

Comparación de dos formulaciones conservativas en energía y momento para la integración de sistemas multicuerpo no lineales complejos

Chelo Ferreira

Departamento de Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias
Universidad de Zaragoza
Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza, España
Tel.: 34-976 762 024, Fax: 34-976-761 125
e-mail: cferrei@posta.unizar.es

Manuel Doblaré

Departamento de Ingeniería Mecánica
Centro Politécnico Superior
Universidad de Zaragoza
María de Luna 3, 50015 Zaragoza, España
Tel.: 34-976 761 912, Fax: 34-976-762 578
mdoblare@posta.unizar.es

Resumen

Se presentan dos formulaciones que conservan de forma exacta la energía y el momento en sistemas hamiltonianos acoplados sometidos a restricciones no lineales complejas.

El primer método, que denominamos “energía-momento”, considera una extensión del algoritmo energía momento planteado inicialmente por Simo *et al.* La integración se realiza formulando el funcional ampliado resultante de la incorporación de las restricciones mediante multiplicadores de Lagrange al problema inicial, y estableciendo el equilibrio en un punto arbitrario cuya determinación se realiza mediante un proceso de Newton-Raphson.

En el segundo método, que denominamos de “proyección y retorno”, se incorporan las restricciones al espacio de soluciones. En este caso, la predicción de la solución obtenida en cada iteración no pertenece, en general y salvo linealidad, al espacio de soluciones, por lo que es necesario formular un retorno a la variedad que definen las restricciones. Finalmente, se muestran ejemplos del excelente funcionamiento del primer método.

Palabras clave:

Algoritmos conservativos, dinámica no lineal, sistemas hamiltonianos, grandes desplazamientos.

COMPARATIVE STUDY OF TWO CONSERVING FORMULATIONS FOR THE NUMERICAL SIMULATION OF COMPLEX NONLINEAR MULTIBODY SYSTEMS

Keywords:

Conserving algorithms, nonlinear dynamics, multibody systems, large motions.

Summary

Two formulations which exactly preserve total momentum and total energy multibody systems with complex constraints, following a scheme of finite element methods, are presented.

The first method is referred to as “energy-momentum” and have previously been successfully employed for Simo *et al.* for a single continuum body and a single rigid body and was extended to coupled systems with a quadratic constraint by Taylor. This method follows a Lagrange multiplier technique and the constraints formulation is set up at a point determined by a Newton Raphson iterative process.

The second method, named “projection return” method, incorporates the constraints to the solutions space. In this case, usually, the prediction doesn't belong to the solutions space and it is necessary to formulate a return algorithm to the variety of the constraints.

Finally, the good performance of the first method is shown in some examples.

INTRODUCCIÓN

La integración de las ecuaciones de la dinámica de sistemas multicuerpo acoplados (que incluyen elementos flexibles) ha sido tradicionalmente un problema debido a la complejidad de los sistemas de ecuaciones resultantes - sistemas de ecuaciones algebraico-diferenciales de orden 2 y 3 y con términos diferenciales que muchas veces incorporan un comportamiento altamente stiff -. Para la resolución de este problema, además de los tradicionales métodos Runge-Kutta explícitos e implícitos y las conocidas fórmulas BDF (una revisión de estos métodos puede encontrarse por ejemplo en San José,⁴ se ha venido utilizando últimamente algoritmos disipativos tipo Hilber-Hughes-Taylor³ con el objetivo de filtrar los modos altos que aparecen como consecuencia de los términos stiff y restricciones algebraicas.¹

Sin embargo, la utilización de estos últimos filtra frecuencias que, en ocasiones (problemas de impacto por ejemplo), pueden ser decisivas en la dinámica del problema. Una alternativa que aquí presentamos es la utilización de una extensión del algoritmo energía-momento de Simo *et al.*⁹ a sistemas multicuerpo que, para sistemas intrínsecamente hamiltonianos (cuando el sistema diferencial en coordenadas independientes, es decir sin restricciones, lo es) permite conservar de forma exacta, por construcción, la energía total del sistema (incluyendo, obviamente, el trabajo de las fuerzas exteriores) mientras que, para cargas equilibradas, los momentos del sistema (cantidad de movimiento y momento cinético) también son conservados. Ello permite integrar de forma exacta la dinámica del mecanismo, al menos en lo que a conservación de sus magnitudes esenciales se refiere, y con ello una garantía de mayor precisión, además de que la conservación de una magnitud (la energía) que, en muchos sistemas, es una norma válida para garantizar la estabilidad incondicional, permite asegurar en estos sistemas la estabilidad incondicional para el algoritmo.⁹

El algoritmo energía-momento fue inicialmente planteado por Simo *et al.*⁹ para la integración de problemas de valor inicial definidos sobre \mathbb{R}^n , de forma que se conservase por construcción el momento total y la energía total en sistemas hamiltonianos. Posteriormente fue extendido a espacios de configuración que incluyesen a $SO(3)$ (sólidos rígidos y barras,^{5,6} y a espacios de configuración que incluyesen a S^2 (láminas⁸). Finalmente, Taylor *et al.*¹² proponen la extensión del algoritmo energía-momento al caso de problemas multicuerpo con restricciones cuadráticas que, como se demuestra en el presente trabajo, constituye un caso particularmente simple de la generalización necesaria a cualquier tipo de restricción. Casualmente, la situación de restricciones cuadráticas se resuelve siguiendo pasos idénticos, sin modificación conceptual, a los planteados en el algoritmo energía-momento sin restricciones.

Partiendo de esta idea de Taylor, se presenta en este trabajo la extensión del algoritmo energía-momento para la integración de sistemas algebraico-diferenciales tales que, en coordenadas independientes, responden a un esquema hamiltoniano. Ello se realiza para restricciones arbitrarias y para sistemas que incorporen tanto elementos rígidos como elementos barra. En ambos casos se sigue el modelo de Simo *et al.*^{11,10} de sólidos rígidos y barras geoméricamente exactos. Para ello se utiliza una parametrización exacta de $SO(3)$ mediante la transformación exponencial o la de Cayley según sea necesario. Tanto los elementos rígidos como las barras y las restricciones se formulan como elementos finitos particulares dentro de un programa de elementos finitos.

En cuanto al algoritmo, siguiendo los esquemas ya indicados para el algoritmo energía-momento, al funcional sin restricciones se le añade el término de las restricciones, aplicando la bien conocida técnica de los multiplicadores de Lagrange, pero se establece

el cumplimiento del sistema de ecuaciones (variaciones del funcional) en puntos distintos del intervalo de integración para cada uno de sus términos. Así, para los términos adscritos a sólidos rígidos y barras se sigue de forma exacta el esquema del algoritmo original, mientras que los términos de restricciones se colocan en puntos distintos del intervalo según el tipo de restricción de forma que se consigan las condiciones de conservación buscadas. Se demuestra la existencia de este punto para restricciones diferenciables en el interior del intervalo de integración y se plantea su determinación mediante un proceso iterativo Newton-Raphson.

El método alternativo que aquí se contempla corresponde a incorporar las restricciones al espacio de soluciones y no al funcional del problema. Es el algoritmo que hemos denominado de proyección y retorno. Se establece formulando el problema en coordenadas independientes obtenidas mediante un proceso de eliminación con pivotamiento total en el sistema de restricciones linealizado. Además, la predicción de la solución obtenida en cada iteración no pertenecerá, en general, al espacio de soluciones, salvo que el sistema de restricciones sea lineal. Por ello, es necesario formular una corrección (retorno) a la variedad diferenciable que definen las restricciones. Todo ello da lugar a un proceso lento, pues al sistema no lineal a resolver hay que añadirle la resolución del sistema de las restricciones en cada iteración y el retorno a la variedad diferenciable. Sin embargo, conceptualmente el algoritmo parece atractivo pues no implica la inclusión de multiplicadores de Lagrange ni el incremento de la dimensión del problema y la formulación resultante es limpia desde el punto de vista de geometría diferencial. El inconveniente radica en la dificultad de conseguir una formulación de este tipo, consistente geoméricamente y que conserve los invariantes del hamiltoniano, tal como se detalla en los epígrafes siguientes.

A continuación se formula el problema a resolver: sistemas rígidos y flexibles unidos mediante restricciones y en situación de grandes desplazamientos para, seguidamente, plantear los dos métodos de integración anteriores, incluyendo la discretización espacial de elementos finitos utilizada. En este sentido, se obviará la formulación correspondiente a los elementos rígido y flexible, considerando en su totalidad la expuesta en,^{11,6,2} planteándose tan sólo el caso de la elastodinámica no lineal. Se finaliza con dos ejemplos de aplicación de ambos métodos en los que se incluyen restricciones no cuadráticas (cúbicas y trigonométricas) para dar una idea del funcionamiento de los algoritmos.

FORMULACIÓN DE UN PROBLEMA VARIACIONAL CON RESTRICCIONES

Un problema variacional en mecánica del sólido deformable con restricciones puede plantearse de la siguiente manera

$$(P) \quad \begin{cases} \text{minimizar } A(\mathbf{u}, t) & \mathbf{u} \in \mathcal{S} \\ \text{sujeto a } \Phi(\mathbf{u}, t) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{u} \in H^1(\Omega); \mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \text{ en } \partial\Omega^{\mathbf{u}}\}$$

donde \mathbf{u} representan los desplazamientos generalizados A es el funcional acción, $\Phi(\mathbf{u}, t)$ representa el conjunto de restricciones y \mathcal{S} el espacio de búsqueda de soluciones.

Equivalentemente, si consideramos la variación del funcional en la dirección de una variación admisible arbitraria, se tiene

$$(PV) \quad \begin{cases} DA(\mathbf{u}, t)\delta\mathbf{u} = 0 & \delta\mathbf{u} \in \mathbf{V} \\ \text{sujeto a } \Phi(\mathbf{u}, t) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

$$\mathbf{V} = \{\delta\mathbf{u} \in H^1(\Omega); \delta\mathbf{u}|_{\partial\Omega\mathbf{u}} = 0 \quad D\Phi(\mathbf{u}, t) \cdot \delta\mathbf{u} = 0\}$$

que constituye el planteamiento débil del problema inicial de ecuaciones diferenciales asociado al principio variacional, donde $\delta\mathbf{u}$ representa una variación admisible cualquiera, es decir un elemento del espacio tangente a \mathbf{S} en el punto solución del problema \mathbf{V} .

Siguiendo ahora un esquema de discretización tipo elementos finitos, con una aproximación de los desplazamientos generalizados, se llega al problema discreto siguiente

$$(PD) \quad \begin{cases} DA(\mathbf{u}^N, t)\delta\mathbf{u}^N = 0 & \delta\mathbf{u}^N \in \mathbf{V}^N \\ \text{sujeto a } \Phi(\mathbf{u}^N, t) = 0 & \mathbf{u}^N \in \mathbf{S}^N \end{cases} \quad (3)$$

$$\mathbf{V}^N = \{\delta\mathbf{u}^N \in P(T^N(\Omega)); \delta\mathbf{u}^N = 0 \text{ en } \partial\Omega^{\mathbf{u}} \quad D\Phi(\mathbf{u}^N, t) \cdot \delta\mathbf{u}^N = 0\}$$

$$\mathbf{S}^N = \{\mathbf{u}^N \in P(T^N(\Omega)); \mathbf{u}^N = \overline{\mathbf{u}^N} \text{ en } \partial\Omega^{\mathbf{u}}\}$$

con $P(T^N(\Omega))$ el espacio de aproximación de elementos finitos sobre la triangularización de Ω , $T^N(\Omega)$.

El objetivo de los métodos aquí considerados es la integración temporal del problema (3) para sistemas multicuerpo no disipativos. En ellos la energía total del sistema está compuesta por los términos de inercia asociados a los elementos rígidos y flexibles (elementos barra) más la energía de deformación de los elementos flexibles menos el trabajo de las fuerzas exteriores que consideraremos conservativo y por tanto derivable de un potencial de fuerzas adecuado.

Método de proyección y retorno

El método aquí presentado consiste en realizar una proyección del punto solución del problema sobre el subespacio de variables independientes elegidas. Esto implica modificar el espacio de búsqueda, de forma que incorpore de entrada las restricciones del problema; es decir (P) se plantea de forma equivalente como

$$(P)^* \quad \text{minimizar } A(\mathbf{u}, t) \quad (4)$$

$$\mathbf{u} \in \mathbf{S}^* = \{\mathbf{u} \in H^1(\Omega); \mathbf{u} = \overline{\mathbf{u}} \text{ en } \partial\Omega^{\mathbf{u}} \text{ y } \Phi(\mathbf{u}, t) = 0\}$$

donde ahora el espacio de búsqueda es una variedad diferenciable compleja y determinada por las restricciones. En el caso discreto se tiene

$$(PD)^* \quad \text{minimizar } A(\mathbf{u}^N, t)$$

$$\mathbf{u}^N \in \mathbf{S}^{*N} = \{\mathbf{u}^N \in P(T^N(\Omega)); \mathbf{u}^N|_{\partial\Omega\mathbf{u}} = \overline{\mathbf{u}^N} \text{ y } \Phi(\mathbf{u}^N, t) = 0\}$$

que puede reescribirse mediante la aplicación del cálculo de variaciones como

$$(\text{PVD})^* \quad DA(\mathbf{u}^N, t)\delta\mathbf{u}^N = 0 \quad \delta\mathbf{u}^N \in \mathbf{V}^{*N} \quad (5)$$

donde \mathbf{V}^* es de nuevo el espacio de variaciones admisibles en la solución, que, en este caso, es un espacio vectorial de dimensión $n - m$ con n el número de grados de libertad del problema discretizado y m el rango de la matriz diferencial de A , DA , como es conocido. Con ello y, una vez seleccionada una base de \mathbf{V}^* , es decir, una familia de variables independientes adecuadas, se puede escribir

$$\mathbf{V}^* = \{\delta\mathbf{u} \in H^1(\Omega); \delta\mathbf{u} = 0 \text{ en } \partial\Omega^{\mathbf{u}} \text{ y } \delta\mathbf{u}_d = G(\delta\mathbf{u}_i)\} \quad (6)$$

y, por tanto, la ecuación (5) se reescribiría como

$$\left[DA + \frac{\partial A}{\partial \mathbf{u}_d} \cdot \frac{\partial G}{\partial (\delta \mathbf{u}_i)} \right] \cdot \delta \mathbf{u}_i = 0 \quad (7)$$

que constituye un sistema de ecuaciones diferenciales en general no lineal con incógnitas las variables independientes del problema en el instante de cálculo. Estas variables se eligen en nuestro caso mediante un proceso de eliminación de Gauss con pivotamiento total de la matriz diferencial de A y, obviamente, pueden ir cambiando a lo largo del proceso de integración, detectándose de forma automática entonces, dependencias nuevas entre variables, puntos singulares del sistema, etc.

El sistema no lineal (7) se resuelve mediante un procedimiento de Newton-Raphson con las siguientes actualizaciones

$$\mathbf{u}_i^{k+1} = \mathbf{u}_i^k + \Delta \mathbf{u}_i^{k,k+1} \quad \mathbf{u}_d^{k+1} = \mathbf{u}_d^k + \Delta \mathbf{u}_d^{k,k+1}$$

con lo que las nuevas incógnitas de nuestro problema son $\Delta \mathbf{u}_i$.

El problema es, por tanto, obtener la variación de $\Delta \mathbf{u}_d^{k,k+1}$ en función de $\Delta \mathbf{u}_i^{k,k+1}$, que constituyen los grados de libertad independientes de nuestro problema. Para ello es necesario resolver simultáneamente al proceso de Newton-Raphson las restricciones $\Phi(\Delta \mathbf{u}, t) = 0$.

Naturalmente, en el caso de que estas restricciones sean lineales es relativamente sencillo, puesto que la resolución de la ecuación (5) permite obtener automáticamente las relaciones entre variables requeridas que, en ese caso, es además invariante a lo largo del proceso. En caso contrario, sería necesario previamente resolver en cada iteración el sistema de restricciones, lo que suele ser excesivamente costoso.

Una alternativa puede ser plantear una predicción de los valores de $\Delta \mathbf{u}_d^{k,k+1}$ en función de $\Delta \mathbf{u}_i^{k,k+1}$ que no cumplan las restricciones pero que sean más simple de obtener. Por ejemplo, planteando el problema correspondiente a la linealización de las restricciones

$$\Phi_{\mathbf{u}} \cdot \dot{\mathbf{u}} = \text{residuo}$$

es decir, se propone un método de búsqueda de direcciones. Sin embargo, con esto aparece un inconveniente, y es que, en general, la solución obtenida no pertenecerá a la variedad diferenciable del espacio de búsqueda de soluciones. Este problema puede resolverse mediante el planteamiento de un algoritmo de corrección que consiga el retorno a la variedad diferenciable.

Por tanto, el proceso consistiría en los pasos siguientes para cada iteración:

1. Resolución del sistema de restricciones, detección de las variables independientes y establecimiento de las dependientes en función de ellas
2. Resolución del sistema diferencial reducido planteado sólo en función de las independientes

3. Retorno a la variedad diferenciable
4. Vuelta a 1

En la literatura, hay varios algoritmos de retorno propuestos. En este trabajo se ha utilizado el planteado por Simo *et al.*⁷ para problemas de elastoplasticidad, en concreto para el retorno a la superficie de plastificación, que consiste en el retorno a la variedad siguiendo la dirección normal a la misma en cada punto de predicción y que se esquematiza en la Figura 1.

Figura 1. Algoritmo de retorno normal

En el Apéndice A se incluye un ejemplo de aplicación del método que esquematiza una iteración del mismo en un problema con solución analítica simple y que da una idea de las ventajas y desventajas del mismo. Estas se resumen a continuación:

Ventajas del método

- Se alcanza un mínimo en la solución.
- No se aumenta la dimensión del problema.
- Se conserva la estructura y la simetría de la matriz.

Inconvenientes del método

- No se obtiene conservación de la energía.
- Se reduce el orden de convergencia.
- Hay dificultad en la selección de una familia de variables independientes.

Las anteriores ventajas parece que pueden ser de gran importancia e incluso en muchos casos hacer este algoritmo competitivo con otros a pesar de sus desventajas. El caso obvio es el de restricciones lineales en el que, al permanecer constante la variedad diferenciable e identificarse con un espacio vectorial (el correspondiente al espacio tangente a la variedad en cualquier punto que es coincidente con él), se simplifica ostensiblemente el problema, siendo innecesario el proceso iterativo anterior obteniéndose además un algoritmo geoméricamente consistente y en el que puede conservarse la energía y obtener convergencia cuadrática en el algoritmo de Newton-Raphson.

Por el contrario, cuando el espacio de configuración es una variedad diferenciable no lineal, es decir, en el caso de restricciones no lineales, el algoritmo de retorno es difícil

de linealizar de forma completa, con lo que la convergencia cuadrática exacta de Newton-Raphson puro no se ha podido conseguir.

Aún más importante es el problema de conservación de la energía. Efectivamente, si se está pretendiendo conseguir algoritmos conservativos, esta debería ser una o la condición más importante exigible al algoritmo. La conservación de energía en este caso pasaría, siguiendo el esquema energía-momento, por encontrar un algoritmo capaz de plantear la evolución de la velocidad en un determinado instante en función de la velocidad y aceleración en el instante anterior y el incremento de desplazamientos en dicho instante y todo ello de forma que sea geoméricamente consistente. Ello exige trabajar en un único espacio tangente y por tanto para trabajar con valores en distintos valores del tiempo la existencia de una conexión (que debería ser explícita para no complicar aún más el problema) en la variedad diferenciable y además que conservase el producto escalar entre vectores ya que, en función de este se define la energía cinética, es decir, sería necesario disponer de una conexión de Levy-Civita explícita sobre la variedad diferenciable, lo que no es en absoluto simple en variedades generales, siendo esta la causa principal de haber desechado este algoritmo.

Algoritmo energía-momento

El segundo algoritmo aquí presentado corresponde a la versión generalizada del algoritmo energía-momento al caso de sistemas multicuerpo (problemas con restricciones). Para ello, se utiliza la conocida técnica de los multiplicadores de Lagrange, formulándose un funcional aumentado, resultante de incorporar las restricciones al problema de minimización inicial.

En definitiva, el problema se plantea en la forma siguiente

$$(L) \quad \text{minimizar} \quad A(\mathbf{u}, t) + \boldsymbol{\lambda} \cdot \Phi(\mathbf{u}, t) \quad \mathbf{u} \in \mathbf{S}, \boldsymbol{\lambda} \in L(F)$$

$$L(F) = \{\boldsymbol{\lambda} : F \rightarrow \Re; \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_m) \text{ lineales}\} \quad (8)$$

$$F = \{\text{espacio imagen de } \Phi(\mathbf{u}, t)\}$$

con $\boldsymbol{\lambda}$ el vector de multiplicadores de Lagrange.

Si consideramos que la función Φ son m restricciones escalares de la forma $\Phi = (\phi_1, \dots, \phi_m)$, la formulación (L) queda

$$\text{minimizar} \quad A(\mathbf{u}, t) + \lambda_1 \cdot \phi_1(\mathbf{u}, t) + \dots + \lambda_m \cdot \phi_m(\mathbf{u}, t) \quad \mathbf{u} \in \mathbf{S}$$

La formulación débil asociada a (8) es

$$\left. \begin{aligned} \delta \mathbf{u}^T D A^T(\mathbf{u}) + \delta \mathbf{u}^T D \Phi^T(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} &= 0 \\ \delta \boldsymbol{\lambda}^T \Phi(\mathbf{u}) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\delta \mathbf{u} \in \mathbf{V} \quad \delta \boldsymbol{\lambda} \in L(F)$$

$$\mathbf{V} = \{\delta \mathbf{u} \in H^1(\Omega); \delta \mathbf{u}|_{\partial\Omega} = 0 \quad D\Phi(\mathbf{u}, t) \cdot \delta \mathbf{u} = 0\}$$

donde $\delta \mathbf{u}$ es una variación admisible, \mathbf{V} el espacio de variaciones admisibles de \mathbf{S} . Si se establece la segunda variación de (9) para resolver por Newton-Raphson, se tiene

$$\left. \begin{aligned} \delta \mathbf{u}^T D^2 A(\mathbf{u}) \Delta \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}^T D^2 \Phi(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} \Delta \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}^T D \Phi^T(\mathbf{u}) \Delta \boldsymbol{\lambda} &= 0 \\ \delta \boldsymbol{\lambda}^T D \Phi(\mathbf{u}) \Delta \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

e incorporando una aproximación estándar de elementos finitos con las mismas funciones de forma para \mathbf{u} y $\boldsymbol{\lambda}$

$$\begin{aligned}\delta\mathbf{u} &= \sum_A N_A \delta\mathbf{u}^A & \Delta\mathbf{u} &= \sum_A N_A \Delta\mathbf{u}^A \\ \delta\boldsymbol{\lambda} &= \sum_A N_A \delta\boldsymbol{\lambda}^A & \Delta\boldsymbol{\lambda} &= \sum_A N_A \Delta\boldsymbol{\lambda}^A\end{aligned}\quad (11)$$

se obtiene el siguiente sistema discreto (con notación de Einstein)

$$\left. \begin{aligned}\delta\mathbf{u}^{AT} N_A^T D^2 A(\mathbf{u}) N_B \Delta\mathbf{u}^B + \delta\mathbf{u}^{AT} N_A^T D^2 \Phi(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} N_B \Delta\mathbf{u}^B + \\ + \delta\mathbf{u}^{AT} N_A^T D \Phi^T(\mathbf{u}) N_B \Delta\boldsymbol{\lambda}^B = 0 \\ \delta\boldsymbol{\lambda}^{AT} N_A^T D \Phi(\mathbf{u}) N_B \Delta\mathbf{u}^B = 0\end{aligned}\right\} \quad (12)$$

cuya expresión matricial es

$$\begin{pmatrix} \delta\mathbf{u}^{AT} & \delta\boldsymbol{\lambda}^{AT} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{AB}(\mathbf{u}) + \tilde{F}_{AB}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) & \mathbf{G}_{AB} \\ \mathbf{G}_{AB}^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \Delta\mathbf{u}^B \\ \Delta\boldsymbol{\lambda}^B \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{r}_u \\ \mathbf{r}_\lambda \end{Bmatrix}$$

$$\mathbf{K}_{AB}(\mathbf{u}) = N_A^T D^2 A(\mathbf{u}) N_B$$

$$\text{con} \quad \tilde{F}_{AB}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}) = N_A^T D^2 \Phi(\mathbf{u}) \boldsymbol{\lambda} N_B$$

$$\mathbf{G}_{AB} = N_A^T D \Phi^T(\mathbf{u}) N_B$$

La matriz de rigidez tangente se puede descomponer como

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K}_{AB} + \tilde{F}_{AB} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}}_{\text{Rigidez}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \tilde{F} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{0} \end{pmatrix}}_{\text{Restricción}} \quad (13)$$

donde, en la parte *Rigidez*, se incorporan las matrices de rigidez estándar para elementos finitos (en nuestro caso de los elementos rígido y barra) y en la parte *Restricción* se incorporan la definición de las restricciones y la matriz de rigidez correspondiente a dichos elementos.

A la vista de (13) es claro que para el método de proyección y retorno la matriz que hemos denominado por *restricción* es nula, dado que la restricción se incorpora al espacio de soluciones, luego la variación admisible cumple

$$\delta\mathbf{u}^T D \Phi(\mathbf{u}) = 0 \Rightarrow \delta\mathbf{u}^{AT} N_A^T D^2 \Phi(\mathbf{u}) N_B \Delta\mathbf{u}^B = 0$$

por lo que no se incorporan las variaciones primera ni segunda de las restricciones.

Si expresamos ahora la formulación débil (9) en la siguiente forma equivalente

$$\left. \begin{aligned}\delta\mathbf{u}^T D A^T(\mathbf{u}) + \delta\mathbf{u}^T D \phi_1^T(\mathbf{u}) \lambda_1 + \dots + \delta\mathbf{u}^T D \phi_m^T(\mathbf{u}) \lambda_m = 0 \\ \phi_i(\mathbf{u}) \delta\lambda_i = 0 \quad i = 1, \dots, m\end{aligned}\right\} \quad (14)$$

y establecemos (14) en el punto medio del paso para los términos correspondientes a los elementos flexible y rígido y en un punto arbitrario para cada una de las restricciones las restricciones, mientras que se fuerza el cumplimiento de estas en el punto final del intervalo, se tiene

$$\left. \begin{aligned} & \delta \mathbf{u}^T [DA^T(\mathbf{u})]_{n+\gamma} + \delta \mathbf{u}^T [D\phi_1^T(\mathbf{u})\lambda_1]_{n+\beta_1} + \\ & + \cdots + \delta \mathbf{u}^T [D\phi_m^T(\mathbf{u})\lambda_m]_{n+\beta_m} = 0 \\ & \phi_i(\mathbf{u})|_{n+1} \delta \lambda_i = 0 \quad i = 1, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

con $\gamma = 0, 5$ y $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)$ una variable desconocida que constituye un conjunto de parámetros.

Por tanto, queda probar la existencia de dichos parámetros.

Proposición *Para ϕ_i restricción diferenciable con continuidad en el espacio de soluciones \mathcal{S} existe al menos un $\beta_i \in (0, 1)$ tal que la formulación (15), junto con los algoritmos energía momento para los elementos rígido y flexible,^{5,6} conserva el momento cinético total y la energía total, en ausencia de cargas externas y bajo condiciones de contorno tipo Neumann.*

Demostración *La conservación del momento y de la energía, en el caso de los elementos barra y rígido, se obtiene considerando una aproximación en el punto medio para las ecuaciones de evolución que da lugar a los algoritmos energía momento para dichos elementos con la correspondiente actualización de Cayley para los grados de libertad rotacionales.² Tan sólo es necesario demostrar la existencia de β_i , tal que elegidas las funciones de forma adecuadas, se cumpla*

$$\lambda_i [D\phi_i(\mathbf{u})]_{n+\beta_i} \Delta \mathbf{u} = 0$$

que se cumple si

$$D\phi_i(\mathbf{u})|_{n+\beta_i} \Delta \mathbf{u} = 0$$

pero, por el Teorema del Valor Medio se tiene que para ϕ_i (función escalar) diferenciable con continuidad existe un $\beta_i \in (0, 1)$, tal que

$$D\phi_i(\mathbf{u})|_{n+\beta_i} \Delta \mathbf{u}|_{n, n+1} = \phi_i(\mathbf{u})|_{n+1} - \phi_i(\mathbf{u})|_n$$

pero $\phi_i(\mathbf{u})|_n = 0$, mientras que $\phi_i(\mathbf{u})|_{n+1} = 0$ se fuerza en cada instante de tiempo.

En definitiva, conocida la existencia de $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_m)$, su obtención se realiza resolviendo la ecuación siguiente para cada una de las restricciones

$$\boldsymbol{\Psi}(\beta_i) = D\phi_i(\mathbf{u})|_{n+\beta_i} \Delta \mathbf{u}|_{n, n+1} - \phi_i(\mathbf{u})|_{n+1} + \phi_i(\mathbf{u})|_n \quad (16)$$

lo que, en nuestro caso, se realiza siguiendo un proceso iterativo de Newton-Raphson inmediato que se describe como sigue

$$\left\{ \begin{aligned} & \beta_{i_0} = 0, 5 \\ & \beta_{i_{k+1}} = \beta_{i_k} - \frac{1}{\boldsymbol{\Psi}'(\beta_{i_k})} \boldsymbol{\Psi}(\beta_{i_k}) \end{aligned} \right. \quad (17)$$

Debemos observar, en primer lugar, que para el caso de restricciones ϕ_i cuadráticas $\beta_i = 0,5$, mientras que para lineales β_i es arbitrario, resolviéndose el sistema (17) en una sola iteración. Esta es la razón por la que se obtiene la conservación de la energía de forma inmediata colocando todo el sistema (15) en $\gamma = \beta_i = 0,5$ y considerando sólo restricciones cuadráticas. Sin embargo, para restricciones polinómicas de orden superior o no polinómicas, la definición del parámetro β_i depende de la restricción en cada caso.

De acuerdo con lo anterior, es fácil de entender ahora el catálogo de ventajas y desventajas de este método, sobre todo cuando se compara con el anterior.

Ventajas del método

- Se conserva la energía y el momento de forma exacta.
- Es fácil obtener la linealización exacta del sistema (15) y con ello la convergencia cuadrática.
- Es incondicionalmente estable en los casos donde la energía sea una norma que induzca la estabilidad.

Inconvenientes del método

- No se alcanza un mínimo en la solución sino un puerto.
- Se aumenta la dimensión del problema.
- Se modifica la estructura de la matriz y deja de ser simétrica.

En el Apéndice A se muestra un ejemplo simple de la formulación y derivadas para una restricción senoidal.

EJEMPLOS NUMÉRICOS

Barra flexible con un punto en contacto con elemento rígido

Este ejemplo muestra la capacidad de conservación del algoritmo energía-momento para sistemas de elementos rígidos y flexibles acoplados a través de una restricción cuadrática. Este ejemplo es idéntico al propuesto por Taylor.¹²

La barra flexible tiene una longitud de 3,0 m y ha sido discretizada en 10 elementos lineales de igual longitud (dos nudos por elemento). La barra está fija en el origen. La esfera rígida, tiene un punto en contacto con la barra, como muestra la Figura 2.

La simulación numérica se ha desarrollado para un paso $\Delta t = 0,1$, y se han analizado 100 pasos. Como la restricción es cuadrática, entonces $\beta = 0,5$.

Figura 2. Barra unida a un sólido rígido

Para $t \geq 0$ todas las cargas externas son nulas, con lo que la propiedad de conservación de la energía es evidente como muestra la Figura 3, mientras que el momento no se conserva puesto que el sistema tiene una condición de apoyo.

Figura 3. Se conserva la energía total

Barra flexible y sólido rígido con una restricción trigonométrica

Figura 4. Restricción trigonométrica

En este ejemplo, los elementos de la Figura 4 están acoplados por la siguiente restricción

$$\Phi(\mathbf{u}) = \mathbf{u}_{1x}^2 \cos(\mathbf{u}_{2y}) - \mathbf{u}_{2z}^3 = 0$$

con las siguientes condiciones iniciales (velocidades nulas).

$$\mathbf{u}_1 = \{1, 414213562; 0; 0; 0; 0; 0\} \quad \mathbf{u}_2 = \{0; 1, 047197551; 1, 0; 0; 0; 0\}$$

La simulación numérica se ha desarrollado para 100 pasos con $\Delta t = 0,1$. Como la restricción es trigonométrica, es necesario el cálculo de β . La evolución de β es la mostrada en la Figura 5 mientras que la evolución del momento (que no se conserva, puesto que el nudo 4 está empotrado) y la energía, respectivamente, están mostradas en la Figura 6.

Figura 5. Evolución de Beta

Figura 6. Conservación de la energía total

CONCLUSIONES

Se han analizado dos métodos de integración de sistemas dinámicos tridimensionales con elementos flexibles. El primer método, denominado de proyección y retorno, si bien es interesante en cuanto a que no aumenta la dimensión del problema y mantiene la estructura de la matriz, resulta fallido en conservación y su convergencia se reduce drásticamente ante restricciones fuertemente no lineales. El segundo método constituye la extensión del algoritmo energía-momento a problemas con restricciones arbitrarias. Los resultados para este último concuerdan obviamente (por construcción) con las expectativas, es decir, se demuestra numéricamente la conservación de forma exacta del momento cinético y la energía para sistemas hamiltonianos. Además, la matriz de rigidez corresponde a la linealización exacta del sistema discretizado consiguiéndose con ello convergencia cuadrática en el algoritmo de Newton-Raphson utilizado para la resolución del sistema no lineal resultante. Finalmente, la implementación es muy simple, puesto que los multiplicadores se incorporan como nuevos nudos con sus correspondientes grados de libertad (1 en el caso de restricción escalar) y para restricciones no cuadráticas el valor de la variable β adscrita se obtiene mediante un procedimiento de Newton-Raphson de resolución de una ecuación escalar de solución inmediata y de bajo costo.

APÉNDICE A

Ejemplo: Minimización de un funcional con restricciones mediante el algoritmo de proyección

- Planteamiento del problema

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & \vartheta = \frac{1}{2}u_1^2 + \frac{1}{2}u_2^2 + u_3^2 + 4 \\ \text{sujeto a} \quad & f = \begin{cases} u_1^2 - u_1u_2 + u_2^2 - u_3^2 - 1 = 0 \\ u_1^2 + u_2^2 - 3 = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

de solución: mínimos en $(1, 2247; 1, 2247; \pm 0, 7071)$ con $\vartheta = 6$.

- Linealización de la restricción

$$\begin{bmatrix} 2u_1 - u_2 & 2u_2 - u_1 & -2u_3 \\ 2u_1 & 2u_2 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Delta u_1 \\ \Delta u_2 \\ \Delta u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(u_1, u_2) \\ f_2(u_1, u_2) \end{bmatrix} \begin{matrix} N = 3 \\ M = 2 \end{matrix} \Rightarrow \text{una variable independiente}$$

- Direcciones tangente y normal

$$\Delta u = (\Delta u_1, \Delta u_2, \Delta u_3) \quad \begin{cases} n_1 = (2u_1 - u_2, 2u_2 - u_1, -2u_3) \\ n_2 = (2u_1, 2u_2, 0) \end{cases}$$

- Resolución de la linealización

$$\begin{bmatrix} 0,8284 & 0,585 & -1,53 \\ 2,8284 & 2,0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta u_1 \\ \Delta u_2 \\ \Delta u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,0 \\ 0,0 \end{bmatrix}$$

variable independiente: Δu_2

vector tangente: $\{(-0,7071; 1,0, -0,4619)\Delta u_2\}^T$

- Planteamiento de la predicción

$$\mathbf{u} \in S^{N^*} \quad \mathbf{u}^{PR} = \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}$$

- Equilibrio en \mathbf{u}^{PR}

$$\left. \begin{aligned} D\vartheta(\mathbf{u}^{PR})\delta(\Delta \mathbf{u}) &= 0 \\ \delta(\Delta \mathbf{u}) &= \Delta \mathbf{u} \end{aligned} \right\} \iff D\vartheta(\mathbf{u}^{PR})\Delta \mathbf{u} = 0$$

- Solución: $\Delta u_2 = 0,3669 \quad \Delta \mathbf{u} = (-0,2595; 0,3669; -0,1695)^T$

$$\mathbf{u}^{PR} = (1,1547; 1,3669; 0,5958)^T$$

$$f(\mathbf{u}^{PR}) = (0,2685; 0,202)^T$$

$$\vartheta(\mathbf{u}^{PR}) = 5,955$$

- Retorno a la variedad de las restricciones:

\mathbf{u}^{PR} no pertenece a la variedad, por lo que se debe realizar el retorno de forma iterativa. En este caso, se propone el algoritmo de retorno por la normal

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^{PR} + \alpha n; \quad \bar{\mathbf{u}} \in M \iff \begin{cases} f_1(\bar{\mathbf{u}}) = 0 \\ f_2(\bar{\mathbf{u}}) = 0 \end{cases}$$

por tanto, hay resolver el problema no-lineal $f(\bar{\mathbf{u}}) = 0$, para lo cual se utiliza el algoritmo de Newton-Raphson:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1^0 \\ \alpha_2^0 \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} \alpha_1^{k+1} \\ \alpha_2^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1^k \\ \alpha_2^k \end{bmatrix} - \mathbf{J}^{-1} \begin{bmatrix} f_1(\alpha_1^k, \alpha_2^k) \\ f_2(\alpha_1^k, \alpha_2^k) \end{bmatrix} \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial f_1}{\partial \alpha_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial f_2}{\partial \alpha_2} \end{bmatrix}$$

donde \mathbf{J} representa el jacobiano de la transformación, es decir

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 4\bar{u}_3 u_3 + (2\bar{u}_1 - \bar{u}_2)(2u_1 - u_2) & (2\bar{u}_1 - \bar{u}_2)2u_1 + \\ + (2\bar{u}_2 - \bar{u}_1)(2u_2 - u_1) & + (2\bar{u}_2 - \bar{u}_1)2u_2 \\ 2\bar{u}_1(2u_1 - u_2) + 2\bar{u}_2(2u_2 - u_1) & 4\bar{u}_1 u_1 + 4\bar{u}_2 u_2 \end{bmatrix}$$

en nuestro caso

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^0 \\ \alpha_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0, 0 \\ 0, 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} 4, 80 & 6, 49 \\ 6, 49 & 12, 80 \end{bmatrix}$$

- Solución: tras cuatro iteraciones

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^0 \\ \alpha_2^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0, 1011 \\ 0, 0352 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \mathbf{u}^{\text{CR}} &= (1, 1406; 1, 3034; 0, 7164)^T \\ f_1(\mathbf{u}^{\text{CR}}) &= 0, 1254e - 4 \\ f_2(\mathbf{u}^{\text{CR}}) &= 0, 2456e - 5 \end{aligned}$$

más próxima a la variedad, mientras que el valor $\vartheta(\mathbf{u}^{\text{CR}}) = 6, 01313$ es más próximo al mínimo ($|6 - \vartheta(\mathbf{u}^{\text{PR}})| < |6 - \vartheta(\mathbf{u}^{\text{CR}})|$).

Ejemplo: Formulación de una restricción trigonométrica para el algoritmo energía-momento

Supongamos el siguiente caso particular de restricción trigonométrica

$$\Phi(\mathbf{u}) = \sin(\mathbf{u}_{1x}) - 2\mathbf{u}_{2y}^2 \mathbf{u}_{1x} = 0 \quad (18)$$

Como es no cuadrática, es necesario realizar el proceso descrito en (17) para la obtención de β . Una vez calculado β , las primeras variaciones son

$$\mathbf{K}2 = \left(\cos(\mathbf{u}_{1x}) - 2\mathbf{u}_{2y}^2 \quad 0 \quad 0 \quad 0_{1*3} \quad 0 \quad -4\mathbf{u}_{2y}\mathbf{u}_{1x} \quad 0 \quad 0_{1*3} \right) |_{n+\beta} \quad (19)$$

$$\mathbf{K}1 = \left(\cos(\mathbf{u}_{1x}) - 2\mathbf{u}_{2y}^2 \quad 0 \quad 0 \quad 0_{1*3} \quad 0 \quad -4\mathbf{u}_{2y}\mathbf{u}_{1x} \quad 0 \quad 0_{1*3} \right) |_{n+1}$$

y la segunda variación

$$\mathbf{H} = D[D\Phi(\mathbf{u})|_{n+\beta}] = \delta\mathbf{u}_{1x}[-\beta \sin(\mathbf{u}_{1x}|_{n+\beta})]\Delta\mathbf{u}_{1x} - \quad (20)$$

$$\delta\mathbf{u}_{1x}(4\beta\mathbf{u}_{2y}|_{n+\beta})\Delta\mathbf{u}_{2y} - \delta\mathbf{u}_{2y}(4\beta\mathbf{u}_{2y}|_{n+\beta})\Delta\mathbf{u}_{1x} - \delta\mathbf{u}_{2y}(4\beta\mathbf{u}_{1x}|_{n+\beta})\Delta\mathbf{u}_{2y}$$

Por tanto, para el correspondiente elemento que define la restricción la matriz de rigidez tangente y el vector de cargas del método son

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{n+\beta} \cdot \mathbf{H} & \beta \cdot \mathbf{K}2^T \\ \mathbf{K}1 & \mathbf{0}_{1*1} \end{pmatrix} \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{\lambda}_{n+\beta} \cdot \mathbf{K}2^T \\ -\Phi(\mathbf{u})|_{n+1} \end{pmatrix} \quad (21)$$

REFERENCIAS

- 11 A. Cardona y M. Geradin, "Time integration of the equations of motion in mechanism analysis", *Computers and Structures*, Vol. **33**, pp. 801–820, Univ. Liege, Bélgica.
- 2 C. Ferreira, "Simulación de mecanismos tridimensionales con elementos flexibles", Tesis doctoral, CPS Zaragoza, (1997).
- 3 H.M. Hilber, T.J.R. Hughes y R.L. Taylor, "Improved numerical dissipation for time integration algorithms in structural dynamics", *Earthquake Engng. and Struct. Dynamics*, Vol. **5**, pp.283–292, (1976).
- 4 I. San José, "Métodos multipaso para la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias de tipo stiff", Tesis doctoral, Zaragoza, (1995).
- 5 J.C. Simo y M. Doblaré, "Momentum and energy conserving algorithms for the dynamics of three-dimensional geometrically exact rods", *Sudam report*, N° 90-1, Stanford University, (1990).
- 6 J.C. Simo, N. Tarnow y M. Doblaré, "Non-linear dynamics of three-dimensional rods: exact energy and momentum conserving algorithms", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol.**38**, pp. 1431–1473 (1995).
- 7 J.C. Simo y M. Ortiz, "A unified approach to finite deformation elastoplastic analysis based on the use of hyperelastic constitutive equations", *Comp. Meth. in Applied Mech. and Engng.*, Vol. **49**, pp. 221–245, (1985).
- 8 J.C. Simo, D.D. Fox y M.S. Rifai, "On a stress resultant geometrically exact shell model. I. Formulation and optimal parametrization", *Comp. Meth. Applied Mech. and Engng.*, Vol. **72**, pp. 267–304, (1989).
- 9 J.C. Simo y N. Tarnow, "The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics", *Zangew Math. Phys.*, Vol. **43**, (1992).
- 10 J.C. Simo y L. Vu-Quoc, "On the dynamics in space of rods undergoing large motions-A geometrically exact approach" *Comp. Meth. Applied Mech. and Engng.*, Vol. **66**, pp. 125–161,(1988).
- 11 J.C. Simo y K.K. Wong, "Unconditionally stable algorithms for rigid body dynamics that exactly preserve energy and momentum", *Div. of Applied Mech. Dep. Mech. Engng.*, Stanford University, (1991).
- 12 R.L. Taylor y A.J.H. Chen, "Numerical solution of nonlinear coupled rigid and flexible systems", Preprint, Stanford University, (1996).