**Um Método Numérico para a Solução
de Problemas Inversos de Autovalores
em Sistemas Discretos**

Juan Carlos Egaña Arancibia

TESE APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA OBTENÇÃO DO GRAU
DE
DOUTOR EM MATEMÁTICA APLICADA

Área de Concentração: **ANÁLISE NUMÉRICA**
Orientador: **Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos**
Co-orientador: **Prof. Dr. Nelson Mugayar Kuhl**

*Durante a elaboração deste trabalho,
o autor recebeu apoio financeiro da CAPES e
do Depto. de Matemática da Universidad Católica del Norte, Chile.*

-São Paulo, Agosto de 1999-

Um Método Numérico para a Solução de Problemas Inversos de Autovalores em Sistemas Discretos

Este exemplar corresponde à redação final devidamente corrigida e defendida por Juan Carlos Egaña Arancibia e aprovada pela comissão julgadora.

São Paulo, 10 de Setembro de 1999.

Banca examinadora

- Prof. Dr. Luis Carlos de Castro Santos (IME-USP)
- Prof. Dr. Júlio Michael Stern (IME-USP)
- Prof. Dr. Antonio Carlos Moretti (IMECC-UNICAMP)
- Prof. Dr. Norberto Mangiavacchi (ICMC-USP)
- Prof. Dr. Ricardo Soto Montero (UCN-CHILE)

.....depois de tantos anos de estudos quis responder a seguinte pergunta:

POR QUÉ ESTUDIAS?

.....e a Marcia, minha esposa, deu de presente para mim um cartão que dizia.....

Un hombre puede estudiar por cinco razones:

Para saber. Para mostrar que sabe. Para obtener ganancias. Para instruir a otros. Para instruirse a si mismo.

Saber por saber, es curiosidad. Saber para mostrar que se sabe, es vanidad. Saber para conseguir dinero u honores, es comercio culpable. Saber para instruir a otros, es caridad.

Saber para instruirse a sí mismo, es humildad.

Solamente los dos últimos no abusan de la ciencia, porque estudian para hacer el bien.

SAN BERNARDO

.....*A MI ESPOSA MARCIA.*

Resumo

Um problema inverso em vibração é estudado neste trabalho. O problema é chamado *isolamento de frequências em sistemas discretos massa-mola (IFSMM)*, com aplicação em *problemas de identificação, projeto estrutural e otimização*. O problema IFSMM consiste em isolar as frequências naturais de um sistema massa-mola de uma certa *banda de ressonância*, gerando um novo espectro de frequências, e a partir deste, reconstruir um novo sistema minimizando o impacto de re-projeto relativo ao sistema inicial. Aqui é proposto um método numérico inverso de autovalor para resolver o problema IFSMM, onde um *espectro intercalado* μ é necessário. A fim de minimizar o impacto de re-projeto a escolha entre as soluções inversas é a que minimiza as mudanças nas propriedades físicas do sistema. O método é baseado numa *estratégia de busca multidimensional* original e eficiente, onde o μ é a incógnita. Esta estratégia implica um análise de sensibilidade, com relação ao espectro intercalado. A reconstrução inversa implica numa análise prévia da sensibilidade de uma matriz de Jacobi $J(\mu)$. Neste trabalho, é proposto um método numérico direto que permite calcular a sensibilidade de $J(\mu)$ com exatidão numérica. Também um completo estudo de sensibilidade em sistemas massa-mola é desenvolvido. São apresentados diferentes exemplos numéricos para mostrar a eficiência, robustez, e precisão do método numérico inverso de autovalor proposto, o qual permite identificar as mudanças que devem ser feitas no re-projeto de um sistema sujeito a ressonância.

Abstract

In this work an inverse problem in vibration is studied. The problem is named frequency isolation of spring-mass discrete systems (FISMS), with application in *identification, structural design and optimization problems*. The FISMS problem consists in isolating the natural frequencies of the spring-mass systems which lie in some *resonance band*, generating a new frequency spectra, and from it, reconstruct a new system minimizing the impact of re-design with respect to the initial system. A inverse eigenvalue numerical method is proposed to solve the FISMS problem, where an interlaced spectra μ is used. To minimize the impact of re-design the criteria of choice among the inverse solutions is the one which minimizes the changes in the physical properties of the system. The method is based in an original e efficient *multidimensional search strategy*. This strategy involves the sensitivity analysis in relation to interlaced spectra. The inverse reconstruction include a sensitivity analysis of Jacobi matrix $J(\mu)$. In this work a direct numerical method is proposed which allows to compute the sensitivity $J(\mu)$ with numerical accuracy. Also a complete study of sensitivity of spring-mass systems is developed. Several numerical examples are presented to show the efficiency, robustness and accuracy of the inverse eigenvalue numerical method which allows the identifications the changes that must be made in the re-design of a system in resonance.

Agradecimentos

Na conclusão deste trabalho devo agradecer às pessoas que me apoiaram durante quatro anos no Brasil.

Primeiro agradeço a Deus por sentir que está presente em cada desafio empreendido na minha vida, embora acho que não mereço.

Meus amigos e colegas do instituto: Alice, Leandro, Carolina, Marcel, Gustavo, Nelson Chávez, Wálter Cárdenas, NelsonVN, o grande Santoyo, tio Choque, Xyoby e muitos outros.....

À comunidade chilena integrada por Carlitos, Robertão, Gonzalo, Francisco, Iván, Bernardo, Violeta, Mariano, Filidor, Ivo, meu grande amigo Cristian, e Luis (el loco) por motivar-me a começar o doutorado.

À minha grande amiga, e quase irmã, Claudia pela paciência e apoio recebido durante todos estes anos no Brasil. Também a meu caro colega e amigo Raúl, pelos “longos” anos de luta por conseguir este objetivo.

Aos professores do IME que influíram de alguma maneira na conclusão deste pós: Cyro, Roberto, e Saulo.

À Ricardo, meu ex-orientador do mestrado, pela confiança e apoio recebido desde o início deste doutorado.

À Luis Carlos e Nelson pela orientação e formação que recebi durante o desenvolvimento deste trabalho. Além disso, a paciência que significa trabalhar conmigo.....para falar verdade, são demais.

À minha família.....meus pais Lilian e Danilo, meu grande irmão e amigo “el Ruco”, meu irmão Pancho, meus sobrinhos, meus sogros, meus cunhados. meus tios, etc.

.....e especialmente à Marcia.....minha amiga, companheira, e esposa. Com ela compartilho este trabalho.....obrigado meu amor.

Sumário

1	Introdução	1
2	Estrategia Unidimensional para o Isolamento de Frequências Naturais em Sistemas Discretos Massa-Mola	8
2.1	Formulação do Problema	8
2.2	Reconstrução de uma Matriz de Jacobi	9
2.3	Reconstrução de Sistemas Massa-Mola	12
2.4	Estratégia Unidimensional para Solução Numérica do Problema IFSMM	16
2.5	Resultados Computacionais	18
3	Análise de Sensibilidade de Matrizes de Jacobi	23
3.1	Aproximação por diferenças finitas	24
3.2	O método δ -Lanczos	25
3.3	O método δ^2 -Lanczos	30
3.4	Resultados Computacionais	33
3.4.1	Gráficos das derivadas calculadas por δ -Lanczos	34
3.4.2	Comparação dos algoritmos com e sem ortogonalização	34
3.4.3	Consistência do algoritmo δ -Lanczos	36
3.4.4	Derivada numérica exata obtida pelo algoritmo δ -Lanczos	38
3.4.5	Comparação dos métodos δ -Lanczos e diferenças finitas	39
4	Análise de Sensibilidade de Sistemas Massa-Mola	41
4.1	Análise de sensibilidade das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$	42
4.2	Resultados Computacionais	48
4.2.1	Gráficos das derivadas calculadas pelo algoritmo 4.1	49
4.2.2	Derivada numérica exata das massas e constantes de rigidez	49

4.2.3	Comparação do algoritmo 4.1 com diferenças finitas	54
5	Estratégia Multidimensional para o Isolamento de Frequências Naturais em Sistemas Discretos Massa-Mola	56
5.1	Estratégia multidimensional para matrizes de Jacobi	58
5.2	Estratégia multidimensional para sistemas massa-mola	63
5.2.1	Massa total constante	63
5.2.2	Massa total como variável independente	68
	Conclusões	85
A	Algoritmo tipo região de confiança para minimização com restrições de canalização Box	88
	Referências Bibliográficas	91

Lista de Figuras

1.1	<i>Vibração transversal das partículas aderidas a uma corda fixa-fixa.</i>	2
1.2	<i>Vibração transversal das partículas aderidas a uma corda fixa-livre.</i>	2
1.3	<i>Sistema massa-mola fixo-livre.</i>	3
1.4	<i>Sistema massa-mola modificado fixo-fixo.</i>	4
1.5	<i>Sistema massa-mola modificado com uma mola adicional fixo-fixo.</i>	5
1.6	<i>Sistema massa-mola modificado com parâmetros oscilatórios.</i>	5
2.1	<i>Banda de ressonância com centro c e raio r</i>	9
2.2	<i>Distribuição dos autovalores dentro da banda.</i>	17
2.3	<i>Distribuição dos autovalores isolados da banda.</i>	18
2.4	<i>Comparação entre os sistemas original e inverso. Com frequências não isoladas; (a) sem restrição, (b) com restrição.</i>	20
2.5	<i>Comparação entre os sistemas original e inverso, impondo a restrição sob m_{10} e k_1; (a) $\lambda_6 \in B(4.5; 0.3)$, (a) $\lambda_5, \lambda \in B(3.5; 0.9)$.</i>	20
3.1	<i>Gráficos das derivadas dos elementos diagonais e co-diagonais de uma matriz de Jacobi ordem $n = 10$ com relação à primeira variável até a nona.</i>	35
3.2	<i>Gráficos dos $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j-ésima iteração do método de Newton para três valores iniciais diferentes.</i>	38
4.1	<i>Gráficos das derivadas das massas e constantes de rigidez do sistema com 10 graus de liberdade, ilustrado na Tabela 4.1, com relação às nove variáveis.</i>	51
4.2	<i>Gráficos das derivadas das massas e constantes de rigidez do sistema com 10 graus de liberdade, ilustrado na Tabela 4.2, com relação às nove variáveis.</i>	52
4.3	<i>Gráficos dos $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j-ésima iteração do método de Newton para três valores iniciais diferentes.</i>	53

5.1	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o segundo autovalor das bandas $\beta(26.0; 0.9)$, $\beta(26.0; 2.0)$, e $\beta(26.0; 4.0)$.</i>	76
5.2	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o sexto autovalor das bandas $\beta(120.0; 3.4)$, $\beta(120.0; 6.0)$, e $\beta(120.0; 12.0)$.</i>	77
5.3	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o nono autovalor das bandas $\beta(204.5; 1.1)$, $\beta(204.5; 4.0)$, e $\beta(204.5; 12.0)$.</i>	78
5.4	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o segundo e terceiro autovalor das bandas $\beta(37.55; 12.4)$, $\beta(37.55; 14.0)$, e $\beta(37.55; 15.0)$.</i>	80
5.5	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o quinto e sexto autovalor das bandas $\beta(111.0; 14.0)$, $\beta(111.0; 20.0)$, e $\beta(111.0; 25.0)$.</i>	81
5.6	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o oitavo e nono autovalor das bandas $\beta(189.8; 15.8)$, $\beta(189.8; 22.0)$, e $\beta(189.8; 26.0)$.</i>	82
5.7	<i>Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o sétimo, oitavo e nono autovalor das bandas $\beta(148.7; 25.5)$, $\beta(148.7; 29.0)$, e $\beta(148.7; 32.0)$.</i>	83

Capítulo 1

Introdução

Os *problemas inversos* aparecem numa variedade importante de aplicações em física e engenharia. Esta lista inclui, entre outros, teoria de circuitos, projeto de controle, e teoria de vibração. Um problema é chamado *problema inverso* devido a sua relação com outro problema, chamado *problema direto*, e porque as incógnitas, no inverso, são os dados, conhecidos no direto, e vice-versa.

O estudo da vibração livre infinitesimal de sistemas elásticos sem amortecimento é de grande interesse na teoria clássica de vibração. Um dos problemas diretos clássicos consiste em determinar as respostas de um sistema (frequências naturais, modos de vibração, etc) para alguma distribuição de forças, onde os dados são as propriedades do sistema (distribuição de massas, coeficientes de elasticidade, etc). Enquanto que, no correspondente problema inverso, os dados são as respostas, e as incógnitas as propriedades do sistema. Assim os problemas inversos têm um valor prático para ser aplicados em mecânica e projeto estrutural e otimização [2], [10], [23], [24], [29], [38], [47], [48], [49], [50], [51], [19], [20], [21], [44], [8], [11]. Problemas de dimensão maior podem ser encontrados em [4], [39], [41], [42], [63], [64], [65].

Em geral, se alguma informação espectral (frequências naturais e/ou modos de vibração) é dada, pode existir ou não um sistema com as propriedades especificadas, se existe pode ser único ou vários sistemas. O principal interesse neste trabalho é uma classe de problemas inversos, a reconstrução de sistemas, os quais, num sentido geral, pertencem aos problemas de identificação de parâmetros. Os problemas inversos tratados aqui são exclusivamente aqueles que os dados espectrais proporcionam um e somente um sistema vibrante do tipo especificado com as propriedades espectrais dadas.

Gantmakher e Krein [18] consideraram o problema inverso de determinar as massas e posições de um conjunto de n partículas aderidas a uma corda tensa, a partir das frequências de vibrações transversais da mesma. A corda é fixada nos extremos. Os dados consistem em dois espectros:

o primeiro, $(\lambda_i)_1^n$, correspondente ao extremo direito fixo, como mostra a Fig. 1.1; e o segundo $(\mu_i)_1^n$, correspondente ao extremo direito deslizando-se livremente em uma varinha em ângulo reto à posição de equilíbrio da corda, como na Fig. 1.2.

Figura 1.1: *Vibração transversal das partículas aderidas a uma corda fixa-fixa.*

Figura 1.2: *Vibração transversal das partículas aderidas a uma corda fixa-livre.*

As equações que governam o problema da corda são matematicamente semelhantes às que governam as vibrações de um sistema massa-mola com n graus de liberdade com n massas m_i conectadas por molas lineares $(k_i)_1^n$, com extremo direito livre, como mostra a Fig. 1.3. Este sistema é caracterizado pela equação de autovalor generalizada

$$(K - \lambda M)u = 0, \quad (1.1)$$

onde o autovetor u está relacionado aos deslocamentos das massas. As matrizes M e K são diagonal e tridiagonal simétrica definida positiva, respectivamente. M é chamada *matriz de massa*, e K *matriz de rigidez*. A equação de autovalor generalizado 1.1 pode ser reduzida à forma clássica:

$$(J - \lambda I)v = 0, \quad (1.2)$$

onde $v = M^{1/2}u$, e $J = M^{-1/2}KM^{-1/2}$ é uma matriz tridiagonal simétrica definida com elementos co-diagonais negativos. Uma matriz tridiagonal simétrica será chamada *matriz de Jacobi*. Estas matrizes têm autovalores positivos distintos, o autovetor correspondente ao i -ésimo

autovalor, em ordem ascendente, tem exatamente $i - 1$ troca de sinais entre suas componentes (ver [26]).

Figura 1.3: Sistema massa-mola fixo-livre.

A reconstrução de sistemas massa-mola pode ser realizada em duas partes; primeiro reconstruir a matriz J de 1.2, e a partir desta, reconstruir as matrizes M e K . A teoria básica da existência e unicidade do problema inverso de reconstrução de uma matriz de Jacobi foi desenvolvida principalmente por Hoschstadt e Hald ([37], [35]). O primeiro demonstrou que existe no máximo uma matriz de Jacobi J com a propriedade requerida, e tentou reconstruir esta única matriz, mas não conseguiu provar que seu método sempre leva a valores reais dos elementos co-diagonais. Hald [35] apresentou outra construção e provou que, em teoria, este método sempre resultará em autovalores $(\lambda_i)_1^n$ de J , e $(\mu_i)_1^{n-1}$ correspondentes à submatriz principal superior $\tilde{J}$ de ordem $(n - 1)$, obtida apagando a última linha e coluna de J , satisfazendo a propriedade de intercalamento:

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \cdots < \mu_{n-1} < \lambda_n. \quad (1.3)$$

Na prática a construção tem uma falha devido a perda de precisão. Hald também provou que a construção de Hoschstadt levaria a valores reais dos elementos co-diagonais desde que a condição 1.3 seja satisfeita. Gray and Wilson [34] apresentaram uma construção indutiva da matriz J . Uma demonstração independente da unicidade do problema foi dada por Hald [35]. Posteriormente, foram desenvolvidos outros algoritmos numericamente estáveis e bem condicionados. Basicamente estes algoritmos são baseados em métodos que reduzem uma matriz real simétrica à forma tridiagonal tais como Householder, Given, e Lanczos (Ver [5], [6], [7], [14], [33]). Por exemplo, é possível calcular, a partir de $(\lambda_i)_1^n$ e $(\mu_i)_1^{n-1}$, as últimas componentes $v_n^{(i)}$ dos autovetores normalizados de J na forma:

$$(v_n^{(i)})^2 = \frac{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^{n-1} (\lambda_j - \lambda_i)} \quad (1.4)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$ (Ver [6], [26], [32]). O conjunto de autovalores $(\mu_i)_1^{n-1}$ é conhecido como *espectro intercalado*, cujos valores são as raízes quadradas das frequências naturais de um sistema massa-mola modificado com a última massa fixa, como mostra a Fig. 1.4. O algoritmo de Lanczos pode ser aplicado adequadamente para reconstruir J definindo a matriz diagonal $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$, e calculando um vetor unitário cujas componentes são dadas pela eq 1.4.

Figura 1.4: Sistema massa-mola modificado fixo-fixo.

A reconstrução de um sistema massa-mola também pode ser feita utilizando o espectro intercalado pertencente a um sistema modificado com outras condições de contorno. Por exemplo, fixar o extremo livre a um vínculo por meio de uma mola com rigidez k_{n+1} , como mostra a Fig. 1.5. Este sistema modificado está caracterizado por uma equação semelhante a 1.1, onde a matriz massa é a mesma, e a matriz rigidez difere no último elemento diagonal. Neste caso o espectro intercalado é $(\mu_i)_1^n$, onde a condição de intercalamento está dada por

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \dots < \mu_{n-1} < \lambda_n < \mu_n. \quad (1.5)$$

Outra condição de contorno foi imposta posteriormente por Ram [47]. Ele considerou o caso quando uma massa m é aderida à massa m_n e então é fixada a um vínculo por meio de uma mola de rigidez k (Ver Fig. 1.6); a informação adicional da massa total é substituída pelos parâmetros osciladores m e k , onde o sistema modificado terá autovalores $(\mu_i)_1^n$. As condições para obter um sistema fisicamente real são mais *complexas* que as 1.3 e 1.5, mas a condição de intercalamento dos espectros permanece (Ver [47]). A reconstrução de M e K é diferente às anteriores, embora a essência é a mesma, isto é, previamente à reconstrução das matrizes massa e rigidez uma matriz de Jacobi deve ser obtida a partir dos espectros $(\lambda_i)_1^n, (\mu_i)_1^n$.

Todos os procedimentos descritos são relativos à reconstrução de uma matriz de Jacobi J . A reconstrução das matrizes massa e rigidez podem ser obtidas considerando a estrutura especial da matriz de rigidez. Os detalhes da reconstrução de M e K serão dados no Capítulo seguinte.

Figura 1.5: Sistema massa-mola modificado com uma mola adicional fixo-fixo.

Figura 1.6: Sistema massa-mola modificado com parâmetros oscilatórios.

Uma aplicação dos problemas inversos em teoria estrutural estão relacionados aos *problemas de detecção*. Quando uma estrutura muda ou sofre algum dano, suas frequências também mudam. Este fato abre a possibilidade de encontrar a quantia e localização das mudanças numa estrutura a partir das mudanças nas frequências naturais.

Wu e Fricke [58], [60], [61] estimaram o tamanho e localização de um bloqueio num tubo usando *frequências deslocamento*. Wu e Fricke em [62] consideraram um problema semelhante para uma cavidade retangular. Shen e Taylor em [52] minimizaram um funcional definido como os quadrados das frequências e modos deslocamento para encontrar uma falha de uma viga. Wu em [59] reconstrói uma *função falha integrada* a partir das frequências deslocamento. Shepard e Milani [53], Hearn e Testa [36], Morassi [43], Davini, Gatti e Morassi [12], Davini, Morassi e Novore [13] consideraram a localização de dano em vigas e estruturas usando deslocamento de frequências.

Agora, um amplo e atual campo de pesquisa, pertencente aos problemas de detecção, são os *problemas de identificação*, e os *problemas de projeto estrutural e otimização* para vibração de estruturas. Toda máquina e estrutura, tais como pontes, edifícios, e aeronaves possuindo massa e rigidez experimentam vibração em algum grau, e seu projeto está diretamente relacionado com seu comportamento oscilatório. Quando um sistema oscila devido às forças inerentes ao sistema e sem qualquer força externa agindo sobre ele é dito que o sistema vibra livremente em uma ou mais de suas frequências naturais. A vibração forçada ocorre quando o sistema oscila pela ação de forças externas. Se tal excitação é oscilatória, o sistema é forçado a vibrar na frequência de excitação. Quando a frequência de excitação coincide ou fica perto de uma das frequências naturais do sistema, perigosamente podem ocorrer grandes oscilações encontrando-se uma condição de *ressonância*. Esta condição é bem conhecida em problemas de vibração e

devido à sua natureza catastrófica, especialmente quando esta ocorre nas frequências baixas, é analisada na primeira fase do projeto estrutural.

Principalmente em construção civil, uma estrutura está sujeita a cargas periódicas as quais não foram previamente planejadas. Por exemplo, máquinas rotativas ou dispositivos similares podem ser instalados posteriormente ao projeto original. Estes problemas usualmente são de baixa intensidade e diretamente relacionados à fadiga. O problema de *isolamento de frequências* consiste em remover as frequências naturais da estrutura de uma certa *banda de ressonância*, onde alguma fonte de vibração externa opera. Joseph em [38] apresenta um método para o projeto de uma estrutura cujas frequências baixas são especificadas. O método é baseado no método de Newton-Raphson e pode ser usado para isolar as frequências que ficam dentro de certas bandas, determinando *algum* sistema estrutural livre de ressonância. O método é limitado somente às frequências baixas do espectro. Para um número maior de frequências o método fica extremamente caro do ponto de vista computacional.

Um problema mais *geral* é isolar as frequências indesejadas de uma ou mais bandas, gerando um novo espectro de frequências, e a partir deste, reconstruir um novo sistema estrutural minimizando o impacto de re-projeto relativo ao sistema inicial. Neste trabalho é desenvolvido um método numérico inverso de autovalor para resolver o problema geral. A fim de minimizar o impacto de re-projeto a escolha entre as soluções inversas é aquela que minimiza as mudanças nas propriedades estruturais. Para tal um espectro auxiliar é necessário. Um modelo simples, um modelo massa-mola com n graus de liberdade (Ver Fig. 1.3), é usado para demonstrar a viabilidade e potencial da técnica.

No Capítulo 2, descreve-se uma estratégia para remover as frequências de uma banda previamente especificada, e também é proposto um algoritmo de busca unidimensional do espectro auxiliar para minimizar o impacto de re-projeto do sistema. Em sistemas massa-mola o espectro auxiliar é o *espectro intercalado*. A estratégia unidimensional é limitada somente ao isolamento de frequências centrais. Quando a banda contém frequências baixas, as soluções são altamente sensíveis. Além disso, a estratégia está restrita a valores pequenos de n , fazendo-se necessário o desenvolvimento de outras estratégias (Ver também [16]).

Uma outra tentativa para determinar uma solução do problema geral em sistemas massa-mola, é aplicar a chamada *força bruta*, isto é, minimizar uma função cujas incógnitas são as massas e constantes de rigidez de um sistema massa-mola. Esta técnica implica calcular, em cada passo do processo de minimização, os autovalores e autovetores do sistema, tornando-se um procedimento computacionalmente caro, embora seja seguro. Este fato, motiva o desenvolvimento de uma técnica mais sofisticada e eficiente do ponto de vista numérico.

Uma técnica novedosa e eficiente é uma generalização da estratégia unidimensional, isto é, definir uma função objetivo onde o espectro intercalado é a incógnita. Esta estratégia permite

reconstruir, em cada passo do processo de minimização, um sistema $(M(\mu), K(\mu))$ com autovaleores desejados até atingir o sistema objetivo. A nova metodologia reduz em $n + 2$ o número de variáveis, com relação à força bruta. O método de minimização usado é do tipo região de confiança o qual minimiza uma função de várias variáveis com restrição de canalização, como em 1.11. Na implementação, é necessário calcular, precisamente o vetor gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo. Isto implica que, uma análise de sensibilidade das matrizes massa e rigidez com relação ao espectro intercalado é necessário. Como a reconstrução do sistema $(M(\mu), K(\mu))$ é precedida pela reconstrução de uma matriz de Jacobi $J(\mu)$, deve-se estudar a sensibilidade de $J(\mu)$. No Capítulo 3 é feito um estudo da sensibilidade de uma matriz de Jacobi com relação ao espectro intercalado. Aqui é desenvolvido um método numérico direto, baseado no algoritmo de Lanczos, que determina a sensibilidade de $J(\mu)$ com exatidão numérica. Este método é chamado *método δ -Lanczos* (Ver também [15]). A mesma técnica é usada para estender o método δ -Lanczos para derivadas de ordem mais alta. Posteriormente, no Capítulo 4 apresentamos um método numérico para determinar as sensibilidades das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$. Este método permite calcular as derivadas de primeira e segunda ordem determinando assim o vetor gradiente e a matriz Hessiana de $F(\mu)$, necessários para resolver o problema variacional 1.10, 1.11.

A unicidade da reconstrução inversa de um sistema massa-mola depende da especificação de um fator adicional, por exemplo, a *massa total* m_T do sistema. Este fato, a princípio, sugere manter m_T constante na busca do mínimo. Experimentos numéricos indicam que existem vários pontos mínimos locais da função objetivo entorno do mínimo, e provavelmente, os mínimos locais *ficam presos em pontos estacionários*, não permitindo encontrar uma direção de descida ao mínimo. Portanto, uma reformulação do problema, onde a massa total é considerada uma variável independente, é considerado depois, permitindo relaxar o processo de minimização na busca do mínimo. Os resultados numéricos obtidos da estratégia multidimensional são apresentados no Cap 5. Todos os exemplos considerados confirmam que a estratégia multidimensional é eficiente, a qual permite identificar as mudanças que devem ser feitas nas propriedades físicas de um sistema massa-mola sujeito a ressonância. Finalmente, no Cap 6 são estabelecidas algumas conclusões sugerindo linhas de pesquisa no futuro.

Capítulo 2

Estrategia Unidimensional para o Isolamento de Frequências Naturais em Sistemas Discretos Massa-Mola

2.1 Formulação do Problema

O principal objetivo deste trabalho é desenvolver uma tecnologia eficiente e robusta para determinar uma solução numérica do seguinte problema:

PROBLEMA IFSMM: *Isolamento de Frequências em Sistemas Massa-Mola*

Considerar um sistema massa-mola vibrando longitudinalmente com n massas $\bar{m}_i$ conectadas por molas lineares de rigidez $(\bar{k}_i)_1^n$. Este sistema será denotado pelo par $(\bar{M}, \bar{K})$, onde suas frequências naturais (ou simplesmente autovalores) $(\bar{\lambda}_i)_1^n$ são arranjados em ordem ascendente. Define-se a função diferenciável $H : \Re^{2n} \rightarrow \Re$ por

$$H(m_1, m_2, \dots, m_n, k_1, k_2, \dots, k_n) = \sum_{j=1}^n (m_j - \bar{m}_j)^2 + \sum_{j=1}^n (k_j - \bar{k}_j)^2, \quad (2.1)$$

onde as variáveis $(m_j, k_j)_1^n$ são os parâmetros físicos de um sistema massa-mola (M, K) .

Dada uma banda de ressonância $\beta(c; r) \subset \Re$ com *centro* c e *raio* r (Ver Fig 1.1) contendo um ou mais autovalores $\bar{\lambda}_i$, suponha-se que $(m_j^*, k_j^*)_1^n$ correspondem as massas e constantes de rigidez do sistema (M^*, K^*) , o *problema de isolamento de frequências* consiste em determinar um espectro $(\lambda_i^*)_1^n$, com $\lambda_i^* < \lambda_{i+1}^*$, correspondente a (M^*, K^*) tal que as seguintes condições sejam satisfeita :

- (i) $\lambda_i^* \notin \beta(c; r), \forall i, i = 1, 2, \dots, n$, e
- (2i) $(m_1^*, m_2^*, \dots, m_n^*, k_1^*, k_2^*, \dots, k_n^*)$ é um ponto mínimo de H .

Figura 2.1: Banda de ressonância com centro c e raio r

Este problema surgiu com a necessidade de identificar um sistema objetivo a partir dos autovalores, tendo uma motivação especial na aplicação em projeto estrutural. Isto é, tentar identificar quais são as mudanças nas propriedades estruturais que devem ser feitas numa estrutura sujeita a vibração. Trabalhos relacionados com este problema, mas aplicando tecnologias diferentes foram desenvolvidos por Udwadia, Garba, e Ghodsi [56], Torkamani e Ahmadi [55], e Joseph [38].

2.2 Reconstrução de uma Matriz de Jacobi

Neste Capítulo será descrito uma estratégia unidimensional para a solução do problema **IFSMM**. A técnica é baseada numa método inverso de autovalor para reconstruir um sistema massa-mola a partir dos autovalores. A reconstrução de um sistema massa-mola passa pela reconstrução prévia de uma matriz de Jacobi J . Isto será descrito com detalhes na Seção 2.3, mas um algoritmo de reconstrução de J desenvolvido por Golub e Boley [31], e de Boor e Golub [14] é apresentado primeiro. O método está baseado no algoritmo de Lanczos que reduz qualquer matriz simétrica à forma tridiagonal, começando com a própria matriz e um certo vetor unitário. O método é brevemente discutido. Um tratamento completo do algoritmo de Lanczos é apresentado em [14], [26], [31], [32], [40], [45].

Supondo que $V = [v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n)}]$ é a matriz de autovetores de J , onde as colunas de V satisfazem a propriedade de ortogonalidade

$$(v^{(i)})^T v^{(j)} = \delta_{ij}. \quad (2.2)$$

A matriz V satisfaz

$$JV = V\Lambda$$

ou

$$QJ = \Lambda Q, \quad (2.3)$$

onde $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$, e $Q = [q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(n)}] = V^T$. Claramente, a eq 2.2 leva

$$(q^{(i)})^T q^{(j)} = \delta_{ij}, \quad (2.4)$$

onde o vetor $q^{(i)}$ é a i -ésima linha da matriz de autovetores de J . A matriz diagonal Λ e a primeira (ou última) linha de V formam os dados para o seguinte

ALGORITMO 2.1: (*algoritmo de Lanczos*) Dada a matriz diagonal $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ e $q^{(1)}$ (ou $q^{(n)}$) correspondente à primeira (ou última) linha da matriz de autovetores, este produz uma matriz J e, ao mesmo tempo, constrói os autovetores ortogonais de J :

Definir $b_0 := 1, q^{(0)} := 0$

$a_1 := (q^{(1)})^T \Lambda q^{(1)}$

Para $j = 1, \dots, n-1$

$r^{(j+1)} := (\Lambda - a_j I)q^{(j)} - b_{j-1}q^{(j-1)}$

$b_j := \|r^{(j+1)}\|_2$

$q^{(j+1)} := \frac{r^{(j+1)}}{b_j}$

$a_{j+1} := (q^{(j+1)})^T \Lambda q^{(j+1)}$

Quando a última linha da matriz de autovetores é especificada, o algoritmo 2.1 produz a matriz J no sentido oposto, isto é, $a_n, b_{n-1}, a_{n-1}, b_{n-2}, \dots, b_2, a_2, b_1, a_1$.

Com uma implementação adequada o algoritmo 2.1 tem um custo computacional de $O(n^2)$ operações. Quando algum $b_j = 0$ o algoritmo falha, mas devido à influência de erros de arredondamento, isso raramente ocorre na prática. Em teoria, o algoritmo gerará q_j ortogonais, mas os vetores calculados podem ficar cada vez menos ortogonais quando j é incrementado. Estes defeitos podem ser corrigidos re-ortogonalizando o novo vetor calculado $q^{(j+1)}$ em relação

a todos os vetores prévios $q^{(j)}$, produzindo os vetores ortogonais com precisão de máquina. Este procedimento leva ao algoritmo chamado *Lanczos com ortogonalização completa*:

ALGORITMO 2.2:

Definir $b_0 := 1, q^{(0)} := 0$

Determinar $P_0 = I - 2z^{(0)}(z^{(0)})^T / (z^{(0)})^T z^{(0)}$ tal que $P_0 r^{(1)} = e^{(1)}$

$a_1 := (q^{(1)})^T \Lambda q^{(1)}$

Para $j = 1, \dots, n-1$

$$r^{(j+1)} := (\Lambda - a_j I)q^{(j)} - b_{j-1}q^{(j-1)}$$

$$w := (P_{j-1} \cdots P_0)r^{(j)}$$

Determinar $P_j = I - 2z^{(j)}(z^{(j)})^T / (z^{(j)})^T z^{(j)}$ tal que

$$P_j w = (w_1, \dots, w_j, b_j, 0, \dots, 0)^T$$

$$q^{(j+1)} := (P_0 \cdots P_j)e^{(j+1)}$$

$$a_{j+1} := (q^{(j+1)})^T \Lambda q^{(j+1)}$$

As matrizes P_j são as *matrizes de Householder* do vetor w . O processo de ortogonalização completa eleva a complexidade a $O(n)$ operações. Portanto, o algoritmo 2.2 tem uma complexidade total de $O(n^3)$ operações.

Certamente que os algoritmos 2.1 e 2.2 podem ser aplicados sempre que os vetores $q^{(1)}$ ou $q^{(n)}$ sejam conhecidos. Golub e Boley [31] mostraram que, uma vez conhecidos os autovalores $(\lambda_i)_1^n$ e $(\mu_i)_1^{n-1}$ satisfazendo a condição de intercalamento 1.3, as componentes de $q^{(n)}$ podem ser construídas considerando os valores estacionários de

$$f = v^T J v, \tag{2.5}$$

$$\text{sujeito a : } v^T v = 1; v^T c = 0 \tag{2.6}$$

onde c é algum vetor tal que $c^T c = 1$. Eles provaram que se os valores estacionários de 2.5, 2.6 são prescritos como sendo os μ_i , então as componentes do vetor $d = Qc$, satisfazem

$$d_i^2 = \frac{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^{n-1} (\lambda_j - \lambda_i)}. \quad (2.7)$$

Se $c = e_n \equiv (0, 0, \dots, 1)^T$ então os valores estacionários de 2.5- 2.6 são precisamente os autovalores de $\tilde{J}$, e o vetor d é a última linha de V (ou última coluna de Q). Assim a fórmula para as últimas componentes dos autovetores está dada por

$$(v_n^{(i)})^2 \equiv (q_i^{(n)})^2 = \frac{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^{n-1} (\lambda_j - \lambda_i)} \quad (2.8)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

2.3 Reconstrução de Sistemas Massa-Mola

Para descrever a estratégia unidimensional que determina uma solução numérica do problema IFSMM, formulado na Seção 2.1, será delineado um método de reconstrução de sistemas massa-mola a partir dos autovalores. Este método é considerado inverso desde que, na teoria clássica em vibração, o método direto consiste em determinar os autovalores e/ou autovetores do sistema dado.

Considerar um sistema massa-mola unidimensional consistindo de n massas m_i conectadas por molas lineares de rigidez $(k_i)_1^n$, onde a primeira mola é fixada e a última massa é livre (Ver Fig. 1.3). Este sistema é caracterizado pela equação de autovalor generalizada

$$(K - \lambda_i M)u^{(i)} = 0, \quad (2.9)$$

onde os autovetores $u^{(i)}$ estão relacionados aos deslocamentos das massas. A matriz de rigidez tem a forma

$$K = \begin{pmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 & & & \\ -k_2 & k_2 + k_3 & -k_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -k_{n-1} & k_{n-1} + k_n & -k_n \\ & & & -k_n & k_n \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

e a matriz de massa $M = \text{diag}\{m_1, m_2, \dots, m_n\}$. Este sistema é fisicamente realizável se consiste de massas e constantes de rigidez positivas, isto é, $m_i > 0$ e $k_i > 0$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Estas propriedades implicam que M e K são matrizes definidas positivas. Além disso, como K é também tridiagonal simétrica, os autovalores são reais, positivos, e distintos (Ver [26]).

Antes de descrever o método inverso para a reconstrução do sistema (M, K) a partir dos autovalores, a equação 2.9 será reduzida à forma clássica do problema de autovalor. Seja

$$M = BB^T, \quad (2.11)$$

onde

$$B = B^T = \text{diag}\{m_1^{1/2}, m_2^{1/2}, \dots, m_n^{1/2}\}, \quad (2.12)$$

introduz-se o vetor $v^{(i)}$ relacionado a $u^{(i)}$ por

$$v^{(i)} = B^T u^{(i)}, \quad u^{(i)} = (B^T)^{-1} v^{(i)}. \quad (2.13)$$

Se a equação 2.9 é pre-multiplicada por B^{-1} , obtém-se

$$(J - \lambda_i I) v^{(i)} = 0. \quad (2.14)$$

onde

$$J = B^{-1} K (B^T)^{-1}. \quad (2.15)$$

Assim, a matriz J é tridiagonal simétrica definida positiva com os mesmos autovalores do par (M, K) . Claramente, a relação 2.15 implica que os elementos diagonais e co-diagonais de J são positivos e estritamente negativos, respectivamente. Por outro lado, os polinômios característicos das submatrizes principais de J ficam invariantes sob transformações diagonalmente similares DJD , onde $D = \text{diag}\{(-1)^i, i = 1, 2, \dots, n\}$. Segue-se, portanto que, sem perda de generalidade, os elementos diagonais e co-diagonais serão assumidos estritamente positivos.

Gantmakher e Krein [18] provaram que as massas e constantes de rigidez do sistema (M, K) podem ser reconstruídas unicamente se a seguinte informação é dada :

- (1) os autovalores $(\lambda_i)_1^n$ de 2.9,
- (2) os autovalores $(\mu_i)_1^{n-1}$ correspondentes ao sistema auxiliar com extremo direito fixo, como mostra a Fig. 1.4,

(3) um fator adicional, por exemplo, a massa total do sistema $m_T = \sum_{i=1}^n (m_i)$.

A equação que caracteriza o sistema com extremo direito fixo é dada por

$$(\tilde{K} - \mu_i \tilde{M}) \tilde{u}^{(i)} = 0, \quad (2.16)$$

onde as matrizes $\tilde{M}$ e $\tilde{K}$ são as *submatrizes principais superiores* que resultam ao eliminar a última linha e coluna das matrizes M e K , respectivamente. Como na equação 2.9, a equação anterior pode ser reduzida à equação de autovalor

$$(\tilde{J} - \mu_i I) \tilde{v}^i = 0, \quad (2.17)$$

onde $\tilde{J}$ é a submatriz principal superior de J .

A *propriedade de intercalamento* 1.3, isto é,

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \dots < \mu_{n-1} < \lambda_n. \quad (2.18)$$

é condição necessária e suficiente para a existência de um sistema fisicamente real, onde os autovalores $(\mu_i)^{n-1}$ são chamados *espectro intercalado*. A reconstrução do sistema é realizada em duas partes; primeiro a matriz J de 2.14 é reconstruída usando o algoritmo de Lanczos 2.1 ou 2.2. Uma vez que J é obtida, e considerando a relação 2.15, a segunda parte consiste em separar as massas e constantes de rigidez de J .

Para descrever o procedimento de reconstrução das matrizes M e K , considera-se uma forma particular da última, isto é,

$$K(1, 1, \dots, 1)^T = (k_1, 0, \dots, 0)^T. \quad (2.19)$$

Reescrevendo 2.19 na forma

$$B J B(1, 1, \dots, 1)^T = (k_1, 0, \dots, 0)^T, \quad (2.20)$$

ou, equivalentemente,

$$J(m_1^{1/2}, m_2^{1/2}, \dots, m_n^{1/2})^T = (k_1 m_1^{-1/2}, 0, \dots, 0)^T, \quad (2.21)$$

segue-se que, se $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T \neq 0$, é solução do sistema

$$Jy = e_1, \quad (2.22)$$

onde $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$, então

$$(m_1^{1/2}, m_2^{1/2}, \dots, m_n^{1/2})^T = k_1 m_1^{-1/2} y. \quad (2.23)$$

Isto implica que

$$k_1^2 = \frac{m_i m_1}{y_i^2}, i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.24)$$

Assim,

$$\frac{m_1}{m_i} y_i^2 = \frac{m_1}{m_n} y_n^2, i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (2.25)$$

ou, equivalentemente,

$$m_i = m_n \left(\frac{y_i}{y_n} \right)^2, i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (2.26)$$

Por outro lado, tem-se

$$m_T = \sum_{i=1}^n m_i. \quad (2.27)$$

Se m_T é conhecida, então, pela relação 2.26, a última massa do sistema é dada por

$$m_n = \frac{m_T}{1 + \sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{y_i}{y_n} \right)^2}, \quad (2.28)$$

e por tanto, a matriz de massa é totalmente determinada. Para determinar a matriz de rigidez pode usar-se a relação 2.15, isto é,

$$K = (B^T)^{-1} J B^{-1}. \quad (2.29)$$

Resumindo, a reconstrução do sistema pode ser obtida através do seguinte

ALGORITMO 2.3:

Dados os espectros $(\lambda_i)_1^n$, $(\mu_i)_1^{n-1}$, e a massa total m_T do sistema:

1. Reconstruir a matriz de Jacobi J a partir de $(\lambda_i)_1^n$ e $(\mu_i)_1^{n-1}$ (Ver os algoritmos 2.1 e 2.2 da Sação 2.2).

2. Resolvendo o sistema 2.22, determinar $(y_i)_1^n$.
3. Calcular m_n de 2.28.
4. Usando 2.26, encontrar $(m_i)_1^{n-1}$.
5. $M = \text{diag}\{m_1, m_2, \dots, m_n\}$ e $K = (B^T)^{-1}JB^{-1}$, onde B é dada por 2.12.

A reconstrução de um sistema massa-mola (M, K) é baseado essencialmente na informação auxiliar do espectro intercalado $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$. Isto implica que a reconstrução de (M, K) pode considerar-se em função de μ , isto é, *fixado* os autovalores $(\lambda_i)_1^n$ é possível obter diferentes sistemas (M, K) , para cada espectro intercalado μ . A função H de 2.1 considera as massas e constantes de rigidez como as *incógnitas*, então uma estratégia imediata para resolver o problema IFSMM é aplicar a chamada *força bruta*, isto é, determinar um sistema massa-mola e seus autovalores em cada passo de um processo de otimização até obter o sistema objetivo. Esta técnica é segura, mas tem uma eficiência computacional muito pobre, já que na avaliação da função objetivo e seu correspondente vetor gradiente é necessário o cálculo dos autovalores e autovetores de (M, K) . Estes fatos são discutidos em mais detalhe no Cap 5.

Uma estratégia diferente, de maior eficiência computacional, é considerar uma função objetivo onde o *espectro intercalado é incognita*. Isto implica que, usando o método de reconstrução inversa em cada passo do processo de otimização usado, um sistema com os *autovalores desejados* será determinado até atingir o sistema objetivo. Esta *nova* técnica evidentemente diminua o número de variáveis da função objetivo em $n - 1$, e não necessita o cálculo dos autovalores e autovetores em cada passo do processo de minimização. Na Seção seguinte descreve-se uma estratégia de busca unidimensional do espectro intercalado para avaliar o potencial da técnica. Os resultados numéricos confirmam a eficiência da nova técnica utilizada neste trabalho.

2.4 Estratégia Unidimensional para Solução Numérica do Problema IFSMM

Dado um sistema massa-mola, nesta Seção, apresenta-se uma estratégia para isolar os autovalores que estão contidos numa banda previamente estabelecida minimizando o impacto no re-projeto do sistema. A estratégia é baseada numa técnica inversa de autovalor e um conjunto de decisões empíricas dirigidas a minimizar o tempo computacional (Ver [16]). Primeiro, descreve-se um procedimento para isolar os autovalores *indesejados*, isto é, os que ficam dentro da banda, e posteriormente a estratégia que minimiza o impacto de re-projeto.

Sejam $(\bar{M}, \bar{K})$ um sistema massa-mola inicial com autovalores $(\bar{\lambda}_i)_1^n$, $\bar{\lambda}_i < \bar{\lambda}_{i+1}$, e $\beta(c; r)$ uma banda de ressonância. Se alguns dos autovalores estão dentro de $\beta(c; r)$, deve especificar-se novos

valores para eles. Uma estratégia para determinar o novo espectro *livre* de ressonância, isto é, fora de $\beta(c; r)$, consiste em re-definir apenas os autovalores que estão em $\beta(c; r)$ mantendo o resto inalterado. Isto justifica-se porque grandes mudanças no espectro implicam grandes mudanças nos parâmetros físicos do sistema.

A fim de descrever o procedimento, primeiro é assumido que os autovalores que estão contidos na banda são distribuídos da seguinte forma:

$$\bar{\lambda}_i \in \begin{cases} (c - r, c] & , i = k, k + 1, \dots, l \\ (c, c + r) & , i = l + 1, l + 2, \dots, m \end{cases} , \quad (2.30)$$

onde os índices k e m satisfazem $1 < k \leq m < n$ (Ver Fig. 2.2).

Figura 2.2: Distribuição dos autovalores dentro da banda.

Tendo em conta a ordem ascendente, uma possibilidade para isolar os autovalores indesejados é, remover os autovalores que estão dentro do intervalo $(c - r, c]$ pela relação

$$\lambda_i^* = \bar{\lambda}_{k-1} + \frac{(\bar{\lambda}_i - c + r)(c - r - \bar{\lambda}_{k-1})}{r}, \quad (2.31)$$

com $i = k, k + 1, \dots, l$. Enquanto que, para $i = l + 1, l + 2, \dots, m$, a relação

$$\lambda_i^* = c + r + \frac{(\bar{\lambda}_{m+1} - c - r)(\bar{\lambda}_i - c)}{r}, \quad (2.32)$$

é a que remove os autovalores que estão em $(c, c + r)$. Por outro lado, a fim de não provocar grandes mudanças no re-projeto do sistema, os autovalores que estão fora da banda são mantidos, isto é,

$$\lambda_i^* = \bar{\lambda}_i, \forall i \neq j, j = k, k + 1, \dots, m. \quad (2.33)$$

Assim, as eqs. 2.31, 2.32, 2.33 definem um procedimento para determinar o novo espectro $(\lambda_i^*)_1^n$ livre de ressonância, como mostra a Fig.2.3.

Figura 2.3: Distribuição dos autovalores isolados da banda.

Uma vez removido o espectro indesejável, é usada uma estratégia inversa para reconstruir um sistema (M, K) com autovalores $(\lambda_i^*)_1^n$ minimizando o erro L_2 da reconstrução das massas e constantes de rigidez relativo ao sistema original $(\bar{M}, \bar{K})$. A fim de usar o algoritmo 2.1, o espectro intercalado $(\mu_i)_1^n$ é calculado através de um algoritmo de busca unidimensional, isto é, para $i = 1, 2, \dots, n-1$

$$\mu_i = \lambda_i^* + s(\lambda_{i+1}^* - \lambda_i^*), \quad (2.34)$$

com valores discretos $s = 1/t$, onde $t \in \mathfrak{R}$ é escolhido para satisfazer a condição (2i) do Problema IFSMM. Evidências numéricas mostram que, em certos casos, somente a última massa e primeira rigidez mudam significativamente, assim, como uma estratégia natural, a última massa e primeira rigidez são igualadas às originais uma vez que o processo de busca é terminado. No exemplo numérico discutido na Seção seguinte, mostra-se que os novos autovalores estão fora da banda indesejada.

2.5 Resultados Computacionais

Para mostrar a efetividade da estratégia descrita na Seção anterior um exemplo numérico simples é considerado. Seja $(\bar{M}, \bar{K})$ um sistema massa-mola com 10 graus de liberdade, com relação a vibrações longitudinais. Cada massa $\bar{m}_i$ será originalmente igual a 1.0, e cada mola com rigidez $\bar{k}_i$ igual a 2.0. Esta escolha proporciona um espectro inicial $(\bar{\lambda}_i)_1^n$, o qual é listado na primeira coluna das Tabelas 2.1, 2.2, 2.3, e 2.4 .

A eficiência do algoritmo é avaliada com três testes diferentes; primeiro, é considerada uma

banda que não contém nenhum autovalor. Logo depois, uma contendo um autovalor, e finalmente uma com dois.

São definidos os erros

$$E_m = \frac{\sum_{i=1}^n (m_i - \bar{m}_i)^2}{n}, E_k = \frac{\sum_{i=1}^n (k_i - \bar{k}_i)^2}{n}, \quad (2.35)$$

onde $(m_i, k_i)_1^n$ são os valores de massa e rigidez do sistema obtido depois que o procedimento é aplicado. Para o primeiro teste, o resultado ideal ocorre se não existe erro. A Fig. 2.4a mostra os erros E_m e E_k como funções de t , com os valores mínimos $E_{m*} = 2.097e-02$ e $E_{k*} = 3.802e-02$. O método inverso garante que o espectro do sistema recuperado é igual ao espectro objetivo, neste caso, o próprio $\bar{\lambda}_i$, pois nenhum autovalor foi isolado (Ver Tab. 2.1).

Experimentos numéricos mostram que quando são impostas as restrições $m_{10} = \bar{m}_{10}$ e $k_1 = \bar{k}_1$, encontram-se melhores valores mínimos $E_{m*} = 1.246e-02$ e $E_{k*} = 1.4000e-02$, ambos da ordem 1% (Ver Fig. 2.4b). Uma vez que, as restrições das massas e molas são aplicadas e o espectro do novo sistema é re-calculado, pode verificar-se que - comparando as últimas duas colunas da Tabela 2.2 com a primeira - o procedimento é aproximado.

Agora, suponha-se que é especificada uma banda com centro $c = 4.5$ e raio $r = 0.3$. Neste caso o autovalor $\bar{\lambda}_6$ deve ser removido. Usando as equações 2.31, 2.32, 2.33, um novo espectro livre de ressonância é listado na segunda coluna da Tabela 2.3. Com este novo espectro objetivo e impondo as mesmas restrições anteriores sob a massa m_{10} e a mola de rigidez k_1 , obtém-se um valor mínimo para E_{m*} do ordem 10%, e do 1% para E_{k*} (Fig. 2.5a).

Observa-se da Fig. 2.5b que os erros E_m e E_k crescem quando o número de autovalores dentro da banda é melhor, neste caso $\bar{\lambda}_5$ e $\bar{\lambda}_6$ pertencem à banda $\beta(3.5; 0.9)$. Uma vez re-calculado o espectro pode verificar-se (Tabelas 2.3 e 2.4) que o procedimento assegura que o novo espectro está fora da banda.

Esta estratégia é limitada somente ao isolamento de frequências centrais. Quando $\beta(c; r)$ contém autovalores extremos, as soluções são altamente sensíveis. Além disso, a estratégia está restrita para valores pequenos de n , fazendo-se necessário o desenvolvimento de outras estratégias.

Figura 2.4: Comparação entre os sistemas original e inverso. Com frequências não isoladas; (a) sem restrição, (b) com restrição.

Figura 2.5: Comparação entre os sistemas original e inverso, impondo a restrição sob m_{10} e k_1 ; (a) $\lambda_6 \in B(4.5; 0.3)$, (b) $\lambda_5, \lambda \in B(3.5; 0.9)$.

Tabela 2.1:

i	$\bar{\lambda}_i$	$\lambda_i^*, t_{m^*} = 2.5$	$\lambda_i^*, t_{k^*} = 2.9$
		sr	sr
1	4.467e-02	4.467e-02	4.467e-02
2	0.3961	0.3961	0.3961
3	1.0677	1.0677	1.0677
4	2.0000	2.0000	2.0000
5	3.1099	3.1099	3.1099
6	4.2989	4.2989	4.2989
7	5.4613	5.4613	5.4613
8	6.4939	6.4939	6.4939
9	7.3049	7.3049	7.3049
10	7.8222	7.8222	7.8222

Tabela 2.2:

i	$\bar{\lambda}_i$	$\lambda_i^*, t_{m^*} = 2.9$	$\lambda_i^*, t_{k^*} = 3.3$
		cr	cr
1	4.467e-02	4.409e-02	4.432e-02
2	0.3961	0.3929	0.3921
3	1.0677	1.0538	1.0464
4	2.0000	1.9703	1.9547
5	3.1099	3.0652	3.0438
6	4.2989	4.2434	4.2195
7	5.4613	5.4005	5.3758
8	6.4939	6.4327	6.4071
9	7.3049	7.2455	7.2184
10	7.8222	7.7409	7.7052

Tabela 2.3:

i	$\bar{\lambda}_i$	λ_i^*	$\lambda_i^*, t_{m^*} = 3.4$	$\lambda_i^*, t_{k^*} = 3.0$
			cr	cr
1	4.467e-02	4.467e-02	4.090e-02	4.092e-02
2	0.3961	0.3961	0.3630	0.3643
3	1.0677	1.0677	0.9792	0.9861
4	2.0000	2.0000	1.8468	1.8566
5	3.1099	3.1099	2.8879	2.8474
6	4.2989	3.4693	3.4396	3.4538
7	5.4613	5.4613	5.2574	5.3083
8	6.4939	6.4939	6.3444	6.3795
9	7.3049	7.3049	7.1887	7.2175
10	7.8222	7.8222	7.6908	7.7229

Tabela 2.4:

i	$\bar{\lambda}_i$	λ_i^*	$\lambda_i^*, t_{m^*} = 4.4$	$\lambda_i^*, t_{k^*} = 2.6$
			cr	cr
1	4.467e-02	4.467e-02	3.821e-02	3.920e-02
2	0.3961	0.3961	0.3357	0.3433
3	1.0677	1.0677	0.8961	0.8965
4	2.0000	2.0000	1.5606	1.4065
5	3.1099	2.3399	1.9417	2.1157
6	4.2989	5.3421	4.5866	4.7828
7	5.4613	5.4613	5.2012	5.2865
8	6.4939	6.4939	6.2646	6.3927
9	7.3049	7.3049	7.1283	7.2358
10	7.8222	7.8222	7.6335	7.7505

Capítulo 3

Análise de Sensibilidade de Matrizes de Jacobi

Uma generalização do método apresentado no Capítulo anterior, o qual manipula outras frequências do espectro, consiste em formular um problema de otimização baseado num algoritmo de busca multidimensional para o espectro intercalado desconhecido. Para esta finalidade, define-se uma função objetivo

$$F(\mu) = \sum_{j=1}^n (m_j(\mu) - \bar{m}_j)^2 + \sum_{j=1}^n (k_j(\mu) - \bar{k}_j)^2, \quad (3.1)$$

onde $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$ é o espectro intercalado relativo ao espectro objetivo $(\lambda_i^*)_1^n$, $(m_i(\mu), k_i(\mu))_1^n$ são as massas e constantes de rigidez reconstruídas a partir de $(\mu_i)_1^{n-1}$ e $(\lambda_i^*)_1^n$, e $(\bar{m}_i, \bar{k}_i)_1^n$ são as massas e constantes de rigidez originais. Uma vez definida a função objetivo, o problema é formulado como:

$$\text{Minimizar} \quad F(\mu) \quad (3.2)$$

$$\text{sujeito a :} \quad \lambda_j^* < \mu_j < \lambda_{j+1}^*, j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.3)$$

Como a reconstrução de um sistema (M, K) é precedida pela reconstrução de uma matriz de Jacobi J , para resolver 3.2- 3.3, é necessário estudar a sensibilidade de J com relação ao espectro intercalado μ , o qual é o objetivo deste Capítulo. A solução de 3.2, 3.3 será tratada no Cap 5. A análise de sensibilidade da matriz de Jacobi

$$J(\mu) = \begin{pmatrix} a_1(\mu) & b_1(\mu) & & & \\ b_1(\mu) & a_2(\mu) & b_3(\mu) & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{n-2}(\mu) & a_{n-1}(\mu) & b_{n-1}(\mu) \\ & & & b_{n-1}(\mu) & a_n(\mu) \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

analiticamente dependente nas $(n-1)$ -variáveis $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}$, é o estudo de como os elementos da matriz são afetados pelas mudanças nas variáveis. Tal informação é muito importante para resolver o problema variacional 3.2, 3.3, e em geral para projeto estrutural e otimização.

Nosso objetivo neste Capítulo é calcular a derivada exata da matriz $J(\mu)$, em relação a cada variável $\mu_k, k = 1, 2, \dots, n-1$. Neste trabalho uma derivada é considerada exata exceto por erros de arredondamento. A derivada parcial da matriz $J(\mu)$ com relação a uma variável μ_k é denotada por $\delta_k J(\mu)$, onde os elementos diagonais e co-diagonais de $\delta_k J(\mu)$ são $\delta_k a_j(\mu) \equiv \frac{\partial a_j(\mu)}{\partial \mu_k}$ e $\delta_k b_j(\mu) \equiv \frac{\partial b_j(\mu)}{\partial \mu_k}$, respectivamente.

Nesta Seção é discutido como obter as derivadas exatas e aproximadas de $J(\mu)$. A aproximação por diferenças finitas e suas implicações são descritas primeiro. Logo depois, uma extensão do método de Lanczos para calcular a matriz $\delta_k J(\mu)$, chamado *método δ -Lanczos* é discutido (Ver também [15]).

3.1 Aproximação por diferenças finitas

A aproximação por diferenças centradas de segunda ordem é usada para aproximar $\delta_k J(\mu)$. Se cada $a_j(\mu), b_j(\mu)$, calculado pelo algoritmo de Lanczos com ou sem ortogonalização, são denotados por uma função $f_j(\mu)$ das variáveis μ_k , a aproximação por diferenças centradas $\frac{\Delta f_j(\mu)}{\Delta \mu_k}$ para a sensibilidade $\delta_k f_j(\mu) \equiv \frac{\partial f_j(\mu)}{\partial \mu_k}$ é dada por

$$\delta_k f_j(\mu) \simeq \frac{f_j(\mu_1, \dots, \mu_k + \Delta \mu_k, \dots, \mu_{n-1}) - f_j(\mu_1, \dots, \mu_k - \Delta \mu_k, \dots, \mu_{n-1})}{2\Delta \mu_k}. \quad (3.5)$$

A matriz $\delta_k J(\mu)$ aproximada pelo esquema por diferenças finitas centradas usando o algoritmo 2.1 (sem ortogonalização) requer aproximadamente $O(n^2)$ operações, enquanto o custo computacional é incrementado a $O(n^3)$ operações se a ortogonalização é usada. Por outro lado, se a derivada da matriz $J(\mu)$ é procurada para as $(n-1)$ variáveis, este método requer $(n-1)$ iterações adicionais do algoritmo 2.1 ou 2.2. Portanto, o trabalho computacional total é da ordem $O(n^4)$ operações. O trabalho computacional seria menor se a matriz $\delta_k J(\mu)$ fosse aproximada por um esquema diferenças finitas de primeira ordem.

Uma dificuldade da aproximação por diferenças finitas é a escolha de $\Delta\mu_k$. Devido à restrição de canalização 3.3, em cada passo iterativo de um método de minimização para resolver 3.2, 3.3 deve ser determinado o valor ótimo $\Delta\mu_k$. Resultados numéricos da aproximação por diferenças finitas são apresentados na Seção 3.2, e estes resultados são usados como referências para comparação com o método da Seção seguinte.

3.2 O método δ -Lanczos

A extensão do método de Lanczos para calcular as derivadas da matriz de Jacobi $J(\mu)$ em relação a $\mu_k, k = 1, 2, \dots, n - 1$ será chamado método δ -Lanczos. Este método recupera as matrizes $\delta_k J(\mu)$ quando são especificados a matriz diagonal $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ e $q^{(1)}(\mu)$ (ou $q^{(n)}(\mu)$) a primeira (ou última) linha da matriz de autovetores.

Supondo que a primeira coluna da eq 2.3 é conhecida, onde Q depende de μ , tem-se

$$a_1(\mu)q^{(1)}(\mu) + b_1(\mu)q^{(2)}(\mu) = \Lambda q^{(1)}(\mu), \quad (3.6)$$

de maneira que

$$a_1(\mu) = (q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu), \quad (3.7)$$

já que $(q^{(1)}(\mu))^T q^{(2)}(\mu) = 0$.

Diferenciando a eq 3.7 com relação a μ_k resulta em

$$\delta_k a_1(\mu) = (\delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu) + (q^{(1)}(\mu))^T \Lambda \delta_k q^{(1)}(\mu),$$

onde $\delta_k q^{(1)}(\mu)$ é obtida diferenciando-se o vetor $q^{(1)}(\mu)$, o qual é conhecido. Agora, como Λ é uma matriz diagonal, a equação anterior pode ser escrita como

$$\delta_k a_1(\mu) = 2(\delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu). \quad (3.8)$$

Por outro lado, definindo

$$\begin{aligned} r^{(2)}(\mu) &= \Lambda q^{(1)}(\mu) - a_1(\mu)q^{(1)}(\mu) \\ &= (\Lambda - a_1(\mu)I)q^{(1)}(\mu), \end{aligned} \quad (3.9)$$

e fazendo uso da eq 3.6, $b_1(\mu)$ deve ser escolhido de maneira

$$b_1(\mu) = \|r^{(2)}(\mu)\|_2, \quad (3.10)$$

e então

$$q^{(2)}(\mu) = \frac{r^{(2)}(\mu)}{b_1(\mu)}, \quad (3.11)$$

onde $\|\cdot\|_2$ denota a norma Euclidiana. Portanto, diferenciando as equações 3.9, 3.10, e 3.11, obtém-se

$$\delta_k r^{(2)}(\mu) = (\Lambda - a_1(\mu)I)\delta_k q^{(1)}(\mu) - \delta_k a_1(\mu)q^{(1)}(\mu), \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \delta_k b_1(\mu) &= \frac{r_1^{(2)}(\mu)\delta_k r_1^{(2)}(\mu) + r_2^{(2)}(\mu)\delta_k r_2^{(2)}(\mu) + \cdots + r_n^{(2)}(\mu)\delta_k r_n^{(2)}(\mu)}{((r_1^{(2)}(\mu))^2 + (r_2^{(2)}(\mu))^2 + \cdots + (r_n^{(2)}(\mu))^2)^{1/2}} \\ &= \frac{(r^{(2)}(\mu))^T \delta_k r^{(2)}(\mu)}{\|r^{(2)}(\mu)\|_2} \\ &= \frac{(r^{(2)}(\mu))^T \delta_k r^{(2)}(\mu)}{b_1(\mu)}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

e

$$\delta_k q^{(2)}(\mu) = \frac{b_1(\mu)\delta_k r^{(2)}(\mu) - \delta_k b_1(\mu)r^{(2)}(\mu)}{(b_1(\mu))^2}. \quad (3.14)$$

Uma vez que são achados $\delta_k a_1(\mu)$, $\delta_k b_1(\mu)$, o resto dos elementos da matriz $\delta_k J(\mu)$ são determinados. Isto é, a j -ésima coluna da eq 2.3 é:

$$b_{j-1}(\mu)q^{(j-1)}(\mu) + a_j(\mu)q^{(j)}(\mu) + b_j(\mu)q^{(j+1)}(\mu) = \Lambda q^{(j)}(\mu), \quad (3.15)$$

onde $q^{(j)}(\mu)$ foi determinado no passo prévio de maneira que $(q^{(j)}(\mu))^T q^{(j-1)}(\mu) = 0$. Isto implica que

$$a_j(\mu) = (q^{(j)}(\mu))^T \Lambda q^{(j)}(\mu), \quad (3.16)$$

e portanto

$$\delta_k a_j(\mu) = 2(\delta_k q^{(j)}(\mu))^T \Lambda q^{(j)}(\mu), \quad (3.17)$$

Além disso, definindo

$$\begin{aligned}
r^{(j+1)}(\mu) &= \Lambda q^{(j)}(\mu) - b_{j-1}(\mu)q^{(j-1)}(\mu) - a_j(\mu)q^{(j)}(\mu) \\
&= (\Lambda - a_1(\mu)I)q^{(j)}(\mu) - b_{j-1}(\mu)q^{(j-1)}(\mu),
\end{aligned} \tag{3.18}$$

o elemento $b_j(\mu)$ é igual a

$$b_j(\mu) = \|r^{(j+1)}(\mu)\|_2, \tag{3.19}$$

e

$$q^{(j+1)}(\mu) = \frac{r^{(j+1)}(\mu)}{b_j(\mu)}. \tag{3.20}$$

Finalmente, diferenciando as três últimas equações, obtém-se

$$\begin{aligned}
\delta_k r^{(j+1)}(\mu) &= (\Lambda - a_j(\mu)I)\delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_k a_j(\mu)q^{(j)}(\mu) \\
&\quad - \delta_k b_{j-1}(\mu)q^{(j-1)}(\mu) - b_{j-1}(\mu)\delta_k q^{(j-1)}(\mu),
\end{aligned} \tag{3.21}$$

$$\delta_k b_j(\mu) = \frac{(r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu)}{b_j(\mu)}, \tag{3.22}$$

e

$$\delta_k q^{(j+1)}(\mu) = \frac{b_j(\mu)\delta_k r^{(j+1)}(\mu) - \delta_k b_j(\mu)r^{(j+1)}(\mu)}{(b_j(\mu))^2}. \tag{3.23}$$

Este procedimento, levado a cabo para $j = 2, 3, \dots, n-1$ é chamado método δ -Lanczos e pode resumir-se no seguinte

ALGORITMO 3.1: Dada uma matriz diagonal $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ de ordem n e a primeira (ou última) linha da matriz de autovetores, este produz as matrizes $\delta_k J(\mu)$ e $\delta_k Q(\mu)$ tal que $\delta_k J(\mu) = (\delta_k Q(\mu))^T \Lambda Q(\mu) + (Q(\mu))^T \Lambda \delta_k Q(\mu)$:

Calcular $q^1(\mu)$, $a_1(\mu)$, e $b_j(\mu)$, $r^{j+1}(\mu)$, $q^{j+1}(\mu)$, $a_{j+1}(\mu)$, $j = 1, 2, \dots, n-1$ usando o algoritmo de Lanczos 2.1

Para $k = 1, \dots, n-1$

Calcular $\delta_k q^{(1)}(\mu)$

$$\delta_k a_1(\mu) := 2(\delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu)$$

Para $j = 1, \dots, n-1$

$$\begin{aligned} \delta_k r^{(j+1)}(\mu) &:= (\Lambda - a_j(\mu)I) \delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_k a_j(\mu) q^{(j)}(\mu) - \delta_k b_{j-1}(\mu) q^{(j-1)}(\mu) \\ &\quad - b_{j-1}(\mu) \delta_k q^{(j-1)}(\mu) \end{aligned}$$

$$\delta_k b_j(\mu) := \frac{(r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu)}{b_j(\mu)}$$

$$\delta_k q^{(j+1)}(\mu) := \frac{b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) - \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu)}{(b_j(\mu))^2}$$

$$\delta_k a_{j+1}(\mu) := 2(\delta_k q^{(j+1)}(\mu))^T \Lambda q^{(j+1)}(\mu)$$

Este algoritmo primeiro constrói os elementos da matriz $J(\mu)$, com um custo computacional de $O(n^2)$ operações. Uma vez construída a matriz $J(\mu)$, o algoritmo recupera cada matriz $\delta_k J(\mu)$ com aproximadamente $O(n^2)$ operações. Isto implica que são requeridas aproximadamente $O(n^2(n-1))$ operações para calcular as matrizes $\delta_k J(\mu)$, para cada $k = 1, 2, \dots, n-1$. Assim o trabalho total é $O(n^3)$. Se a última linha da matriz de autovetores é calculada, o procedimento recupera os elementos de $\delta_k J(\mu)$ no sentido oposto.

Como a reconstrução de $J(\mu)$ é baseada no algoritmo 2.1, a perda de ortogonalidade dos vetores $q^{(j)}(\mu)$ podem levar a uma análise de sensibilidade incorreta. A dificuldade na diferenciação do algoritmo de Lanczos com ortogonalização é calcular $\delta_k b_j(\mu)$ e $\delta_k q^{(j)}(\mu)$, porque isto eleva o trabalho computacional, já que $\delta_k b_j(\mu)$ é a $(j+1)$ -ésima componente do vetor $\delta_k P_j(\mu)w(\mu) + P_j(\mu)\delta_k w(\mu)$, onde

$$\begin{aligned} \delta_k w(\mu) &= (\delta_k P_{j-1}(\mu)P_{j-2}(\mu) \cdots P_0(\mu)r_j(\mu)) \\ &\quad + (P_{j-1}(\mu)\delta_k P_{j-2}(\mu) \cdots P_0(\mu)r_j(\mu)) \\ &\quad + \cdots + (P_{j-1}(\mu)P_{j-2}(\mu) \cdots P_0(\mu)\delta_k r_j(\mu)). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Da mesma forma,

$$\begin{aligned} \delta_k q^{(j)}(\mu) &= (\delta_k P_0(\mu)P_1(\mu) \cdots P_j(\mu)e_{j+1}) + (P_0(\mu)\delta_k P_1(\mu) \cdots P_j(\mu)e_{j+1}) \\ &\quad + (P_0(\mu)P_1(\mu) \cdots \delta_k P_j(\mu)e_{j+1}), \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde $P_j(\mu)$ são as matrizes de Householder do vetor $w(\mu)$.

Para evitar a possível perda de ortogonalidade dos vetores $q^{(j)}(\mu)$ e calcular a matriz $\delta_k J(\mu)$ com um custo computacional razoável, $J(\mu)$ é calculada pelo algoritmo de Lanczos 2.2 (com ortogonalização) e $\delta_k J(\mu)$ é obtida como no algoritmo 3.1. Isto leva ao *algoritmo δ -Lanczos com ortogonalização completa*:

ALGORITMO 3.2:

Calcular $q^1(\mu)$, e $a_1(\mu)$, $b_j(\mu)$, $r^{j+1}(\mu)$, $q^{j+1}(\mu)$, $a_{j+1}(\mu)$, $j = 1, 2, \dots, n-1$ usando o algoritmo de Lanczos 2.2

Para $k = 1, \dots, n-1$

Calcular $\delta_k q^{(1)}(\mu)$

$$\delta_k a_1(\mu) := 2(\delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu)$$

For $j = 1, \dots, n-1$

$$\begin{aligned} \delta_k r^{(j+1)}(\mu) &:= (\Lambda - a_j(\mu)I) \delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_k a_j(\mu) \delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_k b_{j-1}(\mu) q^{(j-1)}(\mu) \\ &\quad - b_{j-1}(\mu) \delta_k q^{(j-1)}(\mu) \end{aligned}$$

$$\delta_k b_j(\mu) := \frac{(r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu)}{b_j(\mu)}$$

$$\delta_k q^{(j+1)}(\mu) := \frac{b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) - \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu)}{(b_j(\mu))^2}$$

$$\delta_k a_{j+1}(\mu) := 2(\delta_k q^{(j+1)}(\mu))^T \Lambda q^{(j+1)}(\mu)$$

O algoritmo δ -Lanczos com ortogonalização completa requer $O(n^3)$ operações para calcular a matriz $J(\mu)$ e, como o algoritmo 3.1, $O(n^3 - n^2)$ operações para as matrizes $\delta_k J(\mu)$, $k = 1, 2, \dots, n-1$. Assim o trabalho total é $O(2n^3)$.

Observação: A última linha da matriz de autovetores $q^{(n)}(\mu)$ pode ser obtida a partir dos autovalores $(\lambda_i)_1^n$ e $(\mu_i)_1^{n-1}$ usando a Fórmula 2.8. Neste caso, as componentes do vetor $\delta_k q^{(n)}(\mu)$ são dadas por

$$\delta_k q_i^{(n)}(\mu) = \frac{1}{2} \frac{\prod_{j=1, j \neq k}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^{n-1} (\lambda_j - \lambda_i)} \left(\frac{\prod_{j=1, j \neq i}^{n-1} (\lambda_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)} \right)^{1/2}. \quad (3.26)$$

para $i = 1, 2, \dots, n$, e $k = 1, 2, \dots, n - 1$.

3.3 O método δ^2 -Lanczos

Na Seção 3.4 são apresentados alguns resultados computacionais para demonstrar a eficiência, consistência, e precisão do método δ -Lanczos. A precisão do método é confirmada numericamente usando o método de Newton para determinar um mínimo da função $G(\mu)$ de 3.39, definida na próxima Seção. O uso de algum método de otimização pode requer o vetor gradiente e a matriz Hessiana da função. As derivadas de segunda ordem da matriz de Jacobi J são calculadas usando uma versão de segunda ordem do método δ -Lanczos. Este calcula as derivadas parciais da matriz $\delta_k J(\mu)$ com relação a cada variável $\mu_l, l = 1, 2, \dots, n - 1$, as quais são denotadas por $\delta_l \delta_k J(\mu), l = 1, 2, \dots, n - 1$.

Para cada $l = 1, 2, \dots, n - 1$, o vetor $\delta_l \delta_k q^{(1)}(\mu), k = 1, 2, \dots, n - 1$ é calculado primeiro, o qual denota a derivada parcial do vetor $\delta_k q^{(1)}(\mu)$ com relação à variável μ_l . Diferenciando a eq 3.8 com relação a μ_l , obtém-se

$$\delta_l \delta_k a_1(\mu) = 2((\delta_l \delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu) + (\delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda \delta_l q^{(1)}(\mu)) \quad (3.27)$$

Uma vez obtida $\delta_l \delta_k a_1(\mu)$, pode calcular-se $\delta_l \delta_k r^{(2)}(\mu)$ diferenciando a eq 3.12. Isto é,

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k r^{(2)}(\mu) &= (\Lambda - a_1(\mu)I) \delta_l \delta_k q^{(1)}(\mu) - \delta_l a_1(\mu) \delta_k q^{(1)}(\mu) \\ &\quad - \delta_l \delta_k a_1(\mu) q^{(1)}(\mu) - \delta_k a_1(\mu) \delta_l q^{(1)}(\mu). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Agora, diferenciando as eqs 3.13 e 3.14 obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k b_1(\mu) &= \{b_1(\mu)((\delta_l r^{(2)}(\mu))^T \delta_k r^{(2)}(\mu) + (r^{(2)}(\mu))^T \delta_l \delta_k r^{(2)}(\mu)) \\ &\quad - \delta_l b_1(\mu)(r^{(2)}(\mu))^T \delta_k r^{(2)}(\mu)\} / (b_1(\mu))^2 \end{aligned} \quad (3.29)$$

e

$$\begin{aligned}
\delta_l \delta_k q^{(2)}(\mu) = & \{ (b_1(\mu))^2 (\delta_l b_1(\mu) \delta_k r^{(2)}(\mu) + b_1(\mu) \delta_l \delta_k r^{(2)}(\mu) \\
& - \delta_l \delta_k b_1(\mu) r^{(2)}(\mu) + \delta_k b_1(\mu) \delta_l r^{(2)}(\mu)) \\
& - 2b_1(\mu) \delta_l b_1(\mu) (b_1(\mu) \delta_k r^{(2)}(\mu) \\
& - \delta_k b_1(\mu) r^{(2)}(\mu)) \} / (b_1(\mu))^4.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Depois que $\delta_l \delta_k a_1(\mu)$, $\delta_l \delta_k b_1(\mu)$ foram determinadas, a diferenciação, com relação a μ_l , das eqs 3.17, 3.21, 3.22, 3.23 permite calcular, para cada $j = 2, 3, \dots, n-1$:

$$\delta_l \delta_k a_j(\mu) = 2((\delta_l \delta_k q^{(j)}(\mu))^T \Lambda q^{(j)}(\mu) + (\delta_k q^{(j)}(\mu))^T \Lambda \delta_l q^{(j)}(\mu)), \tag{3.31}$$

$$\begin{aligned}
\delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu) = & (\Lambda - a_j(\mu)I) \delta_l \delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_l a_j(\mu) \delta_k q^{(j)}(\mu) \\
& - \delta_l \delta_k a_j(\mu) q^{(j)}(\mu) - \delta_k a_j(\mu) \delta_l q^{(j)}(\mu) \\
& - \delta_l \delta_k b_{j-1}(\mu) q^{(j-1)}(\mu) - \delta_k b_{j-1}(\mu) \delta_l q^{(j-1)}(\mu) \\
& - \delta_l b_{j-1}(\mu) \delta_k q^{(j-1)}(\mu) - b_{j-1}(\mu) \delta_l \delta_k q^{(j-1)}(\mu),
\end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned}
\delta_l \delta_k b_j(\mu) = & \{ b_j(\mu) ((\delta_l r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\
& + (r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu)) \\
& - \delta_l b_j(\mu) (r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \} / (b_j(\mu))^2,
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
\delta_l \delta_k q^{(j+1)}(\mu) = & \{ (b_j(\mu))^2 (\delta_l b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) + b_j(\mu) \delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\
& - \delta_l \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu) - \delta_k b_j(\mu) \delta_l r^{(j+1)}(\mu)) \\
& - 2b_j(\mu) \delta_l b_j(\mu) (b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\
& - \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu)) \} / (b_j(\mu))^4.
\end{aligned} \tag{3.34}$$

As relações anteriores podem ser resumidas no algoritmo δ^2 -Lanczos:

ALGORITMO 3.3:

Calcular $q^1(\mu)$, $a_1(\mu)$, $eb_j(\mu)$, $r^{j+1}(\mu)$, $q^{j+1}(\mu)$, $a_{j+1}(\mu)$, $j = 1, 2, \dots, n-1$ usando

o algoritmo de Lanczos 2.1

Calcular $\delta_k q^1(\mu)$, $\delta_k a_1(\mu)$, $e\delta_k b_j(\mu)$, $\delta_k r^{j+1}(\mu)$, $\delta_k q^{j+1}(\mu)$, $\delta_k a_{j+1}(\mu)$,

$j = 1, 2, \dots, n-1$ usando o algoritmo δ -Lanczos 3.2

Para cada $l = 1, \dots, n-1$

Para cada $k = 1, \dots, n-1$

Calcular $\delta_l \delta_k q^{(1)}(\mu)$, $\delta_l \delta_k a_1(\mu) := 2((\delta_l \delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda q^{(1)}(\mu) + \delta_k q^{(1)}(\mu))^T \Lambda \delta_l q^{(1)}(\mu)$

Para cada $j = 1, \dots, n-1$

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu) &= (\Lambda - a_j(\mu)I) \delta_l \delta_k q^{(j)}(\mu) - \delta_l a_j(\mu) \delta_k q^{(j)}(\mu) \\ &\quad - \delta_l \delta_k a_j(\mu) q^{(j)}(\mu) - \delta_k a_j(\mu) \delta_l q^{(j)}(\mu) \\ &\quad - \delta_l \delta_k b_{j-1}(\mu) q^{(j-1)}(\mu) - \delta_k b_{j-1}(\mu) \delta_l q^{(j-1)}(\mu) \\ &\quad - \delta_l b_{j-1}(\mu) \delta_k q^{(j-1)}(\mu) - b_{j-1}(\mu) \delta_l \delta_k q^{(j-1)}(\mu) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k b_j(\mu) &= \{b_j(\mu)((\delta_l r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\ &\quad + (r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu)) \\ &\quad - \delta_l b_j(\mu)(r^{(j+1)}(\mu))^T \delta_k r^{(j+1)}(\mu)\} / (b_j(\mu))^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k q^{(j+1)}(\mu) &= \{(b_j(\mu))^2(\delta_l b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) + b_j(\mu) \delta_l \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\ &\quad - \delta_l \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu) - \delta_k b_j(\mu) \delta_l r^{(j+1)}(\mu)) \\ &\quad - 2b_j(\mu) \delta_l b_j(\mu)(b_j(\mu) \delta_k r^{(j+1)}(\mu) \\ &\quad - \delta_k b_j(\mu) r^{(j+1)}(\mu))\} / (b_j(\mu))^4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_l \delta_k a_{j+1}(\mu) &= 2((\delta_l \delta_k q^{(j+1)}(\mu))^T \Lambda q^{(j+1)}(\mu) \\ &\quad + (\delta_k q^{(j+1)}(\mu))^T \Lambda \delta_l q^{(j+1)}(\mu)) \end{aligned}$$

Observação: As derivadas de segunda ordem do vetor $q^{(n)}(\mu)$ são obtidas diferenciando as eqs 3.26 com relação as variáveis μ_l , $l = 1, 2, \dots, n-1$:

Para $i = 1, 2, \dots, n$,

$$\delta_l \delta_k q_i^{(n)}(\mu) = \frac{1}{2} \prod_{j=1, j \neq l, k}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i) \left\{ \frac{1}{\prod_{j=1, j \neq i}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \left(\frac{\prod_{j=1, j \neq i}^n (\lambda_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \frac{1}{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)} \left(\frac{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \right)^{1/2} \right\}. \quad (3.35)$$

$k = 1, 2, \dots, n-1$, com $l \neq k$, e

$$\delta_l \delta_k q_i^{(n)}(\mu) = -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{(\mu_l - \lambda_i)} \right)^2 \left(\frac{\prod_{j=1}^{n-1} (\mu_j - \lambda_i)}{\prod_{j=1, j \neq i}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \right)^{1/2} \quad (3.36)$$

$k = l = 1, 2, \dots, n-1$.

3.4 Resultados Computacionais

Nesta Seção são apresentados alguns exemplos numéricos para demonstrar a eficiência e precisão do método δ -Lanczos. No primeiro exemplo são calculadas e apresentadas graficamente as derivadas da matriz de Jacobi de ordem $n = 10$, cujos elementos diagonais e co-diagonais são $a_i = 10.0$, $b_i = 3.0$, respectivamente. No segundo exemplo, é mostrado que em alguns casos o algoritmo de Lanczos com e sem ortogonalização são equivalentes. Isto mostra que, em certos casos, pode usar-se indistintamente ambos algoritmos. Logo depois, é demonstrada a consistência do método de δ -Lanczos para as matrizes de ordem $n = 20$ e 160 com os mesmos elementos da matriz do primeiro exemplo. O método é considerado consistente se os elementos da matriz $\delta_k J(\mu)$ calculados desde $\delta_k a_1$, $\delta_k b_1$ até os últimos elementos $\delta_k a_n$, $\delta_k b_{n-1}$ são iguais (em precisão de máquina) quando são calculados no sentido oposto. No seguinte exemplo, é usado o método de Newton para determinar um mínimo da função $G(\mu)$ de 3.39, onde o vetor gradiente e a matriz Hessiana de $G(\mu)$ são calculados usando o método δ^2 -Lanczos (Ver Cap 5). A solução converge quadraticamente demonstrando que o método δ -Lanczos calcula a derivada exata de $J(\mu)$. Finalmente, são usadas as matrizes de ordem $n = 20$ e 160 com um elemento co-diagonal

pequeno para mostrar a robustez do algoritmo δ -Lanczos quando é comparado com o método de diferenças finitas.

3.4.1 Gráficos das derivadas calculadas por δ -Lanczos

Considerar uma matriz de Jacobi de ordem $n = 10$. Cada a_i é igual a 10.0 e cada b_i é igual a 3.0. Esta escolha proporciona o espectro $(\lambda_i)_1^n$ e $(\mu_i)_1^{n-1}$ correspondente aos autovalores da matriz de Jacobi e da submatriz principal superior, respectivamente. As componentes dos vetores $q^{(n)}(\mu)$ são calculadas das eqs 2.8, e as dos vetores $\delta_k q^{(n)}(\mu)$, $k = 1, 2, \dots, n-1$ pelas eqs 3.26. Então o algoritmo δ -Lanczos 3.2 (com ortogonalização) é aplicado para recuperar as matrizes $\delta_k J(\mu)$, $k = 1, 2, \dots, n-1$.

Os erros relativos dos elementos diagonais e co-diagonais entre a matriz exata e a obtida depois de aplicar o algoritmo δ -Lanczos 3.2 (com ortogonalização) são $e_a = 1.200817e - 13$, $e_b = 7.776495e - 14$, respectivamente.

A Figura 3.1 apresenta os gráficos das derivadas dos elementos diagonais $(\delta_k a_i)_{i=1}^n$ e co-diagonais $(\delta_k b_i)_{i=1}^{n-1}$, para cada $k = 1, 2, \dots, n-1$. Nesta aplicação, os gráficos mostram que

$$\delta_1 a_i = \delta_9 a_i, i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.37)$$

e

$$\delta_1 b_i = -\delta_9 b_i, i = 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.38)$$

São obtidos resultados semelhantes com o resto dos gráficos. Além disso, todas as figuras mostram, para cada k , que $\delta_k a_i = -\delta_k a_{n-(i-1)}$, $i = 1, 2, \dots, n/2$, e $\delta_k b_i = -\delta_k b_{n-i}$, $i = 1, 2, \dots, (n/2) - 1$. Os gráficos sugerem que as derivadas, para o tipo de matriz de Jacobi considerada, tem um comportamento de autovetor.

3.4.2 Comparação dos algoritmos com e sem ortogonalização

Nesta Seção são ilustrados alguns resultados numéricos, os quais mostram que, em certos casos, a re-ortogonalização do método δ -Lanczos não é necessária. Primeiro é considerada uma matriz de ordem $n = 20$ com $a_i = 10.0$, $b_i = 3.0$ exceto $b_5 = 1.0e - 05$. Para comparar os algoritmos são definidos os erros $\hat{e}_a = \frac{\|a^r - a\|_\infty}{\|a^r\|_\infty}$, $\hat{e}_b = \frac{\|b^r - b\|_\infty}{\|b^r\|_\infty}$. Aqui, as componentes dos vetores a^r, b^r são os elementos da matriz obtida pelo algoritmo de Lanczos com ortogonalização e a, b são sem ortogonalização. Para a matriz anterior tem-se, $\hat{e}_a = 1.517101e - 10$, e $\hat{e}_b = 2.901548e - 10$.

Figura 3.1: Gráficos das derivadas dos elementos diagonais e co-diagonais de uma matriz de Jacobi ordem $n = 10$ com relação à primeira variável até a nona.

Os algoritmos δ -Lanczos (com e sem ortogonalização) são comparados definindo os erros $\delta_k \hat{e}_a = \frac{\|\delta_k a^r - \delta_k a\|_\infty}{\|\delta_k a^r\|_\infty}$, $\delta_k \hat{e}_b = \frac{\|\delta_k b^r - \delta_k b\|_\infty}{\|\delta_k b^r\|_\infty}$. Estes erros são ilustrados na Tabela 3.1, quando as derivadas da matriz anterior são calculadas com relação a μ_k , $k = 1, 2, 10, 11, 12$. Obtém-se resultados semelhantes para o resto das variáveis.

Se a dimensão da matriz é maior, os resultados são semelhantes ao caso de uma matriz de ordem $n = 20$. Os resultados na Tabela 3.2, correspondente aos erros de uma matriz de ordem $n = 160$, com $a_i = 10.0$, $b_i = 3.0$ exceto $b_{15} = 1.0e - 04$. Para este exemplo os algoritmos levam aos erros $\hat{e}_a = 2.287917e - 11$, e $\hat{e}_b = 3.057232e - 11$.

Os resultados ilustrados nas Tabelas 3.1 e 3.2 mostram que ambos algoritmos levam a resultados semelhantes, embora algum elemento co-diagonal seja pequeno. Assim, a partir daqui os resultados apresentados são obtidos sem ortogonalização.

Tabela 3.1:

k	$\delta_k \hat{e}_a$	$\delta_k \hat{e}_b$
1	9.116094e-10	6.473721e-10
2	1.757715e-09	1.030581e-09
10	1.589851e-11	5.244601e-09
11	2.955277e-10	1.182479e-09
12	3.520908e-10	9.681891e-10

Tabela 3.2:

k	$\delta_k \hat{e}_a$	$\delta_k \hat{e}_b$
1	9.338647e-09	9.894219e-09
2	2.143753e-09	2.134142e-09
80	3.404998e-11	1.659217e-08
81	9.115002e-11	1.420093e-10
82	8.401080e-11	1.852816e-10

3.4.3 Consistência do algoritmo δ -Lanczos

Para mostrar a consistência do algoritmo δ -Lanczos, são consideradas as matrizes de ordem $n = 20$ e 160 com $a_i = 10.0$, $b_i = 3.0$. Aqui, $\delta_k \hat{e}_a$, $\delta_k \hat{e}_b$ são definidos por $\delta_k \hat{e}_a = \frac{\|\delta_k a^\dagger(\mu) - \delta_k a^\dagger(\mu)\|_\infty}{\|\delta_k a^\dagger(\mu)\|_\infty}$, $\delta_k \hat{e}_b =$

$\frac{\|\delta_k b^\dagger(\mu) - \delta_k b^\downarrow(\mu)\|_\infty}{\|\delta_k b^\dagger(\mu)\|_\infty}$, onde as componentes de $\delta_k a^\downarrow$ e $\delta_k b^\downarrow$ são os elementos da matriz $\delta_k J(\mu)$ para ser calculados pelo algoritmo δ -Lanczos a partir dos primeiros elementos $\delta_k a_1^\downarrow, \delta_k b_1^\downarrow$ até os últimos $\delta_k a_n^\downarrow, \delta_k b_{n-1}^\downarrow$, e $\delta_k a^\dagger$ e $\delta_k b^\dagger$ são no sentido oposto.

Na Tabela 3.3 são apresentados os erros $\delta_k \hat{e}_a, \delta_k \hat{e}_b$ para a matriz de ordem $n = 20$. Neste caso, são calculadas as derivadas com relação a $\mu_k, k = 1, 2, 10, 11, 12$. Estes resultados são semelhantes se a ordem da matriz é incrementada, embora os erros para os elementos extremos sejam maiores. Por exemplo, a Tabela 3.4 ilustra os erros da matriz de ordem $n = 160$.

Tabela 3.3:

k	$\delta_k \hat{e}_a$	$\delta_k \hat{e}_b$
1	1.300071e-12	6.100675e-13
2	4.001243e-13	1.341043e-13
10	9.992007e-14	2.164934e-14
11	5.007105e-14	1.998401e-14
12	1.001421e-13	2.003952e-14

Tabela 3.4:

k	$\delta_k \hat{e}_a$	$\delta_k \hat{e}_b$
1	5.469971e-10	2.810018e-10
2	2.589999e-10	1.301003e-10
80	4.996003e-14	1.088417e-13
81	2.000066e-13	8.998357e-14
82	1.399991e-13	6.99956e-14

3.4.4 Derivada numérica exata obtida pelo algoritmo δ -Lanczos

Aqui é usado o método de Newton para confirmar numericamente a precisão das derivadas calculadas pelo algoritmo δ -Lanczos. O problema modelo é baseado na minimização da função

$$G(\mu) = \sum_{j=1}^n (a_j(\mu) - \bar{a}_j)^2 + \sum_{j=1}^{n-1} (b_j(\mu) - \bar{b}_j)^2, \quad (3.39)$$

sujeito a $\bar{\lambda}_i < \mu_i < \bar{\lambda}_{i+1}$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, onde $\bar{\lambda}_i$ são os autovalores da matriz de Jacobi $\bar{J}$ com elementos $(\bar{a}_i)_1^n$, $(\bar{b}_i)_1^{n-1}$ dados na Tabela 3.5, e $(a(\mu)_i)_1^n$, $(b(\mu)_i)_1^{n-1}$ são os elementos da matriz de Jacobi $J(\mu)$ reconstruída a partir dos $\bar{\lambda}_i$ e μ_i . A solução deste problema leva a um espectro intercalado $\bar{\mu}_i$ associado com $\bar{J}$, e neste ponto o gradiente de G é zero. Aplicando o método de Newton para achar um zero de G , e se as derivadas são calculadas exatamente, a convergência a $\bar{\mu}_i$ será quadrática. Isto é confirmado pelos gráficos nas Figuras 3.2(a)-3.2(c).

Figura 3.2: Gráficos dos $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j -ésima iteração do método de Newton para três valores iniciais diferentes.

Estes Figuras mostram os gráficos dos $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j -ésima iteração para três valores iniciais diferentes. Para o primeiro valor inicial, especificado na Tabela 3.5, a convergência é quadrática em 5 iterações, como mostra a Figura 3.2(a). Neste caso, para todo j , $c_j \simeq 2.0$ exceto c_4 , já que e_5 atinge a precisão de máquina. Os valores iniciais listados nas últimas das colunas da Tabela 3.5 levam a confirmar numericamente que o algoritmo δ -Lanczos calcula as derivadas exatas de uma matriz de Jacobi.

Tabela 3.5:

i	$\bar{\lambda}_i$	μ_i^{exato}	$\bar{a}_i$	$\bar{b}_i$	1° μ_i^{vi}	2° μ_i^{vi}	3° μ_i^{vi}
1	2.300	4.100	16.919	3.986	4.200	4.000	4.200
2	5.700	7.300	20.258	6.735	7.300	7.200	7.100
3	9.500	10.90	18.743	6.981	10.900	10.800	10.700
4	13.400	15.000	19.960	7.496	15.000	15.100	15.000
5	16.700	18.100	18.093	8.164	18.100	18.000	18.000
6	21.100	23.300	20.742	9.060	23.300	23.300	23.200
7	25.400	27.700	20.711	8.709	27.700	27.600	27.700
8	30.000	31.300	19.866	9.286	31.500	31.300	31.200
9	33.300	35.800	18.208	12.412	35.800	35.800	35.700
10	37.100		21.000				

3.4.5 Comparação dos métodos δ -Lanczos e diferenças finitas

São considerados dois exemplos para comparar o método diferenças finitas com o método δ -Lanczos. Primeiro, é considerada uma matriz de ordem $n = 20$, cujos elementos são $a_i = 10.0$, $b_i = 3.0$ exceto $b_5 = 0.2$. Logo depois, a ordem da matriz é incrementada a $n = 160$. Os valores $\delta_3 \hat{e}_a$, $\delta_3 \hat{e}_b$ indicam os erros dos elementos diagonais e co-diagonais da matriz $\delta_3 J(\mu)$ calculada por δ -Lanczos e diferenças finitas. Neste caso, é usado a aproximação por diferenças centradas de segunda ordem .

A dificuldade do esquema de diferenças finitas é a escolha do passo $\Delta\mu_k$. Por exemplo, as Tabelas 3.6 e 3.7 mostram os passos para determinar a derivada da matriz de Jacobi mencionada anteriormente, com relação a μ_3 . Quando $n = 20$ o passo ótimo é $\Delta\mu_3 = 1.0e - 08$, enquanto para $n = 160$ é $\Delta\mu_3 = 1.0e - 07$. Isto mostra que o passo $\Delta\mu_k$ depende da dimensão de J , e quando a ordem da matriz é maior os erros são maiores.

Por outro lado, se é desejado minimizar a função $G(\mu)$ de 3.39 computando as derivadas do vetor gradiente usando diferenças finitas, a escolha está restrita pela propriedade de intercalamento

$$\lambda_k < \mu_k - \Delta\mu_k, \quad \mu_k + \Delta\mu_k < \lambda_{k+1}.$$

Isto implica que para cada passo iterativo deve ser determinado o valor ótimo de $\Delta\mu_k$. Estas dificuldades ressaltam as vantagens do método δ -Lanczos para o análise de sensibilidade das matrizes de Jacobi.

Tabela 3.6:

$\Delta\mu_3$	$\delta_3\hat{e}_a$	$\delta_3\hat{e}_b$
1.0e-04	8.922547e-02	5.630937e-02
1.0e-05	8.196562e-04	5.382393e-04
1.0e-06	8.190057e-06	5.380117e-06
1.0e-07	8.457750e-08	5.648974e-08
1.0e-08	9.100510e-09	7.297199e-09
1.0e-09	9.515141e-08	9.169585e-08
1.0e-10	1.705823e-07	2.105213e-08
1.0e-11	1.937736e-06	2.393996e-06

Tabela 3.7:

$\Delta\mu_3$	$\delta_3\hat{e}_a$	$\delta_3\hat{e}_b$
1.0e-04	0.796029	0.793665
1.0e-05	4.381208e-03	4.370754e-03
1.0e-06	4.361880e-05	4.351758e-05
1.0e-07	4.389864e-07	4.368720e-07
1.0e-08	1.453702e-06	1.689290e-06
1.0e-09	4.166141e-06	4.773031e-06
1.0e-10	5.595735e-05	1.095942e-05
1.0e-11	6.262415e-03	1.260549e-02

Capítulo 4

Análise de Sensibilidade de Sistemas Massa-Mola

Para resolver o problema variacional 3.2- 3.3 é necessário fazer um estudo prévio da sensibilidade das matrizes massa e rigidez de um sistema (M, K) , o qual é precedida da análise de sensibilidade de uma matriz de Jacobi, discutido no Capítulo anterior. O gradiente da função

$$F(\mu) = \sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l)^2 + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l)^2,$$

é dado por

$$\nabla F(\mu) = \left(\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_1}, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_2}, \dots, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_{n-1}} \right),$$

onde

$$\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_j} = 2 \left(\sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l) \frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_j} + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l) \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_j} \right), \quad (4.1)$$

com $j = 1, 2, \dots, n - 1$.

Consequentemente com a notação do Cap 3, as derivadas parciais $\frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_j}$ e $\frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_j}$ serão denotadas por $\delta_j m_l(\mu)$ e $\delta_j k_l(\mu)$, respectivamente. Estes elementos formam as respectivas matrizes $\delta_j M(\mu) \equiv \frac{\partial M(\mu)}{\partial \mu_j}$ e $\delta_j K(\mu) \equiv \frac{\partial K(\mu)}{\partial \mu_j}$.

Nesta Seção é apresentado um método de reconstrução das matrizes $\delta_j M(\mu)$ e $\delta_j K(\mu)$. As derivadas calculadas são numericamente exatas exceto por erros de arredondamento. A reconstrução é precedida do algoritmo 3.1 (ou 3.2) para obter as matrizes $(\delta_j J(\mu))_1^{n-1}$. Isto significa

que a mesma informação espectral é necessária para obter as sensibilidades das matrizes massa e rigidez. Além disso, são obtidas as derivadas de segunda ordem de $M(\mu)$ e $K(\mu)$, as quais serão necessárias na solução do problema variacional. Após a análise de sensibilidade são apresentados exemplos numéricos para demonstrar a precisão e eficiência do método. O método de diferenças finitas, apesar de suas limitações, é usado como referência para nosso método.

4.1 Análise de sensibilidade das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$

Nesta Seção será descrito um método para calcular as sensibilidades das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$ com relação ao espectro intercalado $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$. Este método permite calcular as derivadas de primeira e segunda ordem numericamente exatas com relação a cada μ_j .

Os espectros $(\lambda_l)_1^n$, $(\mu_l)_1^{n-1}$ e a massa total m_T do sistema são os dados para calcular as matrizes $\delta_j M(\mu)$, $\delta_j K(\mu)$, com $j = 1, 2, \dots, n-1$. No Cap 2 um algoritmo para calcular as matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$ a partir dos autovalores e da massa total foi descrito. Este algoritmo reconstrói primeiro uma matriz de Jacobi $J(\mu)$, e depois as massas e constantes de rigidez. Para delinear o método que calcula as matrizes $\delta_j M(\mu)$, $\delta_j K(\mu)$ suponha que a matriz $J(\mu)$ foi obtida pelo algoritmo 2.1 (ou 2.2). Assim, o vetor $y(\mu) = (y_1(\mu), y_2(\mu), \dots, y_n(\mu))^T \neq 0$ é a solução do sistema

$$J(\mu)y(\mu) = e_1,$$

com $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$. Diferenciando a equação anterior com relação a μ_j , obtém-se

$$\delta_j J(\mu)y(\mu) + J(\mu)\delta_j y(\mu) = 0,$$

ou, equivalentemente,

$$J(\mu)\delta_j y(\mu) = -\delta_j J(\mu)y(\mu). \quad (4.2)$$

Resolvendo o sistema 4.2 conhece-se o vetor $\delta_j y(\mu) = (\delta_j y_1(\mu), \delta_j y_2(\mu), \dots, \delta_j y_n(\mu))^T$, onde a matriz $\delta_j J(\mu)$ é calculada pelo algoritmo 3.1 (ou 3.2).

Por outro lado, a última massa pode ser calculada pela relação

$$m_n(\mu) = \frac{m_T}{1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2},$$

onde m_T , a princípio, é considerada constante. A derivada da n -ésima massa é calculada diferenciando a relação anterior, isto é,

$$\delta_j m_n(\mu) = \frac{-2m_T \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} (\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)) \right)}{\left[1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right]^2}. \quad (4.3)$$

Agora diferenciando o resto das massas, dadas pela relação

$$m_l(\mu) = m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2, \quad l = 1, 2, \dots, n-1,$$

obtém-se

$$\delta_j m_l(\mu) = \delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 + 2m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) (\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)), \quad l = 1, 2, \dots, n-1. \quad (4.4)$$

Desta maneira, conhecidas todas as $\delta_j m_l(\mu)$, a sensibilidade da matriz massa é completamente determinada. Para obter $\delta_j K(\mu)$ considera-se a relação

$$K(\mu) = (B^T(\mu))^{-1} J(\mu) B^{-1}(\mu),$$

onde $B(\mu) = B^T(\mu) = \text{diag}\{m_1^{1/2}(\mu), m_2^{1/2}(\mu), \dots, m_n^{1/2}(\mu)\}$. Daqui, pode-se verificar que

$$k_l(\mu) = \begin{cases} m_1(\mu) a_n(\mu) - k_2(\mu) & , \text{ se } l = 1 \\ b_{n-l+1}(\mu) \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)} & , \text{ se } l = 2, 3, \dots, n, \end{cases} \quad (4.5)$$

onde $a_n(\mu)$, $b_{n-l+1}(\mu)$ são elementos da matriz $J(\mu)$. Portanto, as sensibilidades das constantes de rigidez podem ser calculadas diferenciando a eq 4.5, isto é,

$$\delta_j k_l(\mu) = \begin{cases} \delta_j m_1(\mu) a_n(\mu) + m_1(\mu) \delta_j a_n(\mu) - \delta_j k_2(\mu) & , \text{ se } l = 1 \\ \delta_j b_{n-l+1}(\mu) \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)} + \frac{b_{n-l+1}(\mu)}{2\sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)}} (\delta_j m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + m_{l-1}(\mu) \delta_j m_l(\mu)) & , \text{ se } l = 2, 3, \dots, n. \end{cases} \quad (4.6)$$

As eqs 4.3, 4.4, e 4.6 determinam as derivadas de primeira ordem das matrizes massa e rigidez. Isto é resumido no seguinte:

ALGORITMO 4.1: Dados os autovalores $(\lambda_l)_1^n$ e $(\mu_l)_1^{n-1}$ correspondentes aos sistemas (M, K) e modificado $(\widetilde{M}, \widetilde{K})$, respectivamente, e a massa total m_T de (M, K) , este produz as matrizes $\delta_j M(\mu)$ e $\delta_j K(\mu)$, para cada $j = 1, 2, \dots, n-1$:

Calcular $(a_l(\mu))_{l=1}^n$, e $(b_l(\mu))_{l=1}^{n-1}$ da matriz $J(\mu)$ usando o algoritmo de Lanczos 2.1

Determinar $(y_l(\mu))_{l=1}^n$ resolvendo o sistema $J(\mu)y(\mu) = e_1$

$$\text{Calcular } m_n(\mu) = \frac{m_T}{1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2}$$

$$m_l(\mu) = m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2, \quad l = 1, \dots, n-1$$

$$k_l(\mu) = b_{n-l+1}(\mu) \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)}, \quad l = 2, \dots, n$$

$$k_1(\mu) = m_1(\mu) a_n(\mu) - k_2(\mu)$$

Para $j = 1, \dots, n-1$

Calcular $(\delta_j a_l(\mu))_{l=1}^n$, e $(\delta_j b_l(\mu))_{l=1}^{n-1}$ da matriz $\delta_j J(\mu)$ usando o algoritmo

δ -Lanczos 3.1

Determinar $(\delta_j y_l(\mu))_{l=1}^n$ resolvendo o sistema $J(\mu) \delta_j y(\mu) = -\delta_j J(\mu) y(\mu)$

$$\text{Calcular } \delta_j m_n(\mu) = \frac{-2m_T \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} (\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)) \right)}{\left[1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right]^2}$$

$$\delta_j m_l(\mu) = \delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 + 2m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} (\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)) \right),$$

$$l = 1, 2, \dots, n-1$$

$$\delta_j k_l(\mu) = \delta_j b_{n-l+1}(\mu) \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)} + \frac{b_{n-l+1}(\mu)}{2\sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)}} (\delta_j m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) +$$

$$m_{l-1}(\mu)\delta_j m_l(\mu)), l = 2, \dots, n$$

$$\delta_j k_1(\mu) = \delta_j m_1(\mu)a_n(\mu) + m_1(\mu)\delta_j a_n(\mu) - \delta_j k_2(\mu).$$

O algoritmo 4.1 pode ser dividido em duas partes; primeiro, determinar a matriz de Jacobi $J(\mu)$ e suas derivadas, e logo, as massas e constantes de rigidez relativas a $J(\mu)$ com suas correspondentes derivadas, o qual tem um custo computacional de $O(2n^3)$ operações (usando o algoritmo de Lanczos com ortogonalização). Na segunda parte deve-se resolver uma vez o sistema tridiagonal $J(\mu)y(\mu) = e_1$ com um custo de $O(n)$ operações, e determinar as massas e constantes de rigidez que requer um esforço computacional de ordem $O(n)$, incrementando o custo a $O(2(n^3 + n))$ operações. Além disso, para calcular as derivadas de $M(\mu)$ e $K(\mu)$ devem resolver-se $(n - 1)$ vezes o sistema tridiagonal $J\delta_j y = -\delta_j Jy$ e calcular as matrizes $\delta_j M(\mu)$ e $\delta_j K(\mu)$ com um custo de $O(n^2)$ operações. Assim, o trabalho total do algoritmo 4.1 é aproximadamente da $O(2n^3 + n^2 + n)$ operações.

Uma vez determinadas as derivadas de primeira ordem das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$, as derivadas de segunda ordem são obtidas de uma maneira semelhante. As derivadas mistas $\frac{\partial M(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j}$ e $\frac{\partial K(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j}$ serão denotadas por $\delta_i \delta_j M(\mu)$ e $\delta_i \delta_j K(\mu)$, respectivamente. Os elementos de $\delta_i \delta_j M(\mu)$ e $\delta_i \delta_j K(\mu)$ são $\delta_i \delta_j m_l(\mu)$ e $\delta_i \delta_j k_l(\mu)$, com $l = 1, 2, \dots, n$. Se a eq 4.2 é diferenciada com relação a μ_i e os termos são reorganizados, obtém-se

$$J(\mu)\delta_i \delta_j y(\mu) = -(\delta_i \delta_j J(\mu)y(\mu) + \delta_i J(\mu)\delta_j y(\mu) + \delta_j J(\mu)\delta_i y(\mu)), \quad (4.7)$$

onde as matrizes $\delta_j J(\mu)$, e $\delta_i \delta_j J(\mu)$ podem ser obtidas do algoritmo 3.3. Assim, a solução do sistema 4.7 permite calcular as derivadas de segunda ordem das massas e constantes de rigidez, isto é, determinado o vetor $\delta_i \delta_j y(\mu)$ de 4.7 e diferenciando a eq 4.3 com relação a μ_i , obtém-se

$$\begin{aligned} \delta_i \delta_j m_n(\mu) = & \left[\left(1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right)^2 \right. \\ & \left(-2m_T \sum_{l=1}^{n-1} \left\{ \frac{[\delta_j y_l(\mu)y_n^3(\mu) - 3y_l(\mu)y_n^2(\mu)\delta_i y_n(\mu)][\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n]}{y_n^6(\mu)} + \right. \right. \\ & \left. \left. + [\delta_i \delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) + \delta_j y_l(\mu)\delta_i y_n(\mu) - \delta_i \delta_j y_n(\mu)y_l(\mu) - \delta_j y_n(\mu)\delta_i y_l(\mu)] \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) \right\} \right) + \\ & \left. + \left(8m_T \sum_{l=1}^{n-1} \frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} [\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n(\mu)] \right) \left(1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right) \right] \end{aligned}$$

$$\left(\sum_{l=1}^{n-1} \frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} [\delta_i y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_i y_n(\mu)] \right) \Bigg/ \left[1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right]^4. \quad (4.8)$$

Obtido $\delta_i \delta_j m_n(\mu)$, são calculadas $\delta_i \delta_j m_l(\mu)$, $l = 1, 2, \dots, n-1$ diferenciando a eq 4.4, isto é,

$$\begin{aligned} \delta_i \delta_j m_l(\mu) = & \delta_i \delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 + 2 \delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_i y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_i y_n(\mu)] + \\ & + 2 \delta_i m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)] + \\ & + 2 m_n(\mu) \left(\frac{(\delta_j y_l(\mu) y_n^3(\mu) - 3 y_l(\mu) y_n^2(\mu) \delta_i y_n(\mu))}{y_n^6(\mu)} \right) [\delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_j y_n(\mu)] + \\ & + 2 m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_i \delta_j y_l(\mu) y_n(\mu) + \delta_j y_l(\mu) \delta_i y_n(\mu) - \delta_i \delta_j y_n(\mu) y_l(\mu) - \delta_j y_n(\mu) \delta_i y_l(\mu)] \end{aligned} \quad (4.9)$$

para $l = 1, 2, \dots, n-1$. Para calcular as derivadas mistas das constantes de rigidez são consideradas as eqs 4.6 para ser diferenciadas. Portanto,

$$\begin{aligned} \delta_i \delta_j k_l(\mu) = & \left[2 \{ [\delta_i \delta_j m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \delta_j m_{l-1}(\mu) \delta_i m_l(\mu) + \delta_i \delta_j m_l(\mu) m_{l-1}(\mu) + \right. \\ & + \delta_j m_l(\mu) \delta_i m_{l-1}(\mu)] b_{n-l+1}(\mu) + [\delta_j m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \\ & + \delta_j m_l(\mu) m_{l-1}(\mu)] \delta_i b_{n-l+1}(\mu) \} \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)} - \\ & - \frac{b_{n-l+1}(\mu) [\delta_j m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \delta_j m_l(\mu) m_{l-1}(\mu)]}{\sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)}} \\ & \left. + [\delta_i m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu) m_{l-1}(\mu)] \right] \Bigg/ 4 m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \\ & + \frac{\delta_j b_{n-l+1}(\mu) [\delta_i m_{l-1}(\mu) m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu) m_{l-1}(\mu)]}{2 \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)}} + \\ & + \sqrt{m_{l-1}(\mu) m_l(\mu)} \delta_i \delta_j b_{n-l+1}(\mu), \end{aligned} \quad (4.10)$$

para $l = 2, 3, \dots, n$, e

$$\delta_i \delta_j k_1(\mu) = \delta_i \delta_j m_1(\mu) a_n(\mu) + \delta_j m_1(\mu) \delta_i a_n(\mu) + \delta_i \delta_j a_n(\mu) m_1(\mu) + \delta_j a_n(\mu) \delta_i m_1(\mu) + \delta_i \delta_j k_2(\mu). \quad (4.11)$$

Com a mesma informação do algoritmo 4.1 as eqs obtidas a cima podem resumir-se no seguinte:

ALGORITMO 4.2:

Calcular $(a_l(\mu))_{l=1}^n$, e $(b_l(\mu))_{l=1}^{n-1}$ da matriz $J(\mu)$ usando o algoritmo de Lanczos 2.1

Determinar $(y_l(\mu))_{l=1}^n$ resolvendo o sistema $J(\mu)y(\mu) = e_1$

Para $j = 1, 2, \dots, n-1$

Determinar $(\delta_j y_l(\mu))_{l=1}^n$ resolvendo o sistema $J(\mu)\delta_j y(\mu) = -\delta_j J(\mu)y(\mu)$

Determinar $(m_l(\mu))_{l=1}^n$, $(k_l(\mu))_{l=1}^n$, $(\delta_j m_l(\mu))_{l=1}^n$, $(\delta_j k_l(\mu))_{l=1}^n$, usando o

algoritmo 4.1

Para $i = 1, 2, \dots, n-1$

Determinar $(\delta_i \delta_j y_l(\mu))_{l=1}^n$ resolvendo o sistema $J(\mu)\delta_i \delta_j y(\mu) = -(\delta_i \delta_j J(\mu)y(\mu) +$

$\delta_i J(\mu)\delta_j y(\mu) + \delta_j J(\mu)\delta_i y(\mu))$

$$\begin{aligned} \text{Calcular } \delta_i \delta_j k_1(\mu) = & \left[\left(1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right)^2 \right. \\ & \left(-2m_T \sum_{l=1}^{n-1} \left\{ \frac{[\delta_j y_l(\mu)y_n^3(\mu) - 3y_l(\mu)y_n^2(\mu)\delta_i y_n(\mu)]}{y_n^6(\mu)} \right. \right. \\ & [\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n(\mu)][\delta_i \delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) + \delta_j y_l(\mu)\delta_i y_n(\mu) - \\ & \left. \left. \delta_i \delta_j y_n(\mu)y_l(\mu) - \delta_j y_n(\mu)\delta_i y_l(\mu)] \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) \right\} \right) \\ & \left(8m_T \sum_{l=1}^{n-1} \frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} [\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n(\mu)] \right) \left(1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right) \\ & \left. \left(\sum_{l=1}^{n-1} \frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} [\delta_i y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_i y_n(\mu)] \right) \right] / \left[1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right]^4 \\ \delta_i \delta_j m_l(\mu) = & \delta_i \delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 + 2\delta_j m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_i y_l(\mu)y_n(\mu) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& y_l(\mu)\delta_i y_n(\mu)]2\delta_i m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n(\mu)]2m_n(\mu) \\
& \left(\frac{(\delta_j y_l(\mu)y_n^3(\mu) - 3y_l(\mu)y_n^2(\mu)\delta_i y_n(\mu))}{y_n^6(\mu)} \right) [\delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) - y_l(\mu)\delta_j y_n(\mu)] \\
& 2m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \right) [\delta_i \delta_j y_l(\mu)y_n(\mu) + \delta_j y_l(\mu)\delta_i y_n(\mu) - \delta_i \delta_j y_n(\mu)y_l(\mu) - \\
& \delta_j y_n(\mu)\delta_i y_l(\mu)], l = 1, 2, \dots, n-1 \\
\delta_i \delta_j k_l(\mu) = & \left[2 \{ [\delta_i \delta_j m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_j m_{l-1}(\mu)\delta_i m_l(\mu) + \delta_i \delta_j m_l(\mu)m_{l-1}(\mu) + \right. \\
& \delta_j m_l(\mu)\delta_i m_{l-1}(\mu)] b_{n-l+1}(\mu) + [\delta_j m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)\delta_j m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \\
& \delta_i b_{n-l+1}(\mu) \} \sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)} \frac{b_{n-l+1}(\mu) [\delta_j m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_j m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)]}{\sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)}}, \\
& \left. [\delta_i m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \right] \Bigg/ 4m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) \\
& \frac{\delta_j b_{n-l+1}(\mu) [\delta_i m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)]}{2\sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)}}, \\
& \sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)}\delta_i \delta_j b_{n-l+1}(\mu), l = 2, 3, \dots, n \\
\delta_i \delta_j k_1(\mu) = & \delta_i \delta_j m_1(\mu)a_n(\mu) + \delta_j m_1(\mu)\delta_i a_n(\mu) + \delta_i \delta_j a_n(\mu)m_1(\mu) + \delta_j a_n(\mu)\delta_i m_1(\mu) + \\
& \delta_i \delta_j k_2(\mu)
\end{aligned}$$

O algoritmo anterior é fundamental para obter a matriz Hessiana da função $F(\mu)$ necessária no Cap 5. Como a matriz Hessiana é simétrica, apenas é necessário calcular as derivadas de segunda ordem $\delta_i \delta_j M(\mu)$ e $\delta_i \delta_j K(\mu)$, para $i, j = 1, 2, \dots, n-1$, o qual reduz consideravelmente o custo computacional. Alguns exemplos numéricos para ilustrar a eficiência dos algoritmos 4.1 e 4.2 são considerados na próxima Seção.

4.2 Resultados Computacionais

Os exemplos numéricos apresentados nesta Seção são usados para mostrar a eficiência e precisão dos métodos que calculam as derivadas de primeira e segunda ordem das matrizes massa e rigidez

com relação ao espectro intercalado.

O primeiro exemplo mostra o gráfico das derivadas $(\delta_j m_l, \delta_j k_l)_{l=1}^{n-1}$, $j = 1, 2, \dots, n-1$, das matrizes $M(\mu)$ e $K(\mu)$ correspondentes a dois sistemas massa-mola diferentes com n graus de liberdade cada um. Posteriormente é ilustrado um exemplo que confirma a exatidão numérica do método. Neste caso é determinado um mínimo da função $F(\mu)$ usando o método de Newton, onde a convergência deve ser quadrática. Finalmente, é feita uma comparação do algoritmo 4.1 com uma aproximação por diferenças finitas. Esta comparação mostra claramente as vantagens do algoritmo 4.1 em precisão e eficiência.

4.2.1 Gráficos das derivadas calculadas pelo algoritmo 4.1

As derivadas das massas e constantes de rigidez de um sistema massa-mola calculadas pelo algoritmo 4.1 são calculadas para dois sistemas diferentes. Primeiro, um sistema com 10 graus de liberdade onde todas as massas são iguais a 1.0 e todas as constantes de rigidez iguais a 2.0. Na figura 4.1 pode-se observar que as derivadas $\delta_j m_l$ e $\delta_j k_l$ com relação as últimas variáveis são próximas a zero. O sistema considerado tem um espectro onde os autovalores ficam muito próximos um do outro, como mostra a segunda coluna da Tabela 4.1. O espectro intercalado é listado na terceira coluna. Agora, quando é considerado um sistema com autovalores mais separados um do outro, temos o mesmo comportamento das derivadas, como é mostrado na Tabela 4.2. Os autovalores associados ao sistema aparecem na segunda e terceira colunas. O comportamento particular das derivadas com as últimas derivadas tendendo a zero podem ser exploradas para reduzir o tempo computacional, isto é, as últimas derivadas podem ser assumidas iguais a zero, e somente as primeiras devem ser calculadas.

4.2.2 Derivada numérica exata das massas e constantes de rigidez

A mesma idéia usada no Cap 3 para confirmar numericamente a precisão das derivadas calculadas pelo algoritmo δ -Lanczos será considerada para o algoritmo 4.1. Usando o método de Newton é determinado um mínimo da função

$$F(\mu) = \sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l)^2 + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l)^2,$$

sujeito a $\bar{\lambda}_i < \mu_i < \bar{\lambda}_{i+1}$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, onde $\bar{\lambda}_i$ são os autovalores do sistema $(\bar{M}, \bar{K})$ com massas $\bar{m}_i$ e constantes de rigidez $\bar{k}_i$. O mínimo da função objetivo é o espectro intercalado $\bar{\mu}_i$ associado ao sistema $(\bar{M}, \bar{K})$. Quando é aplicado o método de Newton para determinar o ponto mínimo a convergência a $\bar{\mu}_i$ deve ser quadrática.

Tabela 4.1:

i	λ_i	μ_i	m_i	k_i
1	4.467669e-02	0.195773	1.000000	2.000000
2	0.396124	0.763932	1.000000	2.000000
3	1.067792	1.648858	1.000000	2.000000
4	2.000000	2.763932	1.000000	2.000000
5	3.109916	4.000000	1.000000	2.000000
6	4.298920	5.236067	1.000000	2.000000
7	5.461364	6.351141	1.000000	2.000000
8	6.493959	7.236067	1.000000	2.000000
9	7.304955	7.804226	1.000000	2.000000
10	7.82229		1.000000	2.000000

Tabela 4.2:

i	λ_i	μ_i	m_i	k_i
1	2.000000	4.100000	6.580885	620.718873
2	25.200000	31.300000	0.943997	84.485946
3	49.900000	59.100000	0.267563	17.315852
4	68.600000	78.400000	0.338231	11.988623
5	99.900000	110.200000	0.410301	19.743740
6	123.300000	138.100000	0.520156	23.200994
7	151.600000	159.200000	0.446633	32.037761
8	174.100000	180.200000	0.309431	23.479891
9	205.500000	222.70000	0.146469	11.599404
10	233.30000		3.633107e-02	5.453294

Figura 4.1: Gráficos das derivadas das massas e constantes de rigidez do sistema com 10 graus de liberdade, ilustrado na Tabela 4.1, com relação às nove variáveis.

Figura 4.2: Gráficos das derivadas das massas e constantes de rigidez do sistema com 10 graus de liberdade, ilustrado na Tabela 4.2, com relação às nove variáveis.

Figura 4.3: Gráficos dos $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j -ésima iteração do método de Newton para três valores iniciais diferentes.

Tabela 4.3:

i	$\bar{\lambda}_i$	μ_i^{exato}	$\bar{m}_i$	$\bar{k}_i$	1° μ_i^{vi}	2° μ_i^{vi}	3° μ_i^{vi}
1	0.162028	0.763932	1.000000	2.000000	0.763932	0.863932	0.763932
2	1.380557	2.763932	1.000000	2.000000	2.863932	2.763932	2.963932
3	3.430740	5.236067	1.000000	2.000000	5.336067	5.336067	5.336067
4	5.661660	7.236067	1.000000	2.000000	7.236067	7.236067	7.236067
5	7.365014		1.000000	2.000000			

As Figuras 4.3(a)-4.3(c) mostram os gráficos de $c_j = \log(e_{j+1})/\log(e_j)$, onde e_j , como na Seção 3.4.4, denota o erro absoluto entre a solução exata e aproximada na j -ésima iteração para três valores iniciais diferentes. Neste caso é considerado um sistema com 5 graus de liberdades, onde as massas e constantes de rigidez são listadas na quarta e quinta coluna da Tabela 4.3, respectivamente. Para as três estimativas iniciais diferentes listadas nas três últimas colunas obtém-se valores de c_j próximos a 2.0.

4.2.3 Comparação do algoritmo 4.1 com diferenças finitas

O esquema de diferenças centradas de segunda ordem é usado para comparação com o algoritmo 4.1, onde são calculadas as derivadas das matrizes massa e rigidez com relação a μ_2 . Um sistema com $m_l = 1.0$ e $k_l = 2.0$, $l = 1, 2, \dots, n$, para $n = 10$ e $n = 160$ é considerado. São definidos os erros $\hat{e}_m = \frac{\|m - m^{df}\|_\infty}{\|m\|_\infty}$, $\hat{e}_k = \frac{\|k - k^{df}\|_\infty}{\|k\|_\infty}$, onde m, k são os vetores das massas e constantes de rigidez calculados pelo algoritmo 4.1, e m^{df}, k^{df} os calculados pelo esquema diferenças centradas.

As Tabelas 4.4 e 4.5 mostram os erros relativos para o sistema com 10 e 160 graus de liberdade, respectivamente. Claramente se observa a limitação da aproximação por diferenças finitas que depende da escolha de um valor ótimo de $\Delta\mu_i$. No caso do sistema com $n = 10$ o passo ótimo é $\Delta\mu_i = 1.0e - 07$, embora $\Delta\mu_i = 1.0e - 09$ é o passo ótimo para um sistema maior com $n = 160$. Além disso, evidentemente o custo computacional da aproximação por diferenças finitas não é competitiva com o algoritmo 4.1. mesmo assim o teste valida o algoritmo 4.1.

Tabela 4.4:

$\Delta\mu_2$	$\delta_2 \hat{e}_m$	$\delta_2 \hat{e}_k$
1.0e-03	5.118003e-03	5.464489e-03
1.0e-04	5.108939e-04	5.453706e-04
1.0e-05	5.108047e-05	5.456205e-05
1.0e-06	5.113293e-06	5.450948e-06
1.0e-07	5.399376e-07	5.261679e-07
1.0e-08	6.843436e-07	7.248311e-07
1.0e-09	3.033677e-06	9.348926e-06
1.0e-10	8.288555e-05	8.700465e-05
1.0e-11	1.304199e-03	1.397476e-03

Tabela 4.5:

$\Delta\mu_2$	$\delta_2\hat{e}_m$	$\delta_2\hat{e}_k$
1.0e-06	1.297757e-03	1.298365e-03
1.0e-07	1.296742e-04	1.297913e-04
1.0e-08	1.410730e-05	1.413349e-05
1.0e-09	5.260449e-06	5.261932e-06
1.0e-10	1.866978e-04	1.867709e-04
1.0e-11	1.095633e-03	1.099023e-03

Capítulo 5

Estratégia Multidimensional para o Isolamento de Frequências Naturais em Sistemas Discretos Massa-Mola

O principal objetivo deste trabalho é investigar uma metodologia de solução eficiente e robusta do problema IFSMM. Se é considerado o sistema massa-mola inicial $(\bar{M}, \bar{K})$, onde um ou mais autovalores $\bar{\lambda}_l$ estão dentro de uma banda de ressonância $\beta(c; r)$, então, usando as eqs 2.31, 2.32, e 2.33, deseja-se definir um novo espectro objetivo $(\lambda_l^*)_1^n$ livre de ressonância. Define-se a função $F : \Re^{2n+1} \rightarrow \Re$ por

$$F(m, k, \alpha) = \sum_{l=1}^n (m_l - \bar{m}_l)^2 + \sum_{l=1}^n (k_l - \bar{k}_l)^2 + \alpha \sum_{l=1}^n (\lambda_l(m, k, \alpha) - \lambda_l^*)^2, \quad (5.1)$$

onde o parâmetro α é um multiplicador de Lagrange, e $m = (m_1, m_2, \dots, m_n)$, $k = (k_1, k_2, \dots, k_n)$ são os vetores das massas e constantes de rigidez do sistema (M, K) , com autovalores $(\lambda_l(m, k, \alpha))_1^n$. Uma primeira tentativa para determinar uma solução do problema IFSMM é aplicar a chamada *força bruta*, isto é,

$$\text{Minimizar} \quad F(m, k, \alpha) \quad (5.2)$$

$$\text{sujeito a :} \quad m_l, k_l > 0, \quad l = 1, 2, \dots, n \quad (5.3)$$

Para resolver o problema 5.2 e-5.3, usando um processo de otimização convencional, é necessário calcular o vetor gradiente de F . De fato, o vetor gradiente é dado por

$$\nabla F(m, k, \alpha) = \left(\frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial m_1}, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial m_2}, \dots, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial m_n}, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial k_1}, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial k_2}, \dots, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial k_n}, \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial \alpha} \right),$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial m_j} &= 2(m_j - \bar{m}_j) - 2\alpha \sum_{l=1}^n \lambda_l(m, k, \alpha) (\lambda_l(m, k, \alpha) - \lambda_l^*) (u_j^l(m, k, \alpha))^2, \\ \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial k_j} &= 2(k_j - \bar{k}_j) - 2\alpha \sum_{l=1}^n \lambda_l(m, k, \alpha) (\lambda_l(m, k, \alpha) - \lambda_l^*) (u_{j-1}^l(m, k, \alpha) - u_j^l(m, k, \alpha))^2, \\ u_0^l(m, k, \alpha) &= 0, j = 1, 2, \dots, n, \\ \frac{\partial F(m, k, \alpha)}{\partial \alpha} &= \sum_{l=1}^n \lambda_l(m, k, \alpha) (\lambda_l(m, k, \alpha) - \lambda_l^*)^2, \end{aligned}$$

com $u_j^l(m, k, \alpha)$ os autovetores associados aos autovalores $\lambda_l(m, k, \alpha)$. Então, em cada passo do processo de minimização, precisa-se calcular os autovalores e autovetores de (M, K) . Portanto, é evidente que o procedimento é computacionalmente caro, embora seja seguro. Este fato motiva o desenvolvimento de uma técnica mais sofisticada e eficiente do ponto de vista numérico.

No Cap 2 foi desenvolvida uma técnica inversa, onde um espectro intercalado μ é utilizado como control para minimizar o impacto de re-desenho. A busca unidimensional de μ foi a primeira estratégia usada, onde os resultados numéricos confirmam que a técnica inversa funciona. Mas, tudo indica que uma busca multidimensional do espectro intercalado deveria produzir melhores resultados. Neste caso, a função objetivo é redefinida por $F : \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$ onde

$$F(\mu) = \sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l)^2 + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l)^2. \quad (5.4)$$

O problema torna-se:

$$\text{Minimizar} \quad F(\mu) \quad (5.5)$$

$$\text{sujeito a :} \quad \lambda_l^* < \mu_l < \lambda_{l+1}^* \quad (5.6)$$

A nova formulação do problema diminui o número de variáveis da função objetivo, e a reconstrução inversa garante que o sistema obtido tem os autovalores desejados. Neste Capítulo o problema 5.5, 5.6 é resolvido usando um método de minimização do tipo *Lagrangiano aumentado* com restrições de *canalização* desenvolvido por A. Friedlander, J.M. Martinez, e S.A. Santos [17], que será chamado *método Box* (Ver Apêndice A).

5.1 Estratégia multidimensional para matrizes de Jacobi

Nesta Seção um estudo prévio da estratégia multidimensional para as matrizes de Jacobi é realizado. Aqui é formulado um problema para este tipo de matrizes, de maneira semelhante a 5.5 - 5.6, onde é resolvido usando o método de minimização Box. Os resultados numéricos obtidos mostram a eficiência e precisão da estratégia inversa, e servem como referência para a estratégia multidimensional aplicada em sistemas massa-mola. Na Seção seguinte são apresentados alguns resultados da estratégia aplicada ao problema 5.5 - 5.6, onde os autovalores não são isolados ainda.

Considerar a matriz de Jacobi $\bar{J}$ com elementos diagonais e co-diagonais $(\bar{a}_l)_1^n$ e $(\bar{b}_l)_1^{n-1}$, respectivamente. Os autovalores de $\bar{J}$ são denotados por $(\bar{\lambda}_l)_1^n$. Então, será resolvido o seguinte problema:

$$\text{Minimizar} \quad F(\mu) \quad (5.7)$$

$$\text{sujeito a :} \quad \bar{\lambda}_l < \mu_l < \bar{\lambda}_{l+1}, \quad l = 1, 2, \dots, n-1 \quad (5.8)$$

onde a função objetivo é dada por:

$$F(\mu) = \sum_{l=1}^n (a_l(\mu) - \bar{a}_l)^2 + \sum_{l=1}^{n-1} (b_l(\mu) - \bar{b}_l)^2, \quad (5.9)$$

Observe-se que neste caso não é considerado o isolamento de frequências, já que pretende-se comprovar a precisão e eficiência da estratégia.

Para resolver o problema 5.7 - 5.8 será usado o método de minimização Box. O método é do tipo região-de confiança que usa técnicas de Lagrangiano aumentado para minimizar uma função diferenciável de várias variáveis com restrições de canalização, como em 5.8. Em cada iteração o algoritmo, considera o problema de minimizar uma função quadrática (não necessariamente convexa) em uma caixa que consiste na interseção da caixa original $\bar{\lambda}_l \leq \mu_l \leq \bar{\lambda}_{l+1}$ com a região-de confiança. O método resolve o subproblema em um número finito de passos, e a convergência do algoritmo principal é global. Uma descrição geral do método encontra-se no Apêndice A. Na implementação, é necessário calcular, precisamente, o vetor gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo.

O vetor gradiente de F em 5.9 é dado por

$$\nabla F(\mu) = \left(\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_1}, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_2}, \dots, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_{n-1}} \right),$$

Tabela 5.1:

l	$\bar{\lambda}_l$	$\bar{\mu}_l$	$\bar{a}_l$	$\bar{b}_l$
1	2.000000	4.100000	107.159567	33.896662
2	25.200000	31.300000	107.841199	34.454446
3	49.900000	59.100000	109.523548	39.851889
4	68.600000	78.400000	93.818409	52.999396
5	99.900000	110.200000	104.666395	50.221355
6	123.300000	138.100000	106.196499	66.469090
7	151.600000	159.200000	124.302522	63.159464
8	174.100000	180.200000	113.367018	54.485367
9	205.500000	222.700000	116.424839	74.756003
10	233.300000		150.100000	

onde

$$\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_j} = 2 \left(\sum_{l=1}^n (a_l(\mu) - \bar{a}_l) \frac{\partial a_l(\mu)}{\partial \mu_j} + \sum_{l=1}^{n-1} (b_l(\mu) - \bar{b}_l) \frac{\partial b_l(\mu)}{\partial \mu_j} \right), \quad (5.10)$$

com $j = 1, 2, \dots, n-1$. A matriz Hessiana de ordem $(n-1)$ é denotada por $\mathcal{H}(F(\mu)) = \left[\frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right]_{i,j}$, para $i, j = 1, 2, \dots, n-1$, cujos elementos são

$$\frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} = 2 \left[\sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial a_l(\mu)}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial a_l(\mu)}{\partial \mu_j} + (a_l(\mu) - \bar{a}_l) \frac{\partial^2 a_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right) + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{\partial b_l(\mu)}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial b_l(\mu)}{\partial \mu_j} + (b_l(\mu) - \bar{b}_l) \frac{\partial^2 b_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right) \right]. \quad (5.11)$$

O vetor $\nabla F(\mu)$ e a matriz $\mathcal{H}(F(\mu))$ são calculados exatamente pelo algoritmo δ^2 -Lanczos discutido no Cap 3.

Agora são apresentados dois exemplos para mostrar a eficiência e precisão da estratégia multidimensional. Primeiro considera-se uma matriz de Jacobi $\bar{J}$ de ordem $n = 10$, reconstruída a partir dos autovalores $(\bar{\lambda}_l)_1^n$ e do espectro intercalado $(\bar{\mu}_l)_1^{n-1}$, listados nas segunda e terceira colunas da Tabela 5.1. Os elementos diagonais e co-diagonais são listados nas últimas duas colunas da Tabela 5.1.

Tabela 5.2:

Teste	1	2	3	4
Semente	-32	-534	-874	-134
Valor Inicial μ_l^{vi}	20.664984	3.939989	10.435355	17.266867
	25.587827	25.661028	31.269730	47.004189
	65.193392	55.182609	58.449697	56.322310
	77.377424	80.987565	99.797519	71.418712
	105.037475	105.801215	118.048343	107.081715
	138.353516	133.326691	147.340775	138.056062
	157.834363	163.528796	163.794645	157.196778
	185.502545	178.055610	205.392960	197.315508
	221.315283	208.461471	231.529263	222.587991
$F(\mu^*)$	5.026349e-23	5.052839e-23	5.038471e-23	5.040611e-23
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	1.096885e-12	7.598532e-13	9.134648e-13	6.694171e-13
Nº Iterações do Box	18	17	30	16

O exemplo consiste em usar o método de minimização Box a partir de um valor inicial gerado aleatoriamente. Se μ^* é a solução obtida depois de aplicar o método Box, então o resultado ideal é que a função objetivo e o vetor gradiente anulam-se em μ^* , isto é, $F(\mu^*) = \|\nabla F(\mu^*)\| = 0$.

Para aplicar o algoritmo Box é necessário um valor inicial $(\mu_l^{vi})_1^{n-1}$ tal que $\bar{\lambda}_l < \mu_l^{vi} < \bar{\lambda}_{l+1}$. Esses valores serão gerados de maneira aleatória. A sequência de números aleatórios $(r_l)_1^{n-1}$, com $0 < r_l < 1$, gerados a partir de um número inteiro negativo (*semente*), produzem os $(\mu_l)_1^{n-1}$. Uma vez gerados os r_l (usando a função *ran1(idum)* (Ver Pág 271 [46])) os μ_l^{vi} são definidos tal que a propriedade de intercalamento seja satisfeita, isto é,

$$\mu_l^{vi} = r_l(\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l) + \bar{\lambda}_l, \quad (5.12)$$

para $l = 1, 2, \dots, n-1$.

Para a matriz especificada na Tabela 5.1 são considerados quatro valores iniciais diferentes gerados aleatoriamente, como se mostra na Tabela 5.2. Claramente, os resultados são excelentes e confirmam numericamente a eficiência e precisão da estratégia multidimensional para matrizes de Jacobi. Além disso, o número de iterações depende da precisão desejada.

Resultados semelhantes são obtidos quando é considerada uma matriz de ordem maior. A

Tabela 5.3:

l	$\bar{\lambda}_l$	$\bar{\mu}_l$	$\bar{a}_l$	$\bar{b}_l$
1	2.000000	4.100000	282.029006	34.587074
2	25.200000	31.300000	306.464908	36.426390
3	49.900000	59.100000	326.067187	69.587190
4	68.600000	78.400000	390.287454	63.301072
5	99.900000	110.200000	367.011759	96.169085
6	123.300000	138.100000	379.924427	109.084714
7	151.600000	159.200000	345.579715	105.377488
8	174.100000	180.200000	331.163895	114.039434
9	205.500000	222.700000	374.566907	108.208757
10	233.300000	239.500000	347.969239	131.367745
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
21	471.400000	488.800000	366.404336	172.092847
22	499.900000	518.600000	372.180394	186.380674
23	526.300000	538.700000	344.624625	177.687484
24	546.600000	557.900000	360.263570	172.027022
25	566.700000	577.700000	334.364440	189.394845
26	584.500000	599.100000	363.853506	177.399042
27	617.700000	633.400000	352.799364	179.046412
28	649.100000	673.900000	357.379883	188.856109
29	691.600000	702.900000	380.178400	234.019635
30	715.800000		373.600000	

Tabela 5.4:

<i>Teste</i>	1	2	3	4
<i>Semente</i>	-97	-34	-645	-743
<i>Valor Inicial</i> $(\mu_l^{vi})_1^{10}$	22.900777	3.977444	20.067230	15.854319
	38.014544	36.660210	35.456568	29.231767
	62.950479	56.977872	54.093007	66.737914
	77.941897	93.472472	95.541667	74.712660
	100.660531	122.316893	121.263270	104.861582
	130.820885	130.584935	129.873926	146.811493
	163.480189	160.886110	167.101698	157.017602
	182.286443	174.736601	201.442076	189.040448
	213.389595	205.845821	210.442076	218.426908
	239.372340	241.596967	245.378757	237.519077
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
<i>Valor Inicial</i> $(\mu_l^{vi})_{21}^{30}$	452.266785	457.869049	456.639647	469.724618
	493.558632	478.351692	472.223221	478.575039
	515.571818	510.678833	519.780418	511.030757
	545.389932	526.970209	531.983793	530.857665
	549.274538	558.580716	556.222213	547.583272
	575.950524	571.462921	566.808746	583.384678
	607.045893	592.781370	595.954566	610.149579
	641.933566	646.572857	620.536234	623.503309
	689.649098	681.897332	672.608771	653.639470
	707.493907	696.379149	701.167576	704.789958
$F(\mu^*)$	2.373702e-22	2.397967e-22	2.386921e-22	2.368195e-22
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	7.967346e-12	1.014289e-11	8.220153e-12	9.466727e-12
<i>Nº Iterações</i> <i>do Box</i>	18	30	22	22

Tabela 5.3 ilustra os primeiros e últimos dez autovalores e elementos de uma matriz de ordem $n = 30$. Para os valores iniciais listados na Tabela 5.4 os resultados novamente são excelentes.

Observe-se que as restrições de canalização 5.8 não permitem um bom desempenho do método Box quando o espaçamento dos autovalores é pequeno. Neste caso, é necessário usar métodos de otimização mais eficientes e robustos.

5.2 Estratégia multidimensional para sistemas massa-mola

Os resultados obtidos na Seção anterior sugerem que a estratégia multidimensional aplicada a sistemas massa-mola também deve ser eficiente e exata.

5.2.1 Massa total constante

Primeiro é considerado o problema 5.5 - 5.6, isto é, deve-se achar um ponto mínimo da função

$$F(\mu) = \sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l)^2 + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l)^2,$$

onde $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$ é sujeito à restrição de canalização

$$\bar{\lambda}_l < \mu_l < \bar{\lambda}_{l+1}, \quad l = 1, 2, \dots, n-1,$$

onde os $\bar{\lambda}_l$ correspondem aos autovalores do sistema inicial $(\bar{M}, \bar{K})$. Numa primeira etapa os autovalores $\bar{\lambda}_l$ supõem-se livre de ressonância, isto é, dada uma banda de ressonância $\beta(c; r)$, não existe nenhum autovalor $\bar{\lambda}_l$ contido em $\beta(c; r)$. Observa-se que, de acordo à formulação do problema, na reconstrução do sistema, a massa total m_T é considerada constante.

Aqui, como na Seção anterior, será usado o algoritmo Box para determinar um ponto estacionário de F com a restrição de canalização de acima. O vetor gradiente e a matriz Hessiana são obtidos do algoritmo 4.2, o qual calcula as derivadas de primeira e segunda ordem das massas e constantes de rigidez de um sistema massa-mola.

No primeiro exemplo é considerado um sistema com 10 graus de liberdade, cujas massas e constantes de rigidez são listadas na Tabela 5.5. Os autovalores e espectro intercalado do sistema correspondem aos mesmos utilizados no primeiro exemplo da Seção 5.1.

O valor inicial μ_l^{vi} é gerado por 5.12, isto é,

Tabela 5.5:

l	$\bar{\lambda}_l$	$\bar{\mu}_l$	$\bar{m}_l$	$\bar{k}_l$
1	2.000000	4.100000	6.580885	620.718873
2	25.200000	31.300000	0.943997	84.485946
3	49.900000	59.100000	0.267563	17.315852
4	68.600000	78.400000	0.338231	11.988623
5	99.900000	110.200000	0.410301	19.743740
6	123.300000	138.100000	0.520156	23.200994
7	151.600000	159.200000	0.446633	32.037761
8	174.100000	180.200000	0.309431	23.479891
9	205.500000	222.700000	0.146469	11.599404
10	233.300000		0.036331	5.453294

$$\mu_l^{vi} = r_l(\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l) + \bar{\lambda}_l, l = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5.13)$$

garantindo a propriedade de intercalamento dos autovalores. Note-se que, para os exemplos ilustrados nesta Seção, são gerados aleatoriamente 10 sementes a partir da semente igual a -431. Se μ^* é o ponto mínimo de F , e os autovalores não foram isolados (não perturbados), o resultado ideal é $F(\mu^*) = \|\nabla F(\mu^*)\| = 0$.

Para os valores iniciais listados na Tabela 5.6, o método só determina mínimos locais exceto em dois casos, e em outros não converge. Este fato, a princípio, foi atribuído a que o valor inicial fica muito próximo dos autovalores $\bar{\lambda}_l$, o que não permitiria encontrar uma direção de descida à μ^* . Uma forma de evitar este problema é redefinir o valor inicial aleatório, de maneira de manter um mínimo de afastamento dos $\bar{\lambda}_l$. Se cada elemento μ_l^{vi} fica a uma distância ε_l do correspondente $\bar{\lambda}_l$, então o valor inicial é gerado por

$$\mu_l^{vi} = r_l(\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l - 2\varepsilon_l) + \bar{\lambda}_l + \varepsilon_l, l = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5.14)$$

onde $\varepsilon_l = \frac{\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l}{d}$, com $d > 2$.

A Tabela 5.7 mostra os novos resultados quando os chutes iniciais foram gerados por 5.14. Neste caso, os resultados melhoram, mas o ponto mínimo é atingido só em 40% dos casos.

Experimentos numéricos indicam que existem vários mínimos locais em torno de μ^* , e provavelmente os mínimos locais *ficam presos em pontos estacionários*, não permitindo encontrar uma

Tabela 5.6:

<i>Teste</i>	1	2	3	4	5
<i>Semente</i>	-504	-633	-455	-181	-186
<i>Valor Inicial</i> μ_l^{vi}	20.662851	3.719424	15.680315	6.927088	13.657698
	40.763862	47.525689	27.557579	42.775738	44.027523
	53.476818	59.129437	68.200008	66.969006	54.718536
	94.417956	80.887076	85.429832	98.755699	84.506436
	109.250164	111.880632	113.464484	100.280406	101.066478
	132.075856	137.073669	125.585779	127.805034	144.289094
	172.375311	159.735661	156.759909	158.531292	154.005053
	188.468475	188.773248	196.560488	191.072328	205.190209
	208.433486	207.687364	215.701386	210.998838	227.787323
$F(\mu^*)$	2.669187e-02	6.637624e-02	0.168722	2520.29	16554.89
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	7.243332e-11	4.281554e-12	9.323253e-11	51.623383	>1.0e+6
<i>Nº Iterações do Box</i>	91	39	143	78	37
<i>Teste</i>	6	7	8	9	10
<i>Semente</i>	-458	-634	-901	-727	-565
<i>Valor Inicial</i> μ_l^{vi}	4.049776	15.261962	2.245973	4.359547	8.381661
	26.569971	44.619018	27.361948	31.337482	26.164114
	63.441169	66.277270	67.995560	53.848205	56.901850
	85.229397	94.884245	80.162132	75.815049	86.348819
	107.405640	121.116196	111.313442	115.176130	117.409582
	132.241843	143.695296	145.051031	133.435692	139.285143
	157.991212	155.987345	162.605854	173.504946	167.294370
	191.417028	188.809734	201.342231	191.507637	182.623442
	226.392924	228.089196	211.753869	220.897028	207.041618
$F(\mu^*)$	1.521928e-24	2535.73	0.168722	1.006438e-01	5.814132e-26
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	1.834033e-10	414.36	2.869545e-10	9.447362e-10	1.771964e-11
<i>Nº Iterações do Box</i>	95	74	50	61	145

Tabela 5.7:

<i>Teste</i>	1	2	3	4	5
<i>Semente</i>	-504	-633	-455	-181	-186
<i>d</i>	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
	5.0	5.0		5.0	5.0
	2.5	2.5		2.5	2.5
$F(\mu^*)$	25080.55	6.637624e-02	7.033769e-26	2534.73	25080.55
	25080.55	2.669187e-02		0.168722	113.30
	7.829929e-02	6.637624e-02		0.168722	2736.11
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	43001.25	5.948187e-07	1.388844e-11	>1.0e+6	26396.33
	15474.44	2.816938e-10	8.676728	7.570119e-11	38382.94
	5.864495	3.167124e-09	5.333652e-11	5.910829e-09	65.02
<i>Nº Iterações do Box</i>	24	210	63	214	26
	24	40		86	66
	53	52		114	31
<i>Teste</i>	6	7	8	9	10
<i>Semente</i>	-458	-634	-901	-727	-565
<i>d</i>	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
	5.0	5.0	5.0	5.0	5.0
		2.2	2.5		
$F(\mu^*)$	8.587594e-26	2533.68	1.006438e-01	1.006438e-01	1.006438e-01
	7.864088e-26	2238.42	1.006438e-01	8.020049e-25	6.753230e-26
		0.168722	6.414607e-25		
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	1.009939e-11	4134.78	9.573891e-10	2.787080e-10	3.011135e-07
	1.563983e-11	8630.76	1.663860e-05	1.275009e-10	1.557475e-11
		7.912420e-10	1.152423e-10		
<i>Nº Iterações do Box</i>	88	36	46	52	65
	158	189	41	109	474
		42	61		

direção de descida ao mínimo. Em todos os estudos anteriores a massa total m_T foi considerada constante. Este fato sugere uma reformulação do problema, onde m_T é considerada uma variável independente, permitindo relaxar o processo de minimização na busca do μ^* .

5.2.2 Massa total como variável independente

Se a massa total m_T é considerada uma variável independente, então o problema variacional 5.7 - 5.8 torna-se:

$$\text{Minimizar} \quad F(\mu) \quad (5.15)$$

$$\text{sujeito a :} \quad \bar{\lambda}_l < \mu_l < \bar{\lambda}_{l+1}, l = 1, 2, \dots, n-1 \quad (5.16)$$

$$a < m_T < b, \quad b > a > 0, \quad (5.17)$$

onde a função objetivo é a mesma do 5.4, só que agora $\mu \in \mathbb{R}^n$, com $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1}, m_T)$. Se $\mu_n \equiv m_T$, o vetor gradiente será da forma

$$\nabla F(\mu) = \left(\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_1}, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_2}, \dots, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_{n-1}}, \frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_n} \right),$$

onde

$$\frac{\partial F(\mu)}{\partial \mu_j} = 2 \left(\sum_{l=1}^n (m_l(\mu) - \bar{m}_l) \frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_j} + \sum_{l=1}^n (k_l(\mu) - \bar{k}_l) \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_j} \right), \quad (5.18)$$

com $j = 1, 2, \dots, n$. A matriz Hessiana $\mathcal{H}(F(\mu)) = \left[\frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right]_{i,j}$ tem $n \times n$ elementos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} = & 2 \left[\sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_j} + (m_l(\mu) - \bar{m}_l) \frac{\partial^2 m_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{l=1}^n \left(\frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_i} \cdot \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_j} + (k_l(\mu) - \bar{k}_l) \frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_j} \right) \right], \end{aligned} \quad (5.19)$$

para $i, j = 1, 2, \dots, n$. Por tanto, para obter $\nabla F(\mu)$ e $\mathcal{H}(F(\mu))$ falta calcular explicitamente as derivadas de primeira ordem $\delta_n m_l(\mu) \equiv \frac{\partial m_l(\mu)}{\partial \mu_n}$, $\delta_n k_l(\mu) \equiv \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial \mu_n}$, e da segunda ordem $\delta_i \delta_n m_l(\mu) \equiv \frac{\partial^2 m_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_n} = \frac{\partial^2 m_l(\mu)}{\partial \mu_n \partial \mu_i}$, $\delta_i \delta_n k_l(\mu) \equiv \frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_n} = \frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_n \partial \mu_i}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Diferenciando m_n em 2.28 com relação a μ_n , obtém-se

$$\delta_n m_n(\mu) = \frac{1}{1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2}, \quad (5.20)$$

e diferenciando o resto das massas $(m_l)_1^{n-1}$ em 2.26

$$\delta_n m_l(\mu) = \frac{\left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)}\right)^2}{1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)}\right)^2}, \quad (5.21)$$

com $l = 1, 2, \dots, n-1$. Para calcular as derivadas das constantes de rigidez k_l com relação a μ_n , deve considerar-se que k_l depende de $m(\mu) = (m_1(\mu), m_2(\mu), \dots, m_n(\mu))$. Assim,

$$\delta_n k_l(\mu) = \nabla k_l(m(\mu)) \cdot \frac{\partial \vec{m}(\mu)}{\partial \mu_n}, \quad (5.22)$$

onde

$$\nabla k_l(m(\mu)) = \left(\frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_1}, \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_2}, \dots, \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_n} \right), \quad (5.23)$$

e

$$\frac{\partial \vec{m}(\mu)}{\partial \mu_n} = \left(\frac{\partial m_1(\mu)}{\partial \mu_n}, \frac{\partial m_2(\mu)}{\partial \mu_n}, \dots, \frac{\partial m_n(\mu)}{\partial \mu_n} \right). \quad (5.24)$$

Então,

$$\delta_n k_l(\mu) = \sum_{j=1}^n \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_j} \cdot \frac{\partial m_j(\mu)}{\partial \mu_n}, \quad (5.25)$$

onde

$$\frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_j} = \begin{cases} \frac{m_{l-1}(\mu)b_{n-l+1}(\mu)}{2\sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)}} & , \text{ se } j = l \\ \frac{m_l(\mu)b_{n-l+1}(\mu)}{2\sqrt{m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)}} & , \text{ se } j = l-1 \\ 0 & , \text{ q.o.c.} \end{cases} \quad (5.26)$$

para $j = 1, 2, \dots, n$, $l = 2, 3, \dots, n$, e

$$\frac{\partial k_1(\mu)}{\partial m_j} = \begin{cases} a_n(\mu) - \frac{\partial k_2(\mu)}{\partial m_j} & , \text{ se } j = 1 \\ -\frac{\partial k_2(\mu)}{\partial m_j} & , \text{ se } j = 2, 3, \dots, n \end{cases} \quad (5.27)$$

Aqui $a_n(\mu)$ e $b_{n-l+1}(\mu)$ são os elementos da matriz de Jacobi $J(\mu)$ relativa ao sistema $(M(\mu), K(\mu))$.

Agora, para calcular as derivadas mistas $(\delta_i \delta_n m_l(\mu), \delta_i \delta_n k_l(\mu))_{l=1}^n$, $i = 1, 2, \dots, n-1$, primeiro são consideradas as eqs 5.20 e 5.21 para ser diferenciadas com relação a μ_i , isto é,

$$\delta_i \delta_n m_n(\mu) = \frac{-2 \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} (\delta_i y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_i y_n(\mu)) \right)}{\left[1 + \sum_{l=1}^{n-1} \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 \right]^2}, \quad (5.28)$$

e

$$\delta_i \delta_n m_l(\mu) = \delta_i \delta_n m_n(\mu) \left(\frac{y_l(\mu)}{y_n(\mu)} \right)^2 + 2 \frac{y_l(\mu)}{y_n^3(\mu)} \delta_n m_n(\mu) [\delta_i y_l(\mu) y_n(\mu) - y_l(\mu) \delta_i y_n(\mu)], \quad (5.29)$$

para $i, l = 1, 2, \dots, n-1$. Por outra parte, diferenciando a eq 5.25 com relação a μ_i , obtém-se

$$\delta_i \delta_n k_l(\mu) = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial m_j} \cdot \frac{\partial m_j(\mu)}{\partial \mu_n} + \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_j} \cdot \frac{\partial^2 m_j(\mu)}{\partial \mu_i \partial \mu_n} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5.30)$$

onde,

$$\frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_i \partial m_j} = \begin{cases} \left[2m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)[b_{n-l+1}(\mu)\delta_i m_{l-1}(\mu) + \delta_i b_{n-l+1}(\mu)m_{l-1}(\mu)] - \right. \\ \left. m_{l-1}(\mu)b_{n-l+1}(\mu)[\delta_i m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \right] \cdot \frac{1}{4[m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)]^{3/2}} & , \text{ se } j = l \\ \left[2m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)[b_{n-l+1}(\mu)\delta_i m_l(\mu) + \delta_i b_{n-l+1}(\mu)m_l(\mu)] - \right. \\ \left. m_l(\mu)b_{n-l+1}(\mu)[\delta_i m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_i m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \right] \cdot \frac{1}{4[m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)]^{3/2}} & , \text{ se } j = l-1 \\ 0 & , \text{ q.o.c.} \end{cases} \quad (5.31)$$

$l = 2, 3, \dots, n$, e

$$\frac{\partial^2 k_1(\mu)}{\partial \mu_i \partial m_j} = \begin{cases} -\frac{\partial^2 k_2(\mu)}{\partial \mu_i \partial m_j} & , \text{ se } j = 2, 3, \dots, n \\ \frac{\partial a_n(\mu)}{\partial \mu_i} - \frac{\partial^2 k_2(\mu)}{\partial \mu_i \partial m_j} & , \text{ se } j = 1 \end{cases} \quad (5.32)$$

Finalmente, são calculadas $\delta_n \delta_n m_l(\mu) \equiv \frac{\partial^2 m_l(\mu)}{\partial \mu_n(\mu) \partial \mu_n(\mu)}$, e $\delta_n \delta_n k_l(\mu) \equiv \frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_n(\mu) \partial \mu_n(\mu)}$. Claramente, diferenciando as eqs 5.20 e 5.21 com relação a μ_n , obtém-se

$$\delta_n \delta_n m_l(\mu) = 0, l = 1, 2, \dots, n. \quad (5.33)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \delta_n \delta_n k_l(\mu) &= \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_n \partial \mu_n} \cdot \frac{\partial m_j(\mu)}{\partial \mu_n} + \frac{\partial k_l(\mu)}{\partial m_j} \cdot \frac{\partial^2 m_j(\mu)}{\partial \mu_n \partial \mu_n} \right) \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_n \partial \mu_n} \cdot \frac{\partial m_j(\mu)}{\partial \mu_n} \right), l = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (5.34)$$

onde

$$\frac{\partial^2 k_l(\mu)}{\partial \mu_n \partial m_j} = \begin{cases} \left[2m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)b_{n-l+1}(\mu)\delta_n m_{l-1}(\mu) - \right. \\ \left. m_{l-1}(\mu)b_{n-l+1}(\mu)[\delta_n m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_n m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \right] \frac{1}{4[m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)]^{3/2}} & , \text{ se } j = l \\ \left[2m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)b_{n-l+1}(\mu)\delta_n m_l(\mu) - \right. \\ \left. m_l(\mu)b_{n-l+1}(\mu)[\delta_n m_{l-1}(\mu)m_l(\mu) + \delta_n m_l(\mu)m_{l-1}(\mu)] \right] \frac{1}{4[m_{l-1}(\mu)m_l(\mu)]^{3/2}} & , \text{ se } j = l - 1 \\ 0 & , \text{ q.o.c.} \end{cases} \quad (5.35)$$

para $l = 2, 3, \dots, n$, e

$$\frac{\partial^2 k_1(\mu)}{\partial \mu_n \partial m_j} = -\frac{\partial^2 k_2(\mu)}{\partial \mu_n \partial m_j}. \quad (5.36)$$

Uma vez calculadas as derivadas de primeira e segunda ordem das massas e constantes de rigidez, com relação à massa total, o algoritmo 4.2 é adaptado adequadamente para calcular o vetor gradiente $F(\mu)$ e a matriz Hessiana $\mathcal{H}(F(\mu))$.

Agora, o algoritmo Box é aplicado para os mesmos valores iniciais gerados na Seção 5.2.1, isto é,

$$\begin{aligned} \mu_l^{vi} &= r_l(\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l - 2\varepsilon_l) + \bar{\lambda}_l + \varepsilon_l, l = 1, 2, \dots, n-1, \\ &\text{e} \\ \mu_n^{vi} &= r_n(b - a - 2\varepsilon_n) + \bar{\lambda}_l + \varepsilon_n, \end{aligned} \quad (5.37)$$

Tabela 5.8:

Teste	1	2	3	4	5
Semente	-504	-633	-455	-181	-186
d_1	5.0	1000.0	1000.0	3.0	3.0
d_2	100.0	5.0	1000.0	100.0	5.0
$F(\mu^*)$	1.973449e-24	2.290694e-23	1.719045e-24	6.415210e-24	8.790579e-25
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	5.469392e-08	2.058682e-08	8.564058e-07	1.897278e-08	2.333149e-08
N° Iterações do Box	45	64	45	197	60
Teste	6	7	8	9	10
Semente	-458	-634	-901	-727	-565
d_1	1000.0	5.0	2.5	5.0	5.0
d_2	100.0	1000.0	100.0	100.0	1000.0
$F(\mu^*)$	4.422421e-24	7.211806e-25	7.130100e-24	1.501836e-22	4.263959e-25
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	9.847940e-10	2.487210e-08	2.607095e-08	2.543513e-07	4.279466e-08
N° Iterações do Box	40	85	77	37	100

onde $\varepsilon_l = \frac{\bar{\lambda}_{l+1} - \bar{\lambda}_l}{d_1}$, e $\varepsilon_n = \frac{b-a}{d_2}$ com $d_1, d_2 > 2.0$.

A Tabela 5.8 mostra que em todos os casos o ponto μ^* foi atingido, confirmando numericamente que a estratégia multidimensional aplicada em sistemas massa-mola é eficiente e precisa.

No estudo anterior, não houve isolamentos de frequências, isto é, nenhum autovalor está dentro de uma banda de ressonância $\beta(c; r)$ (os autovalores não foram perturbados). Agora, o problema, onde um ou mais autovalores estão dentro de $\beta(c; r)$, será considerado.

Seja $(\bar{M}, \bar{K})$ o sistema massa-mola com autovalores $(\bar{\lambda}_i)_1^n$ tal que $\bar{\lambda}_i \in \beta(c; r)$, com $i = k, k+1, \dots, m, 1 < k \leq m < n$.

Antes de aplicar a estratégia multidimensional devem ser removidos os autovalores que ficam dentro de $\beta(c; r)$. Isto é possível aplicando o procedimento descrito no Cap 2. Supondo que

$$\bar{\lambda}_i \in \begin{cases} (c-r, c] & , i = k, k+1, \dots, l \\ (c, c+r) & , i = l+1, l+2, \dots, m \end{cases}.$$

Então os autovalores que estão dentro do intervalo $(c - r, c]$ podem ser removidos pela relação

$$\lambda_i^* = \bar{\lambda}_{k-1} + \frac{(\bar{\lambda}_i - c + r)(c - r - \bar{\lambda}_{k-1})}{r}, \quad (5.38)$$

com $i = k, k + 1, \dots, l$. Os autovalores que ficam no intervalo $(c, c + r)$ podem ser isolados por

$$\lambda_i^* = c + r + \frac{(\bar{\lambda}_{m+1} - c - r)(\bar{\lambda}_i - c)}{r}, \quad (5.39)$$

para $i = l + 1, l + 2, \dots, m$. Enquanto que, os autovalores fora da banda de ressonância são mantidos, isto é,

$$\lambda_i^* = \bar{\lambda}_i, \forall i \neq j, j = k, k + 1, \dots, m. \quad (5.40)$$

Observação: Note-se que, se é considerada a banda com centro $c = 111.0$ e raio $r = 14.0$, os autovalores $\bar{\lambda}_5 = 99.9$ e $\bar{\lambda}_6 = 123.3$ do sistema $(\bar{M}, \bar{K})$, listado na Tabela 5.5, devem ser removidos. Usando o procedimento 5.38, 5.39, 5.40, os autovalores isolados tornam-se $\lambda_5^* = 74.48$ e $\lambda_6^* = 148.37$. Claramente, o exemplo mostra que os autovalores que devem ser removidos podem ficar longe dos extremos da banda, o que pode prejudicar o desempenho da estratégia multidimensional. Isto é evitado introduzindo um fator $\delta > 2.0$ no processo de isolamento de tal maneira que os autovalores removidos não sejam perturbados demais. Então,

$$\lambda_i^* = \eta + \frac{(\bar{\lambda}_i - c + r)(c - r - \bar{\lambda}_{k-1})}{r}, i = k, k + 1, \dots, l, \quad (5.41)$$

com $\eta = c - r - \frac{c - r - \bar{\lambda}_{k-1}}{\delta}$, e

$$\lambda_i^* = c + r + \frac{(\xi - c - r)(\bar{\lambda}_i - c)}{r}, i = l + 1, l + 2, \dots, m, \quad (5.42)$$

onde $\xi = c + r + \frac{\bar{\lambda}_{m+1} - c - r}{\delta}$.

Agora, os autovalores removidos, do exemplo anterior, tornam-se

$$\begin{aligned} \lambda_5^* &= 94.74, \quad \lambda_6^* = 127.33, \quad \text{se } \delta = 10.0 \\ \lambda_5^* &= 96.77, \quad \lambda_6^* = 125.23, \quad \text{se } \delta = 100.0 \\ \lambda_5^* &= 96.97, \quad \lambda_6^* = 125.02, \quad \text{se } \delta = 1000.0. \end{aligned}$$

O fator δ , serve também para controlar o espaçamento entre autovalores quando devem ser removidos mais de dois. Por exemplo, se $r = 148.7$ e $c = 25.5$ então $\bar{\lambda}_6 = 123.3$, $\bar{\lambda}_7 = 151.6$, $\bar{\lambda}_8 = 174.1 \in \beta(148.7; 25.5)$. Assim, para diferentes valores de δ , os autovalores isolados ficam

$$\begin{aligned}
\lambda_6^* &= 117.39, \quad \lambda_7^* = 175.08, \quad \lambda_8^* = 181.99, \quad \text{se } \delta = 4.0 \\
\lambda_6^* &= 120.29, \quad \lambda_7^* = 174.64, \quad \lambda_8^* = 178.09 \quad \text{se } \delta = 8.0 \\
\lambda_6^* &= 121.74, \quad \lambda_7^* = 174.42, \quad \lambda_8^* = 176.14 \quad \text{se } \delta = 16.0 \\
\lambda_6^* &= 122.47, \quad \lambda_7^* = 174.31, \quad \lambda_8^* = 175.17 \quad \text{se } \delta = 32.0.
\end{aligned}$$

Depois da observação relativa ao procedimento de isolamento dos autovalores indesejados, são considerados alguns exemplos a fim de comprovar a eficiência da estratégia multidimensional em sistemas massa-mola submetidos a ressonância, isto é, quando um ou mais autovalores ficam dentro de uma banda $\beta(c; r)$. Em todos os exemplos, o sistema-modelo terá 10 graus de liberdade como listado na Tabela 5.5. Além disso, o algoritmo Box utilizará o valor inicial gerado a partir da semente cujo valor é -458. No primeiro exemplo, são considerados três testes diferentes quando um autovalor fica dentro de $\beta(c; r)$. A Tabela 5.9 mostra os resultados da estratégia multidimensional quando é removido o autovalor $\bar{\lambda}_2$ de uma banda com centro igual a 26.0 e raio igual a 0.9, 2.0, e 4.0. Logo, é isolado um autovalor correspondente ao meio do espectro, $\bar{\lambda}_6$, e posteriormente o autovalor $\bar{\lambda}_9$, também com três bandas diferentes cada um. As Figuras 5.1, 5.2, e 5.3 ilustram os sistemas recuperados depois de aplicar a estratégia multidimensional, os quais são comparados com o sistema inicial. Do lado esquerdo são ilustradas as massas, e do direito as constantes de rigidez. Pode confirmar-se que os autovalores, correspondentes às frequências baixas, são mais sensível a perturbações, enquanto que as altas tem uma sensibilidade menor.

Agora, se dois autovalores devem ser isolados, os resultados são semelhantes ao primeiro exemplo. A Tabela 5.10 mostra os casos quando são isolados os autovalores $\bar{\lambda}_2$, $\bar{\lambda}_3$, depois dois, pertencente ao meio do espectro, $\bar{\lambda}_5$, $\bar{\lambda}_6$, e finalmente os autovalores extremos $\bar{\lambda}_8$, $\bar{\lambda}_9$. A sensibilidade é maior que no caso anterior, mesmo assim as diferentes perturbações feitas não causam grandes mudanças no re-projeto do sistema. Estes fatos são confirmados nas Figuras 5.4, 5.5, e 5.6.

Finalmente, é considerado o caso correspondente ao isolamento de três autovalores (30% do espectro perturbado). A Tabela 5.11, mostra os resultados obtidos depois de isolar os autovalores $\bar{\lambda}_6$, $\bar{\lambda}_7$, $\bar{\lambda}_8$ das bandas $\beta(148.7; 25.5)$, $\beta(148.7; 29.0)$, $\beta(148.7; 32.0)$, respectivamente. Obviamente, a sensibilidade é maior quando o número de autovalores perturbados é maior. Aliás, as maiores diferenças ficam na primeira massa do sistema modificado tal como é ilustrado na Figura 5.7.

Todos os exemplos confirmam que a estratégia multidimensional é eficiente, a qual permite identificar as mudanças que devem ser feitas nas propriedades físicas de um sistema massa-mola sujeito a ressonância.

Tabela 5.9:

<i>Teste</i>	1	2	3	4	5	6
<i>Semente</i>	-458	-458	-458	-458	-458	-458
δ	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0
c	26.0	26.0	26.0	120.0	120.0	120.0
r	0.9	2.0	4.0	3.4	6.0	12.0
$\bar{\lambda}_i \in \beta(c; r)$	$\bar{\lambda}_2=25.20$	$\bar{\lambda}_2=25.20$	$\bar{\lambda}_2=25.20$	$\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_6=123.30$
$\lambda_i^* \notin \beta(c; r)$	$\lambda_2^*=25.07$	$\lambda_2^*=23.99$	$\lambda_2^*=21.99$	$\lambda_6^*=123.42$	$\lambda_6^*=126.01$	$\lambda_6^*=132.00$
$F(\mu^*)$	1.44e-04	6.49e-03	21.37	7.28e-06	1.31e-02	0.56
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	7.49e-11	2.96e-10	4.32e-09	6.70e-10	2.55e-09	6.17e-10
<i>Nº Iterações do Box</i>	38	94	59	56	47	50
<i>Teste</i>	7	8	9			
<i>Semente</i>	-458	-458	-458			
δ	1000.0	1000.0	1000.0			
c	204.5	204.5	204.5			
r	1.1	4.0	12.0			
$\bar{\lambda}_i \in \beta(c; r)$	$\bar{\lambda}_9=205.50$	$\bar{\lambda}_9=205.50$	$\bar{\lambda}_9=205.50$			
$\lambda_i^* \notin \beta(c; r)$	$\lambda_9^*=205.62$	$\lambda_9^*=208.50$	$\lambda_9^*=216.50$			
$F(\mu^*)$	7.07e-07	5.18e-02	8.06e-03			
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	1.14e-09	2.04e-09	1.09e-09			
<i>Nº Iterações do Box</i>	67	62	64

Figura 5.1: Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o segundo autovalor das bandas $\beta(26.0;0.9)$, $\beta(26.0;2.0)$, e $\beta(26.0;4.0)$.

Figura 5.2: Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o sexto autovalor das bandas $\beta(120.0; 3.4)$, $\beta(120.0; 6.0)$, e $\beta(120.0; 12.0)$.

Figura 5.3: Comparação entre o sistema inicial e o final quando é isolado o nono autovalor das bandas $\beta(204.5; 1.1)$, $\beta(204.5; 4.0)$, e $\beta(204.5; 12.0)$.

Tabela 5.10:

<i>Teste</i>	1	2	3	4	5	6
<i>Semente</i>	-458	-458	-458	-458	-458	-458
δ	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0	1000.0
c	37.55	37.55	37.55	111.0	111.0	111.0
r	12.4	12.4	12.4	14.0	20.0	25.0
$\bar{\lambda}_i \in \beta(c; r)$	$\bar{\lambda}_2=25.2$ $\bar{\lambda}_3=49.90$	$\bar{\lambda}_2=25.2$ $\bar{\lambda}_3=49.90$	$\bar{\lambda}_2=25.2$ $\bar{\lambda}_3=49.90$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.3$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.3$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.3$
$\lambda_i^* \notin \beta(c; r)$	$\lambda_2^*=25.12$ $\lambda_3^*=49.96$	$\lambda_2^*=23.53$ $\lambda_3^*=51.56$	$\lambda_2^*=22.53$ $\lambda_3^*=52.56$	$\lambda_5^*=96.97$ $\lambda_6^*=125.02$	$\lambda_5^*=90.98$ $\lambda_6^*=131.01$	$\lambda_5^*=85.99$ $\lambda_6^*=136.00$
$F(\mu^*)$	1.51e-04	0.26	1.64	3.58e-02	0.41	3.11
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	3.32e-09	4.73e-11	1.71e-07	6.28e-10	6.31e-10	4.16e-11
<i>Nº Iterações do Box</i>	53	94	82	72	65	45
<i>Teste</i>	7	8	9			
<i>Semente</i>	-458	-458	-458			
δ	1000.0	1000.0	1000.0			
c	111.0	111.0	111.0			
r	14.0	20.0	25.0			
$\bar{\lambda}_i$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_5=99.9$ $\bar{\lambda}_6=123.30$			
λ_i^*	$\lambda_5^*=96.97$ $\lambda_6^*=125.02$	$\lambda_5^*=90.98$ $\lambda_6^*=131.01$	$\lambda_5^*=85.99$ $\lambda_6^*=136.00$			
$F(\mu^*)$	3.58e-02	0.41	3.11			
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	6.28e-10	6.31e-10	4.16e-11			
<i>Nº Iterações do Box</i>	72	65	45

Figura 5.4: Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o segundo e terceiro autovalor das bandas $\beta(37.55; 12.4)$, $\beta(37.55; 14.0)$, e $\beta(37.55; 15.0)$.

Figura 5.5: Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o quinto e sexto autovalor das bandas $\beta(111.0; 14.0)$, $\beta(111.0; 20.0)$, e $\beta(111.0; 25.0)$.

Figura 5.6: Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o oitavo e nono autovalor das bandas $\beta(189.8; 15.8)$, $\beta(189.8; 22.0)$, e $\beta(189.8; 26.0)$.

Figura 5.7: Comparação entre o sistema inicial e o final quando são isolados o sétimo, oitavo e nono autovalor das bandas $\beta(148.7; 25.5)$, $\beta(148.7; 29.0)$, e $\beta(148.7; 32.0)$.

Tabela 5.11:

<i>Teste</i>	1	2	3
<i>Semente</i>	-458	-458	-458
δ	8.0	8.0	8.0
c	148.7	148.7	148.7
r	25.5	29.0	32.0
$\bar{\lambda}_i \in \mathcal{J}(c; r)$	$\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_6=123.30$	$\bar{\lambda}_6=123.30$
	$\bar{\lambda}_7=151.60$	$\bar{\lambda}_7=151.60$	$\bar{\lambda}_7=151.60$
	$\bar{\lambda}_8=174.10$	$\bar{\lambda}_8=174.10$	$\bar{\lambda}_8=174.10$
$\lambda_i^* \notin \mathcal{J}(c; r)$	$\lambda_6^*=120.29$	$\lambda_6^*=117.53$	$\lambda_6^*=115.03$
	$\lambda_7^*=174.64$	$\lambda_7^*=178.04$	$\lambda_7^*=180.98$
	$\lambda_8^*=178.09$	$\lambda_8^*=180.74$	$\lambda_8^*=183.16$
$F(\mu^*)$	9.79	14.71	21.27
$\ \nabla F(\mu^*)\ $	1.06e-10	3.77e-05	8.35e-09
<i>Nº Iterações do Box</i>	63	56	64

Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia eficiente e robusta para resolver o *problema de isolamento de frequências IFSMM*, pertencente a um amplo e atual campo de pesquisa tais como *problemas de identificação, projeto estrutural e otimização*. Tal como foi discutido no presente trabalho, o problema de isolamento de frequências consiste em isolar as frequências de um sistema estrutural que estão dentro de uma ou mais bandas de ressonância, gerando um novo espectro de frequências, e a partir deste, reconstruir um novo sistema minimizando o impacto de re-projeto relativo ao sistema inicial. Aqui é proposto um método numérico inverso de autovalor para resolver o problema IFSMM. A fim de minimizar o impacto de re-projeto a escolha entre as soluções inversas é aquela que minimiza as mudanças nas propriedades estruturais. Para tal, um espectro auxiliar é necessário. Um sistema massa-mola com n graus de liberdade é usado para demonstrar a viabilidade e potencial da técnica.

Primero foi desenvolvida uma estratégia para remover as frequências de uma banda previamente especificada. Uma vez removidas as frequências indesejadas foi proposto um algoritmo de busca unidimensional do espectro auxiliar para minimizar o impacto de re-projeto do sistema. Quando o sistema-modelo é um sistema massa-mola, o espectro auxiliar é chamado espectro intercalado, denotado por $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{n-1})$. Os resultados numéricos validam a estratégia unidimensional, mas também indicam suas limitações, motivando o desenvolvimento de uma técnica mais sofisticada e eficiente do ponto de vista computacional.

Uma generalização da estratégia unidimensional consiste na busca multidimensional do espectro intercalado desconhecido. Neste caso, é definida a função objetivo

$$F(\mu) = \sum_{j=1}^n (m_j(\mu) - \bar{m}_j)^2 + \sum_{j=1}^n (k_j(\mu) - \bar{k}_j)^2,$$

Então o problema torna-se

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & F(\mu) \\ \text{sujeito a :} & \lambda_j^* < \mu_j < \lambda_{j+1}^* \end{array}$$

O método de minimização Box, desenvolvido por Friedlander, Martínez e Santos [17], o qual minimiza uma função de várias variáveis com restrições de canalização, foi usado para resolver o problema variacional descrito acima. Na implementação deste método, é necessário determinar, com exatidão numérica, o vetor gradiente e a matriz Hessiana da função objetivo $F(\mu)$. Com esse fim, foi desenvolvida uma análise completa de sensibilidade em sistemas massa-mola com relação ao espectro intercalado μ . Além disso, como a reconstrução de um sistema massa-mola é precedida pela reconstrução de uma matriz de Jacobi $J(\mu)$, um método numérico direto que calcula a derivada de $J(\mu)$, com relação a μ , é proposto. Este é formulado como uma extensão do clássico método de Lanczos para o problema inverso de autovalor de uma matriz de Jacobi. O método, chamado δ -Lanczos, calcula a derivada exata exceto por erros de arredondamento. Alguns exemplos são discutidos em ordem a demonstrar a eficiência, consistência, e exatidão do método. Por comparação com o esquema de diferenças centradas, o método δ -Lanczos é mais vantajoso em termos de exatidão e custo computacional. Uma extensão do método δ -Lanczos para derivadas de ordem mais alta é proposto para determinar a matriz Hessiana de $J(\mu)$, e portanto, da função objetivo $F(\mu)$.

Uma vez feito o estudo de sensibilidade de matrizes de Jacobi e sistemas massa-mola, são apresentados os resultados numéricos da estratégia multidimensional. A princípio, a massa total m_T do sistema foi mantida constante, mas, experimentos numéricos sugeriram tornar m_T uma variável independente. Este fato, permitiu relaxar o processo de minimização na busca do mínimo. Os resultados numéricos obtidos são excelentes e confirmam numericamente a eficiência e precisão da estratégia multidimensional. Assim, a estratégia permite identificar as mudanças que devem ser feitas nas propriedades físicas de um sistema massa-mola sujeito a ressonância.

Certamente os métodos e resultados obtidos neste trabalho podem ser melhorados e entendidos. Por exemplo, um trabalho de pesquisa futuro é obter métodos mais eficientes para determinar a sensibilidade de uma matriz de Jacobi, isto é, aproveitar métodos de reconstrução para matrizes deste tipo com um custo computacional menor. Além disso, o comportamento particular das derivadas dos parâmetros físicos em sistemas massa-mola, com relação ao espectro intercalado, sugere que através de um estudo de sensibilidade podem ser determinadas as mudanças que devem ser feitas no re-projeto do sistema.

O procedimento para isolar as frequências de uma banda proposto no Capítulo 2, é uma possibilidade que pode ser melhorada. Por exemplo, no Capítulo 5, foi incluído um fator adicional ε_I que permite controlar grandes perturbações que podem acontecer no processo de isolamento. Isto sugere que pode ser desenvolvido um procedimento mais eficiente na escolha de ε_I , ou talvez

desenvolver um outro procedimento de isolamento que permita obter resultados ainda melhores.

O modelo usado neste trabalho corresponde ao modelo discreto mais simples possível para uma viga vibrando em movimento logitudinal. Barcilon em [1], [3], e Gladwell em [22], [25], [30] desenvolveram alguns métodos de reconstrução de um modelo discreto para a vibração transversal de uma viga. Aqui dois espectros auxiliares são necessários. Estes fatos podem ser aproveitados para aplicar, de uma maneira adequada, a estratégia multidimensional em sistemas de ordem mais alta. Além disso, uma aplicação da estratégia multidimensional pode ser aplicada em sistemas contínuos previamente discretizados via diferenças finitas. Atualmente Gladwell, em [23], [27], [28], está desenvolvendo métodos de reconstrução de sistemas massa-mola via elementos finitos, mas a falta de unicidade dos métodos obtidos ainda não permitem visualizar um caminho claro de pesquisa usando esta via de discretização.

Existem outros problemas de aplicação, tais como a detecção de falhas, onde pode ser aplicado o método inverso de autovalor proposto neste trabalho. Esta e todas as idéias anteriores fazem parte das linhas de pesquisa no futuro.

Apêndice A

Algoritmo tipo região de confiança para minimização com restrições de canalização Box

Considerar o problema

$$\text{Minimizar} \quad F(x) \tag{A.1}$$

$$\text{sujeito a :} \quad l \leq x \leq u, \tag{A.2}$$

onde $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é diferenciável em um conjunto factível. A.R. Conn et al [9] mostraram que praticamente todos os problemas de programação não-linear de grande porte pode ser resolvido eficientemente usando técnicas de Lagrangiano aumentado, sempre que seja usado um bom método para resolver A.2.

O algoritmo Box é um algoritmo do tipo *região de confiança* para resolver A.2. Em cada iteração do algoritmo, considera-se o problema de minimizar uma função *quadrática* (não necessariamente convexa) em uma caixa que consiste da interseção da caixa original $l < x < u$ com a região de confiança.

Usualmente em métodos modernos do tipo região de confiança, não é necessário resolver exatamente o subproblema para obter convergência global do algoritmo principal (Ver [9], [57], [54]). Em vez, uma condição suave que relaciona o valor objetivo da quadrática à solução de um problema auxiliar muito simples é suficiente para provar que todo ponto de acumulação é estacionário.

O gradiente de F será denotado por $G(x)$. O símbolo $\| \cdot \|$ denota a norma-2 de vetores

e matrizes, e $\|\cdot\|_{\#}$ denotará uma norma arbitrária em $\mathbb{R}^n$ e a correspondente norma matricial subordinada. Sejam α , Δ_{min} , e θ tal que $\alpha \in (0, 1)$, $\Delta_{min} > 0$, e $\theta \in (0, 1]$. No começo o algoritmo Box tem um ponto factível x_0 , uma matriz simétrica B_0 de $n \times n$ (a aproximação da Hessiana), uma matriz não singular D_0 (matriz escala) de $n \times n$, e um raio $\Delta^0 \geq \Delta_{min}$. O papel das matrizes escalas é permitir a possibilidade do ajuste das variáveis que diferem muito em magnitude. Dado um x_k factível, B_k simétrica, D_k não singular, e $\Delta^k \geq \Delta_{min}$, os passos para obter x_{k+1} e Δ_k são dados pelo seguinte

ALGORITMO Box:

Passo 1 (Definir o raio inicial da região de confiança e calcular uma estimativa superior of $\lambda_n(B_k)$). Definir

$$\Delta \leftarrow \Delta^k.$$

Calcular $M_k > 0$ tal que $\lambda_n(B_k) \leq M_k$, onde $\lambda_1(B_k) < \lambda_2(B_k) < \dots < \lambda_n(B_k)$ são os autovalores de B_k .

Passo 2 (Resolver o subproblema “fácil”). Calcular a solução global $z_k^Q(\Delta)$ de

$$\text{Minimizar} \quad Q_k(z) \equiv \frac{1}{2} M_k \|z\|^2 + G_k^T z, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \text{sujeito a :} \quad & l \leq x_k + z \leq u, \\ & \|D_k z\|_{\#} \leq \Delta, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde $G_k = G(x_k)$. Se $Q_k(z_k^Q(\Delta)) = 0$, parar.

Passo 3 (Calcular o passo provável). Calcular $\bar{z}_k(\Delta)$ tal que

$$\begin{aligned} \psi(\bar{z}_k(\Delta)) &\leq \theta Q_k(z_k^Q(\Delta)), \\ l &\leq x_k + \bar{z}_k(\Delta) \leq u, \\ \|D_k \bar{z}_k(\Delta)\|_{\#} &\leq \Delta, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde $\psi(z) = \frac{1}{2} z^T B_k z + G_k^T z$ para todo $z \in \mathbb{R}^n$. Observar que $z_k(\Delta)$ satisfazendo A.3- A.4 existe, já que $z_k^Q(\Delta)$ é uma escolha admissível.

Passo 4 (Teste de parada). Se

$$F(x_k + \bar{z}_k(\Delta)) \leq F(x_k) + \alpha \psi_k(\bar{z}_k(\Delta)), \quad (\text{A.6})$$

então definir $z_k = \bar{z}_k(\Delta)$, $x_{k+1} = x_k + z_k$, $\Delta_k = \Delta$ e parar. Senão, substituir Δ por Δ_{novo} , onde

$$\Delta_{novo} \in [\sigma_1 \| D_k \bar{z}_k(\Delta) \|_{\#}, \sigma_2 \Delta], \quad (\text{A.7})$$

onde σ_1, σ_2 são tais que $0 < \sigma_1 \leq \sigma_2 < 1$, e ir ao Passo 2.

Lema A. 1 : *O algoritmo Box para no passo 2 ($Q_k(z_k^Q(\Delta)) = 0$) se e somente se x_k é um ponto Kuhn-Tucker (estacionário) do problema A.1, A.2.*

Teorema A. 1 *O algoritmo Box é bem definido. Isto é, se o processo não para no Passo 2 (com $Q_k(z_k^Q(\Delta)) = 0$), então x_{k+1} podem calcular-se repetindo os Passos 2-4 em um número finito de vezes.*

Observação: Normalmente sugere-se que a norma infinito $\| \cdot \|_{\infty}$ seja a escolha mais natural para $\| \cdot \|_{\#}$.

No seguinte teorema prova-se a convergência global do algoritmo Box, onde introduze-se a notação $\lim_{k \in K}$ para denotar o limite quando $k \rightarrow \infty$ para k pertencente a um conjunto infinito de índices K subconjunto dos números naturais.

Teorema A. 2 *Supor que $\{x_k\}$ é uma sequência gerada pelo algoritmo Box, K_1 é um conjunto infinito de índices tal que $\lim_{k \in K_1} x_k = x_*$, e M_k , $\| D_k \|_{\#}$, $\| D_k^{-1} \|_{\#}$, e $|\lambda_1(B_k)|$ são limitados por $k \in K_1$. Então x_* é um ponto estacionário (Kuhn-Tucker) de A.1, A.2.*

Referências Bibliográficas

- [1] V. Barcion, On the multiplicity of solutions of the inverse problem for a vibrating beam, *SIAM J. Appl. Math.* **37** (1978), 605–613.
- [2] ———, On multiplicity of solutions of the inverse problems for a vibrating beam, *SIAM J. Appl. Math.* **37** (1979), 119–127.
- [3] ———, Inverse problems for the vibrating beam in the free-clamped configuration, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **304** (1982), 211–252.
- [4] ———, A two-dimensional inverse eigenvalue problem, *Inverse Problems* **6** (1990), 11–20.
- [5] F.W. Biegler-Köning, Construction of band matrices from spectral data, *Lin. Alg. Appl.* **40** (1981), 79–84.
- [6] D. Boley e G.H. Golub, A survey of matrix inverse eigenvalue problem, *Inverse Problems* **3** (1987), 595–622.
- [7] D.L. Boley e G.H. Golub, Inverse eigenvalue problems for band matrices, *Lectures Notes on Mathematics, Numerical Analysis (Berlin: Springer)* (1977).
- [8] M.T. Chu, Inverse eigenvalue problems, *SIAM Rev.* **40** (1998), no. 1, 1–39.
- [9] A.R. Conn, N.I.M. Gould e Ph.L. Toint, Global convergence of a class of trust-region algorithms for optimization with simple bounds, *SIAM Journal on Numerical Analysis* **25** (1988), 433–460.
- [10] H. Dai, About an inverse eigenvalue problem arising in vibration analysis, *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.* **29** (1995), 421–424.
- [11] B.N. Datta, S. Elhay e Y.M. Ram, Orthogonality and partial pole assignment for the symmetric definite quadratic pencil, *Lin. Alg. Appl.* **257** (1997), 29–48.
- [12] C. Davini, F. Gatti e A. Morassi, Damage analysis of steel beam, *Meccanica* **28** (1993), 27–37.

- [13] C. Davini, A. Morassi e N. Rovere, Modal analysis bar tests and comments on the sensitivity of an procedure, *Sound Vib.* **179** (1995), 513–527.
- [14] C. de Boor e G.H. Golub, The numerically stable reconstruction of a jacobi matrix from spectral data, *Lin. Alg. Appl.* **21** (1978), 245–260.
- [15] J.C. Egaña, L.C. Santos e N. Kuhl, Sensitivity analysis of jacobi matrices, *Submitted* (1999).
- [16] ———, A strategy for frequencies isolation in discrete dynamical systems, *Proceedings VI Pan American Congress of Applied Mechanics, Rio de Janeiro* **6** (1999), 243–246.
- [17] A. Friedlander, J.M. Martínez e S.A. Santos, A new trust region algorithm for bound constrained minimization, *Appl. Math. Optim* **30** (1994), 235–266.
- [18] F.P. Gantmakher e M.G. Krein, Oscillation matrices and kernels and small vibrations of mechanical systems, *State Publishing House for Technical-Theoretical Literature, Moscow-Leningrad, USSR (Translation: US Atomic Energy Commission, Washington DC, 1961)* (1950).
- [19] G.M. Gladwell, Inverse problems in vibrations, *Appl. Mech. Rev.* **39** (1986), no. 7.
- [20] ———, Inverse problems in vibrations-2, *Appl. Mech. Rev.* **49** (1996), no. 10.
- [21] G.M. Gladwell e B.R. Zhu, Inverse problems for multidimensional vibrating systems, *Proc. R. Soc. Lond A* **439** (1992), 511–530.
- [22] G.M.L. Gladwell, The approximation of uniform beams in transverse vibration by sets of masses elastically connected, *Proc. 4th U.S. National Congress of Applied Mechanics, New York: Am. Soc. Mech. Eng.* (1962), 169–176.
- [23] ———, The inverse problem for the beam, *Proc. Roy. Soc. Ser. A* **393** (1984), 277–295.
- [24] ———, The inverse mode problem for lumped-mass systems, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **39** (1986), 297–307.
- [25] ———, Inverse problem for the euler-bernoulli beam, *Proc. R. Soc. London A* **407** (1986), 199–218.
- [26] ———, *Inverse problems in vibration*, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1989.
- [27] ———, Inverse vibration problems for finite elements models, *Inverse Problem* **3** (1997), 311–322.
- [28] ———, Inverse finite element vibration problems, *Preprint* (1999).

- [29] G.M.L. Gladwell e J.A. Gbadeyan, On the inverse problem of the vibrating string or rod, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **38** (1985), 169–174.
- [30] G.M.L. Gladwell, N.B. Willms, B. He e D. Wang, How can we recognize an acceptable mode shape for a vibrating beam?, *Q. J. Mech. Appl. Math.* **42** (1989), 303–316.
- [31] G.H. Golub e D. Boley, Inverse eigenvalue problems for band matrices, *Numerical Analysis* (1977), no. 66, 23–31.
- [32] G.H. Golub e C.F. Van Loan, *Matrix computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1989.
- [33] W.B. Gragg e J.H. Welsch, The numerically stable reconstruction of jacobi matrices from spectral data, *Numer. Math.* **44** (1984), 317–335.
- [34] L.J. Gray e D.G. Wilson, Construction of a jacobi matrix from spectral data, *Lin. Alg. Appl.* **14**, 131–134.
- [35] O. Hald, Inverse eigenvalue problems for jacobi matrices, *Lin. Alg. Appl.* **14** (1976), 63–85.
- [36] G. Hearn e R.B. Testa, Modal analysis for damage detection in structures, *J. Struct. Eng.* **117** (1991), 3042–3063.
- [37] H. Hochstadt, On construction of a jacobi matrix from spectral data, *Lin. Alg. Appl.* **8** (1974), 435–446.
- [38] K.T. Joseph, Inverse eigenvalue problem in structural design, *AIAA Ed. Ser.* **30**, 2890–2896.
- [39] R. Knobel e J.R. McLaughlin, A reconstruction method for a two-dimensional inverse eigenvalue problem, *Z. Angew. Math. Phys.* **18** (1994), 794–826.
- [40] C. Lanczos, An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators, *J res NBS Section B* **45** (1950).
- [41] J.R. McLaughlin e H. Hald, A formula for finding a potencial from nodal lines, *Bull. Amer. Math. Soc., New Series* **32** (1995), 241–247.
- [42] J.R. McLaughlin, P.L. Polyakov e P.E. Sacks, Reconstruction of a spherically symmetric speed of sound, *SIAM J. Appl. Math.* **54** (1994), 1203–1223.
- [43] A. Morassi, Crack-induced changes in eigenparameter of beam structures, *J. Eng. Mech.* **119** (1993), 1798–1803.
- [44] P. Nylén e F. Uhlig, Inverse eigenvalue problems: existence of special spring-mass systems, *Inverse Problems* **13** (1997), 1071–1081.

- [45] B.N. Parlett, *The symmetric eigenvalue problem*, Englewood Cliffs, N J: Prentice Hall, 1980.
- [46] W.H. Press, S.A. Teukolsky W.T. Vetterling e B.P. Flannery, *Numerical recipes in fortran* 77, vol. 1, Cambridge University Press, 1992.
- [47] Y.M. Ram, Inverse eigenvalue problems for a modified vibrating system, *SIAM J Appl* **53** (1993), 1762–1775.
- [48] Y.M. Ram e J. Caldwell, Physical parameters reconstruction of a free-free mass-spring system from its spectra, *SIAM J. Appl. Math.* **52** (1992), 140–152.
- [49] Y.M. Ram e S. Elhay, The construction of band symmetric models for vibratory systems from modal analysis data, *J. Sound Vibration* **181** (1995), 583–594.
- [50] ———, An inverse eigenvalue problem for the symmetric tridiagonal quadratic pencil with application to damped oscillatory systems, *SIAM J. Appl. Math.* **56** (1996), 232–244.
- [51] Y.M. Ram e G.M.L. Gladwell, Constructing a finite element model of a vibratory rod from eigendata, *J. Sound Vibration* **169** (1994), 229–237.
- [52] M.H.H. Shen e J.E. Taylor, Identification problem for vibrating cracked beams, *J. Sound Vib.* **150** (1991), 457–484.
- [53] G.D. Shepard e J. Milani, Frequency based localization of structural discrepancies, *Mech. Syst. Signal Processing* **4**, 173–184.
- [54] J. Stoer e R. Bulirsh, *Introduction to numerical analysis*, second ed., Springer Verlag, 1980.
- [55] M.A.M. Torkamani e A.K.Ahmadi, Stiffness identification of frames using simulated ground excitation, *J. Eng. Mech.* **114** (1988), 753–776.
- [56] F.E. Udwadia, J.A. Garba e A. Ghodsi, Parameter identification problems in structural and geotechnical engineering, *J. Eng. Mech.* **110** (1984), 1409–1432.
- [57] G.N. Vanderplaats, *Numerical optimization techniques for engineering design with applications*, McGraw-Hill, Inc., 1984.
- [58] Q. Wu, *Determination of the size of an object and its location in cavity by eigenfrequency shifts*, Ph.D. thesis, Univ of Sydney, 1990.
- [59] ———, Reconstruction of integrated crack function of beams from eigenvalue shifts, *J. Sound Vib.* **173** (1994), 279–282.
- [60] Q. Wu e F. Fricke, Estimation of blockage dimensions in a using measured eigenfrequency shifts, *J. Sound Vib.* **113** (1989).

- [61] ———, Determination of blockage locations and cross-sectional area in a duct by eigenfrequency shifts, *J. Acoust. Soc. Am.* **87** (1990), 67–75.
- [62] ———, Determination of the size of an object and its location in a rectangular cavity by eigenfrequency shifts, *J. Sound Vib.* **144** (1991), 131–147.
- [63] E.M.E. Zayed, An inverse eigenvalue problem for an arbitrary multiply connected bounded region in, *Internat. J. Math. Math. Sci.* **14** (1991), 571–579.
- [64] ———, An inverse eigenvalue problem for an arbitrary multiply connected bounded region in with independence boundary conditions, *SIAM J. Appl. Math.* **52** (1992), 725–729.
- [65] ———, An inverse eigenvalue problem for an arbitrary multiply connected bounded region: An extension to higher dimensions, *Internat. J. Math. Math. Sci.* **16** (1993), 485–492.