{x}_j$- "j-ésimo" autovalor e autovetor respectivamente.

A eq. **(5.1**) refere-se obviamente a um problema padrão, para o problema generalizado o vetor resíduo é expresso pela seguinte equação:

$$r_j = \| \underline{\underline{A}}\underline{x} - \lambda_j \underline{\underline{B}}\underline{x} \| \tag{5.2}$$

O erro do processo é estimado calculando a norma do vetor $\underline{r}$, cujos elementos são as normas do vetor resíduo r_j:

$$\text{Erro} = \| \underline{r} \| \tag{5.3}$$

Deve-se lembrar que uma norma do vetor resíduo nula implica que os autovalores e os respectivos autovetores são exatos.

Quando forem realizadas análises de exemplos que envolvam estruturas discretizadas por elementos finitos e desde que resultados experimentais das frequências sejam conhecidos, os mesmos serão citados e usados como parâmetros para comparação. Outras rotinas como o ARPACK e rotinas com implementações de outros métodos também serão usados para comparação.

A medida de desempenho será feita com o auxílio da rotina do COMPAQ VUSUAL FORTRAN® *CPU_TIME*. Essa rotina é chamada antes e após as operações de cálculo dos autovalores e autovetores e o tempo de computação é medido efetuando-se a subtração do tempo anterior à chamada da rotina de resolução do problema de autovalor pelo tempo posterior.

5.2 Validação da Rotina Implementada

Para a validação da metodologia utilizada foram realizados testes com diferentes problemas, cada qual com propriedades diferentes e conseqüentemente, demandando estratégias de solução diferentes. Para efeito comparativo algumas rotinas de bibliotecas consagradas foram usadas. Serão mencionadas as estratégias adotadas, e quando disponível a complexidade de operações de cada algoritmo. Deve-se lembrar que os vetores de partida utilizados para gerar o Subespaço de Krylov foram escolhidos randomicamente, bastando que fossem não-nulos.

Foram escolhidos quatro exemplos, sendo o primeiro exemplo um problema de autovalor padrão e os outros três são problemas generalizados:

- Matriz de Wilkinson (**Caso I**);
- Plataforma de ensaios experimentais para caracterização de cargas dinâmicas induzidas por atividades humanas (**Caso II**);
- Pórtico-Tipo do estádio de futebol do Maracanã (**Caso III**);
- Modelo reduzido em escala da plataforma offshore de Carapeba (**Caso IV**).

O primeiro exemplo é uma matriz que é comumente usada para testar algoritmos de solução de problemas de autovalor. Os casos II e III foram escolhidos para verificar a eficiência da rotina implementada (COPPEPACK) com problemas de dinâmica estrutural que conduziam a autovalores e autovetores complexos. O **Caso II** serviu como um teste inicial da rotina para esse tipo de problema, uma vez que o número de equações do problema é reduzido, enquanto no terceiro caso este número é aproximadamente cinco vezes maior. O quarto exemplo tem como objetivo avaliar a eficiência do método em um problema que conduz a autovalores e autovetores reais comparando-o com uma rotina baseada na iteração por Subespaço.

5.2.1 Problema de Autovalor Padrão – Caso I

Como primeiro problema a ser usado como teste, foi selecionada a matriz de Wilkinson de ordem cem, matriz esta gerada pelo programa MATLAB® (MARCUS (1993)). A matriz de Wilkinson é uma matriz tridiagonal com pares de autovalores distintos, porém muito próximos um dos outros. Para gerá-la basta passar como argumento a ordem da matriz.

Antes do teste, foi feita uma avaliação da influência do número de passos "m" realizados na Fatoração de Arnoldi (vide algoritmo da figura 4.1) e o número de iterações necessárias para alcançar a devida convergência dos autovalores da matriz de Hessenberg (vide algoritmo da figura 4.2). O objetivo é tentar alcançar uma relação entre número de passos e número de iterações que conduzisse a um menor tempo de processamento.

A Tabela 5.1 e Tabela 5.2 mostram as variações dos parâmetros escolhidos para análise, sendo que na primeira estão mostrados os valores associados aos três autovalores e autovetores calculados. Na segunda encontram-se os parâmetros obtidos para 15 autovalores/autovetores. Nesta tabela são apresentados os valores de "m", que representa a ordem do subespaço gerado, o número de iterações para se conseguir a convergência desejada para os autovalores da matriz de Hessenberg, o tempo de CPU em segundos e a norma do resíduo que representa o erro do processo.

Tabela 5.1 – Parâmetros do teste realizado com a matriz de Wilkinson, 3 autovalores computados

Valor de "m"	Nº de iterações	Tempo de cpu (s)	Norma do Resíduo
6	100	0,09013	$7{,}1474 \times 10^{-12}$
10	28	0,09025	$1{,}5387 \times 10^{-13}$
20	10	0,100144	$5{,}9011 \times 10^{-14}$
40	6	0,16022	$8{,}67438 \times 10^{-14}$
50	3	0,24034	$1{,}51537 \times 10^{-15}$

Tabela 5.2 - Parâmetros do teste realizado com a matriz de Wilkinson, 15 autovalores computados

Valor de "m"	Nº de iterações	Tempo de cpu (s)	Norma do Resíduo
20	91	0,4106223	$1{,}031150 \times 10^{-10}$
30	13	0,2403456	$1{,}82395 \times 10^{-14}$
50	4	0,3004320	$1{,}652156 \times 10^{-13}$
70	2	0,4005760	$5{,}783256 \times 10^{-12}$

Inicialmente pode-se observar nestas duas tabelas que a norma do resíduo é aceitável para qualquer um dos valores de "m" utilizados.

Lembrando-se do algoritmo do IRAM apresentado no Capítulo 4 (vide figura 4.2), após "m" passos realizados pelo algoritmo de Arnoldi (vide figura 4.1), é necessário aplicar um número de deslocamentos igual ao número de autovalores requeridos. Isto explica o acréscimo de tempo na Tabela 5.2 em relação à Tabela 5.1.

Pode-se ainda observar nestas tabelas que à medida que o número de passos "m" aumenta, há uma diminuição do número de iterações necessárias para atingir a convergência, principalmente para os primeiros acréscimos de "m". No entanto o tempo gasto de CPU não apresenta um comportamento bem definido. Existe um acréscimo de tempo após a queda brusca do número de iterações. Este comportamento sugere a existência de um valor ótimo para "m" de maneira que possa minimizar o tempo de CPU gasto.

Para avaliar o desempenho do COPPEPACK e compará-lo com outras rotinas foi adotado "m" igual a 30 passos, uma vez que para essa quantidade foi obtido o melhor

desempenho para o cálculo de 15 autovalores. Cabe lembrar que o número de passos representa a quantidade de vetores que formarão a base para o subespaço de Krylov.

Por se tratar de um problema de autovalor padrão, não há necessidade de recorrer à metodologia citada no item 4.4 para realizar a transformação para o problema padrão. Também não foi usada a técnica de transformação espectral (vide item 4.5).

Para comparar com a rotina implementada foram escolhidos dois pacotes: o ARPACK e o IMSL (IMSL MATH LIBRARY (1994)). O ARPACK também é baseado no IRAM e a rotina escolhida do IMSL é baseada no método QR, mais especificamente o método QR com Deslocamento Duplo (VAN LOAN E GOLUB (1996)). O inconveniente dessa rotina do IMSL é que o seu uso implica no cálculo de todos os autovalores. A ordem do problema a ser resolvido inicialmente é cem, sendo calculados apenas quinze autovalores, na medida do possível, tentou-se estabelecer os mesmos parâmetros tanto no ARPACK quanto na rotina implementada.

Os resultados obtidos são apresentados na Tabela 5.3:

Tabela 5.3- Comparação da Norma dos Vetores Resíduo e Tempo de CPU

Método Utilizado	Norma do Vetor Resíduo	Tempo de CPU Gasto (s)
QR (IMSL)	$3{,}6845 \times 10^{-15}$	1,9655
ARPACK	$8{,}2568 \times 10^{-15}$	0,21986
COPPEPACK	$1{,}82395 \times 10^{-14}$	0,25034

Como pode ser visto na Tabela 5.3, o pior desempenho foi o da rotina do pacote IMSL. Isto pode ser perfeitamente justificado, pois o algoritmo QR com Deslocamento Duplo, calcula todos os autovalores, não conseguindo calcular apenas uma porção do espectro como acontece com as outras duas rotinas. O ARPACK e a rotina

desenvolvida apresentaram desempenhos bastante semelhantes demonstrando assim a eficiência do COPPEPACK, lembrando que apenas uma porção do espectro foi calculada.

Comparando a norma do resíduo das três rotinas, todas obtiveram resultados satisfatórios. O ARPACK mostrou-se ser o mais preciso dos três, considerando que este exemplo trata-se de um problema que tem muitos autovalores próximos um dos outros.

5.2.2 Problema de Autovalor Generalizado – Caso II

FAISCA (2002) projetou uma plataforma de ensaios experimentais, que seria usada para testes com pessoas saltando ou dançando. O objetivo é caracterizar cargas induzidas por atividades humanas. A plataforma confeccionada encontra-se no Laboratório de Estruturas da COPPE-UFRJ. Apesar de ser uma estrutura espacial, essa plataforma foi discretizada como uma viga bi-apoiada em elementos finitos lineares de pórtico plano com vinte e um elementos, gerando um problema da ordem de sessenta e três graus de liberdade. A comparação das frequências naturais obtidas experimentalmente e a frequências obtidas com o programa desenvolvido está exposta na Tabela 5.4..

Tabela 5.4-Frequências naturais obtidas experimental e numericamente

Modos de Vibração	Frequência Obtida Experimentalmente (Hz)	Frequência Obtida Numericamente (Hz)	Diferença (%)
1º	3,20	3,17	0,94
2º	9,80	9,75	0,51
3º	24,8	25,53	2,94

Os resultados numéricos e experimentais estão bem ajustados, considerando os erros relativos à frequência experimental obtida, mostrando assim a acurácia do método e as hipóteses usadas na modelagem numérica.

Prosseguindo o estudo desse caso, será analisada a mesma plataforma só que agora, a simulação numérica será realizada com a adição de três sistemas de absorção, sendo um localizado um no centro do vão, e dois outros localizados a um terço de distância do vão em relação a cada um dos dois apoios. Os sistemas de absorção foram calibrados próximos ao primeiro modo de vibração da estrutura original, com uma massa em torno de 10% da massa modal.

Por se tratar de um problema generalizado, é necessário recorrer a uma estratégia que evite a inversão da matriz $\underline{B}$ do sistema (vide eq. 2.41). A estratégia inicialmente adotada foi a já citada no Capítulo 4 (vide item 4.4) sugerida por COUTINHO. Ao realizar os testes ficou comprovada a ineficiência da mesma, pois o mal condicionamento do sistema resultante prejudicou em muito a convergência no algoritmo do IRAM, além de resultar em aproximações dos autovalores muito ruins.

A solução adotada foi a utilização do algoritmo do Método de Arnoldi para solução de sistemas lineares (vide figura 4.3). Para este exemplo também foram realizados os mesmos testes a fim de determinar uma relação entre o número de passos do algoritmo de Arnoldi e o número de iterações para o algoritmo do IRAM, sendo estabelecido 20 passos e para esse número de passos foram realizadas 32 iterações.

Para efeito de comparação a mesma estrutura (estrutura principal + sistemas de absorção) teve suas frequências naturais calculadas pela rotina QZ (MOLER e STEWART (1973)). A rotina QZ é a generalização da rotina QR, apresentando também a mesma característica de apenas ser capaz de calcular todas as frequências naturais podem ser vistos na Figura 5.1.

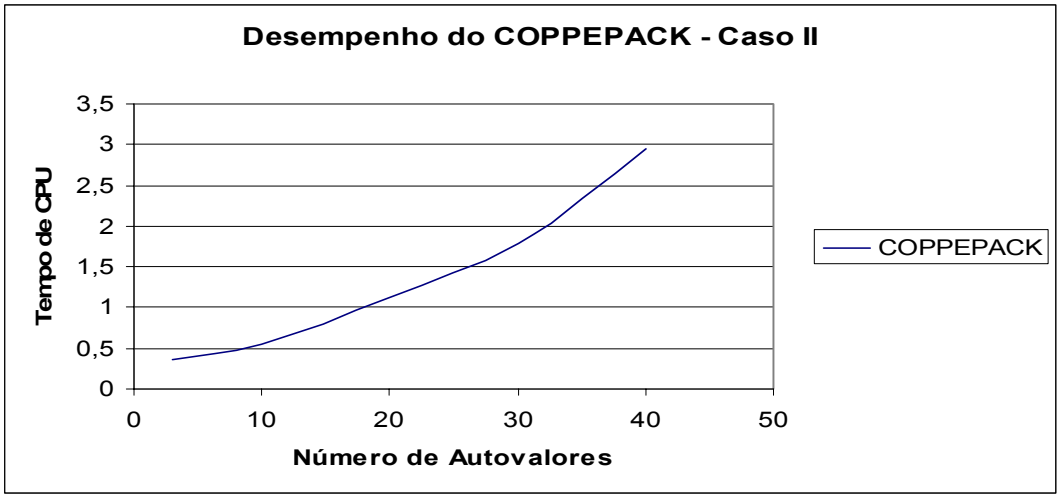

Figura 5.1 – Gráfico relacionando tempo de cpu em segundos e o número de autovalores calculados pelo COPPEPACK

A introdução de sistemas de absorção transforma um problema com autovalores e autovetores reais em um problema com autovalores e autovetores complexos, como já foi mencionado. A instalação de sistemas auxiliares modifica as frequências naturais da estrutura original. As matrizes modificadas do problema (ver eqs. (2.38) e (2.39)) são matrizes mal condicionadas, e para o uso do método IRAM foi necessário recorrer a uma transformação espectral, dando-se um deslocamento igual à primeira frequência natural da estrutura original. Alguns testes mostraram que um deslocamento próximo ao menor autovalor a ser calculado mostrou ser eficiente. Com a transformação espectral, os deslocamentos dados para Fatoração QR com Deslocamentos Implícitos foram os de menor magnitude, lembrando-se que os autovalores da matriz de Hessenberg do problema com a transformação são inversamente proporcionais aos autovalores do problema original.

A Figura 5.1 apresenta a variação dos tempos de CPU em segundos em função do número de autovalores calculados pelo COPPEPACK.

Conforme pode ser visto nessa figura, o tempo de CPU cresce de forma não-linear com o aumento do número de autovalores calculados. Levando-se em consideração a característica da carga que é "gerada" por pessoas saltando (< 10 Hz) e dos sistemas de absorção, esta análise poderia ser efetuada considerando no máximo os dez primeiros autovalores. Para o cálculo desses demandaria um tempo de CPU de aproximadamente 0,5 segundos, bem inferiores aos 3,87 segundos usados pela rotina QZ.

Tal como aconteceu com a rotina QR, o pior desempenho deve-se ao fato já citado de que ela não consegue calcular apenas alguns autovalores, é necessária avaliação de todo o espectro. O uso da rotina QZ requer $31n^3$ flops, para problemas com muitos graus de liberdade o uso de tal rotina é proibitivo. Esta foi a principal justificativa para o fato de MAGLUTA (1993) adotar esta rotina, aliada a uma técnica de sub-estruturação.

Comparando o resíduo obtido da rotina QZ, com o resíduo do COPPEPACK, o resíduo da QZ ficou na ordem de 10^{-10}, quanto do COPPEPACK ficou em torno de 10^{-8}. Os resíduos obtidos tanto pelo COPPEPACK (10^{-8}) quanto pela QZ (10^{-10}) podem ser considerados satisfatórios. Deve-se lembrar que o resíduo do COPPEPACK poderia

ser reduzido aumentando-se o número de passos “m”, porém este aumento conduziria a um acréscimo do tempo de CPU.

5.2.3 Caso II-Pórtico Tipo do Estádio Maracanã

MAGLUTA (1993) analisou o uso de sistemas de absorção para redução dos problemas de vibrações excessivas. Em seu trabalho há simulações de uma pórtico-tipo do estádio do Maracanã com dois sistemas de absorção conforme ilustrado na Figura 5.2. Um sistema é colocado na arquibancada e outro na marquise do estádio, identificados pelos pontos *A* e *B* respectivamente. O sistema de absorção instalado no ponto *A* foi calibrado em torno da 1ª frequência natural da arquibancada (4,6 Hz), enquanto o do ponto *B* foi calibrado em torno da primeira frequência natural da marquise (2 Hz).

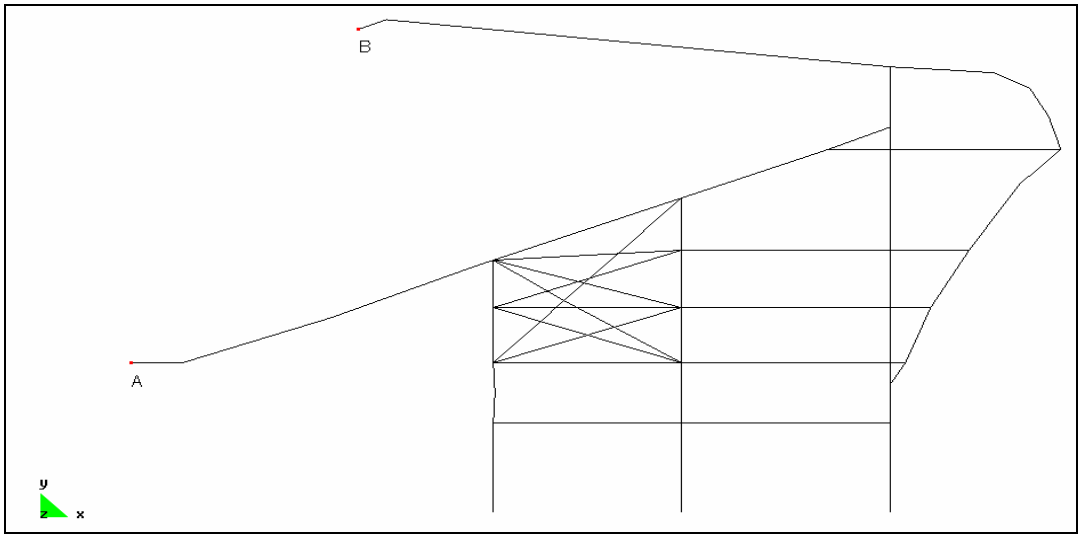

Figura 5.2 –Pórtico-Tipo do Estádio do Maracanã indicando os pontos de instalação dos sistemas de absorção.

A discretização dessa estrutura também foi feita com elementos finitos de pórtico plano lineares, sendo utilizados 98 nós e 118 elementos para discretizá-la.

Como nos exemplos anteriores, também foram realizados testes para estabelecer a já descrita relação número de passos e iterações, com o intuito de se obter um menor tempo de processamento. Para este caso o número de passos utilizados foi 45, e para tanto foram necessárias 27 iterações.

A estratégia para a solução do sistema de equações originado pelo problema padrão foi a mesma descrita anteriormente com utilização da transformação espectral, tomando os mesmos cuidados para os deslocamentos usados no IRAM.

Mais uma vez ao se comparar as frequências naturais experimentais e as frequências numéricas calculadas com o IRAM, sem o sistema de absorção, pode-se notar que a simplificação da análise de um problema espacial como um problema plano pode ser adotado sem abdicar da precisão necessária para o modelo. A Tabela 5.5 mostra os resultados obtidos:

Tabela 5.5- Comparação entre as frequências naturais experimentais e numéricas em (HZ)do pórtico-tipo do Maracanã

Modos de Vibração	Frequência Obtida Experimentalmente	Frequência Obtida Numericamente	Diferença (%)
1º	2,00	2,05	2,5
2º	3,00	2,92	2,67
3º	4,60	4,60	0,0

A Figura 5.3 apresenta o tempo de CPU versus o número de autovalores calculados. Este gráfico mostra um comportamento bem semelhante ao apresentado no exemplo anterior. Deve-se ressaltar que para esta análise seriam necessários apenas os 10 primeiros autovalores, o que demandaria um tempo aproximado de 4 segundos, bastante inferior ao gasto pela QZ (46,5 segundos).

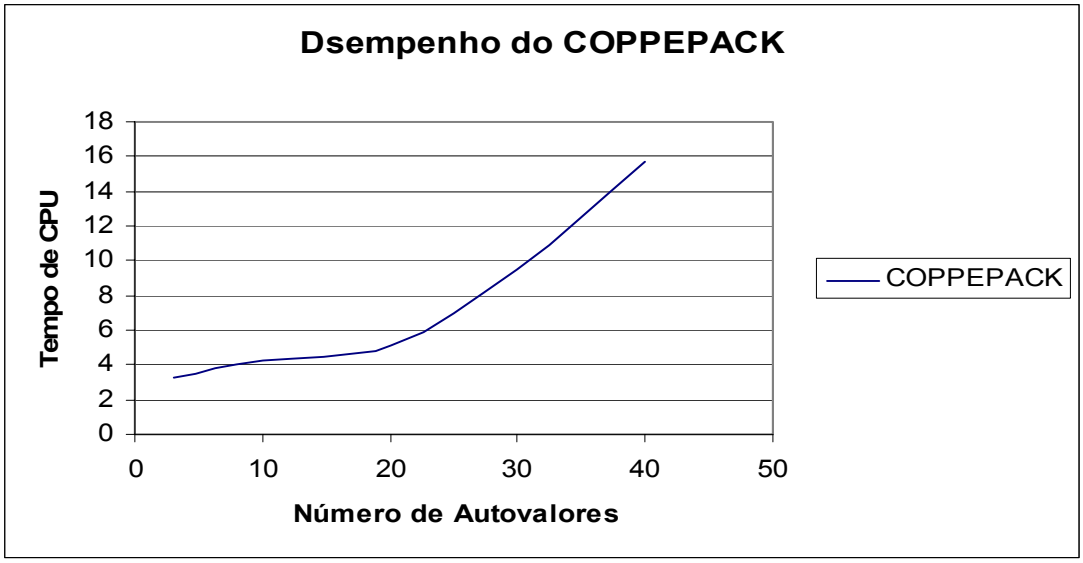

Figura 5.3 – Relação tempo de cpu- número de autovalores calculados pelo COPPEPACK

Comparando-se os resíduos obtidos (QZ – 10^{-6} e COPPEPACK 10^{-8}), nota-se que ambos são satisfatórios, porém a rotina COPPEPACK se mostrou mais precisa. Através dos resultados obtidos neste exemplo e no anterior, pode-se concluir que as estratégias implementadas se mostraram bem eficientes e precisas para o caso de problemas de autovalor generalizado.

5.2.4 Caso III – Modelo Reduzido em Escala da Plataforma Offshore de Carapeba

Este exemplo, trata-se de uma estrutura offshore mostrado na Figura 5.4, a qual foi estudada por GADEA (2002).

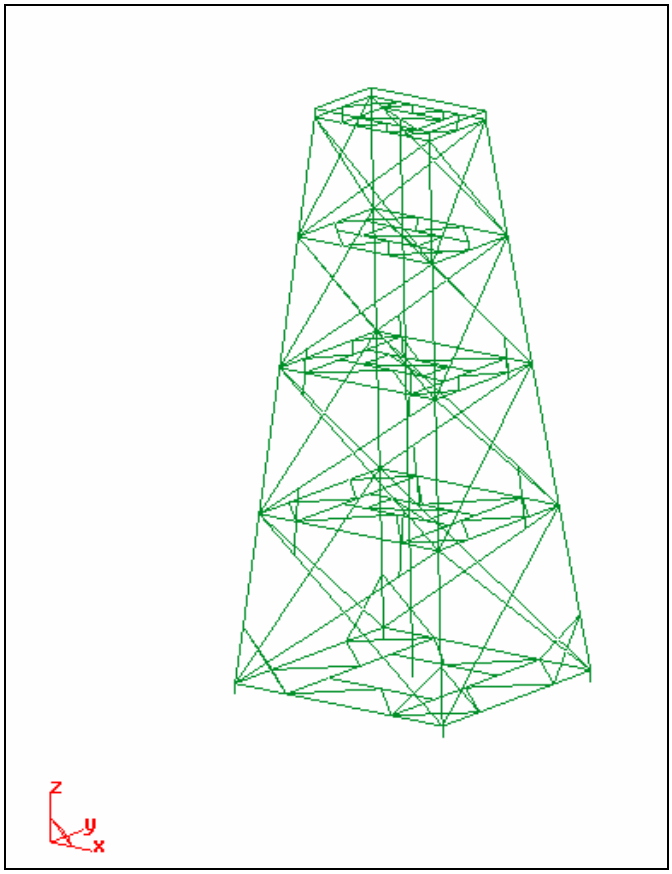

Figura 5.4 –Plataforma Offshore de Carapeba, discretizada em elementos finitos, vista 3D

Neste exemplo não foi usado nenhum sistema de absorção na simulação numérica. O objetivo desse exemplo foi resolver o problema de autovalor generalizado com um número maior de graus de liberdade. Para atingir este objetivo, os resultados do COPPEPACK são comparados aos da rotina de Iteração por Subespaços (BATHE (1996)). Esta rotina pôde ser utilizada uma vez que as matrizes são simétricas e positivo-definidas, o que conduz a um problema com autovalores reais. Na discretização dessa estrutura foram utilizados elementos finitos lineares de pórtico espacial, ficando discretizada com 165 nós e 416 elementos. A esparsidade das matrizes de massa e rigidez, devido a discretização foi levada em conta com a utilização de um esquema de armazenamento em perfil (BATHE (1996)).

GADEA em seu trabalho de identificação de danos estruturais através da Função de Resposta em Frequência (FRF), constatou que nessa estrutura há muitos modos de vibração locais intercalados no espectro dos modos globais, o que implica a necessidade da obtenção de mais autovalores para o conhecimento das frequências naturais associadas aos modos globais. Testes realizados por GADEA revelaram que são necessários 40 autovalores para a obtenção dos modos globais que interessavam na análise.

BATHE concluiu que o algoritmo de Iteração por Subespaço é recomendado para problemas que necessitem de poucos autovalores, no máximo 20. E que para problemas que necessitem de mais de 40 autovalores seu custo computacional cresce muito rapidamente. Isto pode ser visto na Tabela 5.6, a qual mostra a comparação dos tempos de CPU utilizados pela Subespaço e pelo COPPEPACK, para diferentes números de autovalores e autovetores requeridos. No caso do COPPEPACK foram usados diferentes número de passos, e conseqüentemente diferentes números de iterações foram necessárias .

Tabela 5.6 –Comparação dos Tempos de Cpu para diferentes autovalores entre o IRAM e Subespaço

Rotina Utilizada / Número de Autovalores	10	25	30	40	50	100
Subespaço	8,48s	30,44s	45,13s	31,14s	116,21s	201,38s
COPPEPACK	2,21s	5,12s	7,88s	12,36s	20,25s	36,33s

Conforme pode ser observado nesta tabela os tempos de CPU gastos pelo COPPEPACK foram, em média, cinco vezes menores do que os do Subespaço, demonstrando assim, a eficiência do método para esse tipo de problema.

O IRAM foi utilizado, com o mesmo esquema já citado de transformação para o problema de autovalor padrão para o generalizado, sendo que neste caso a transformação espectral não foi necessária, diminuindo um pouco o custo computacional da rotina.

Comparando os erros relativos às duas rotinas, ambos estiveram com a mesma ordem de grandeza, cerca de $1{,}0 \times 10^{-9}$, o que é considerado bastante aceitável. Vale a pena ressaltar também que diferentemente da rotina Subespaço, a convergência do IRAM não é dependente do vetor de partida, pois para todos os casos simulados foram utilizados vetores aleatórios, bastando apenas ser um vetor não-nulo.

Capítulo 6

6 Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

6.1 Conclusões e Considerações Finais

Para encerrar esse trabalho fazem-se, a seguir, os comentários finais e conclusões obtidas ao longo da preparação do mesmo.

O Método de Arnoldi com Reinício Implícito apresentou bons resultados na solução de problemas de autovalor tanto padrão, quanto generalizado, não importando se o problema possuía autovalores exclusivamente reais, ou se possuía algum autovalor complexo. A depender do grau de condicionamento das matrizes do problema, deve-se utilizar o Método de Arnoldi com Reinício Implícito aliado a uma transformação espectral, a qual será usada para melhorar a convergência no espectro que contenha os autovalores desejados. Deve-se destacar que esta transformação não garante que os autovalores da matriz de Hessenberg, que estejam fora desse espectro, sejam boas aproximações para os autovalores do problema original.

De um modo geral os resultados dos exemplos analisados demonstraram que o COPPEPACK obteve boas aproximações para os autovalores, com um melhor desempenho computacional do que rotinas que utilizam métodos consagrados.

O uso do Método de Arnoldi com a fatoração QR com Deslocamentos Implícitos transformando-o no Método de Arnoldi com Reinício Implícito diminui a necessidade de um maior número de passos, evitando a necessidade de gerar uma matriz de Hessenberg com ordem igual ou próxima à do problema a ser resolvido.

A combinação do número de passos e números de iterações pode ser utilizada de sorte a diminuir o tempo gasto para a solução do problema, sem abrir mão da qualidade dos autovalores computados.

A aplicação do Método de Arnoldi para solução de sistemas de equações lineares se mostrou uma boa opção para a transformação do problema padrão generalizado num problema padrão sem necessitar de muitas modificações no algoritmo usado para o problema de autovalor. Esta estratégia evita assim qualquer técnica que recorra a uma transformação direta por via da inversão de matrizes, podendo desse modo transformar um problema esparso num problema com matrizes cheias. Esta operação matricial pode levar a uma perda das vantagens que se pode tirar da esparsidade de uma matriz por ser o Método de Arnoldi um método que requer muitas operações de produto envolvendo uma matriz e um vetor.

Finalmente deve-se mencionar que uma das principais vantagens do COPPEPACK, contrariamente ao ARPACK, é que o usuário final não precisa se preocupar com os detalhes do Método, tais como: técnicas usadas para transformação do problema padrão para o generalizado e convergência dos valores de Ritz para os autovalores.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Ao longo da elaboração deste trabalho, foram surgindo novos problemas e questionamentos, os quais, devido ao tempo exíguo, não puderam ser resolvidos e/ou respondidos de forma satisfatória, sendo deixados como sugestão para estudos futuros, dentre os quais pode-se destacar:

- A necessidade de um estudo mais preciso sobre a convergência do método utilizado para a solução do problema de autovalor padrão e generalizado,

principalmente de uma investigação mais criteriosa sobre o método iterativo baseado no Método de Arnoldi para solução de sistemas de equações lineares.

- Testar o desempenho do IRAM com problemas de autovalor discretizados por outros métodos, tais como: Método de Elementos de Contorno, Métodos das Diferenças Finitas, etc, pois quase todos os testes realizados foram originados de uma discretização via o Método dos Elementos Finitos.
- Avaliar se há como prever uma relação ótima entre os números de passos a serem realizados durante uma Decomposição de Arnoldi em "m"-passos de uma matriz, e o número de iterações necessárias para obter a convergência dos autovalores da matriz de Hessenberg durante o Método de Arnoldi com Reinício Implícito, contemplando o menor custo computacional possível.
- Implementar uma rotina que seja mais eficiente computacionalmente para o cálculo dos autovetores, pois é sabido que o Método de Iteração Inversa só é recomendado para a obtenção de poucos autovetores.

7 Referências Bibliográficas

ANDERSON, E., BAI, Z., BISCHOF, DEMMEL, J., DONGARRA, J., DU CROZ, J., GREENBAUM, A., HAMMARLING, S., McKENNEY, A., OSTROUCHCOV, S., SORENSEN, 1995, LAPACK User´s Guide, **SIAM, Philadelphia.**

ARNOLDI, W. E., 1951, In: "The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem". **Quart. J. Appl. Math, 9:17-29.**

BATHE, K. J., 1996, Finite Elements Procedures, **Prentice-Hall, New Jersey .**

CLOUGH, R. W., PENZIEN, J., 1996, Dynamics of Structures, **McGraw-Hill, New York.**

FAISCA, R.G., ROITMAN, N., MAGLUTA, C., 2002, In: "Comparação Numérico-Experimental da Resposta de Uma Estrutura Submetida ao Carregamento de Multidão", **Anais da XXX Jornadas Sul-Americanas de Engenharia Estrutural.**

FLANERRY, B., TEUKOLSKY, S., VETTERING, W.,1995, Numerical Recipes in Fortran – The Art of Programming, **Cambridge University Press, Cambridge, U.K. .**

FRANCIS, J. G. F., 1961, In: "The QR transformation". **The Computer Jounal, 4:265-271.**

GADEA, A. S. M., 2002, Identificação de Danos Estruturais a Partir das Funções de Resposta em Frequência (FRF), **Tese de M. Sc., COPPE/UFRJ, Programa de Engenharia Civil.**

GOLUB, G. H., VAN LOAN, C. F.,1996, Matrix Computations, **Johs Hopkins University Press, New York.**

IMSL, 1994, Fortran Subroutines for Mathematical Applications, **Visual Numerics Inc., Houston.**

JIA, Z., 2000, In: "Some Recursions on Arnoldi's Method and IOM for Large Non-Hermitian Linear Systems" **, Computers & Mathematics with Applications, 39:125-129** .

LANCZOS, C., 1950, In: "An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators" **. J. of the National Bureau of Standards, 45(4):255-282.**

LEHOUCQ, R., SORENSEN, D. C., YANG, C.,1998, ARPACK User´s Guide, **SIAM, Philadelphia.**

MAGLUTA, C., 1993, Sistemas Dinâmicos Passivos para Absorção de Vibrações Estruturais, **Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Programa de Engenharia Civil.**

MANTEUFELL, T. A., 1978, In: "Adaptative procedure for estimating parameters for the nonsymetric Tchebychev iteration." **. Numer. Math, 31:183-208.**

MARCUS, A., 1993, Engineering Programming HandBook, **The Math Works Inc, Natic, MA.**

MASSCHOFF, 2002, http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/

MOLER, J., STEWAR, G. W., 1973, In: "The QZ Algorithm", **Linear Algebra Appl., 143:19-47.**

SAAD, Y., 1996, Iterative Method for Solution of Sparse Systems, **Halsted Press.**

SAAD, Y., 1992, Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems, **Halsted Press.**

STEWART, G. W., 1973, Introdution to Matrix Computations, **Academic Press.**

STEWART, G. W., 1991, Matrix Theory, **Academic Press, New York.**

SORENSEN, D. C., 1992, In: "Implicity aplicattion of polynomial filter in a k-step Arnoldi Method", **SIAM J. Anal Appl., 13(1):357-385.**

WATKINS, D. S., ELSNER, L., 1991, In: "Convergence of algorithms of decomposition type for the eigenvalue problem", **Linear Algebra Appl., 143:19-47.**

WILKINSON, J. H., 1965, The Algebraic Eigenvalue Problem, **Claredon Press, Canbridge,UK.**