

BOLETIM TÉCNICO

DO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE ESTRUTURAS E FUNDAÇÕES

BT/PEF-8917

PEFMAT - UM PACOTE DE SUBROTINAS
MATEMÁTICAS PARA O LMC

(*) Paulo de Mattos Pimenta

(**) Priscila Goldenberg

(*) Professor Associado

(**) Professora Doutora

(recebido em 17/06/89)



ESCOLA POLITÉCNICA

DA

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

BT/PEF-8917

PEFMAT - UM PACOTE DE SUBROTINAS
MATEMÁTICAS PARA O LMC

(*) Paulo de Mattos Pimenta

(**) Priscila Goldenberg

(*) Professor Associado

(**) Professora Doutora

(recebido em 17/06/89)

EDITOR CHEFE

P.M.Pimenta

COMISSÃO EDITORIAL

- Engenharia de Solos	W.Hachich
- Estruturas de Concreto	P.B.Fusco
- Estruturas Metálicas e de Madeira	P.B.Fusco
- Interação Solo-Estrutura	C.E.M.Maffei
- Mecânica Aplicada	P.M.Pimenta
- Métodos Numéricos	J.C.André
- Pontes e Grandes Estruturas	D.Zagottis
- Teoria das Estruturas	V.M.Souza Lima

PEFMAT**Um pacote de subrotinas matemáticas para o LMC**

Paulo de Mattos Pimenta
Professor Associado

*Departamento de Engenharia de Estruturas e Fundações da
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo*

Priscila Goldenberg
Professor Assistente Doutor

*Departamento de Engenharia de Estruturas e Fundações da
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo*

Resumo

Um pacote de subrotinas matemáticas que deverá ser utilizado pelos professores e pesquisadores do Laboratório de Mecânica Computacional (LMC) é apresentado.

Abstract

A mathematical pack that shall be used by teachers and researchers of the Computational Mechanics Laboratory (LMC) is presented.

1. Introdução

O objetivo deste boletim técnico é de apresentar aos professores, pesquisadores e alunos de pós-graduação do Departamento de Engenharia de Estruturas e Fundações da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo o pacote de subrotinas matemáticas PEFMAT.

Este pacote está sendo desenvolvido pelo LMC (Laboratório de Mecânica Computacional) sob coordenação dos professores Paulo de Mattos Pimenta e Priscila Goldenberg, e com a participação dos professores Carlos Eduardo Nigro Mazzilli, João Cyro André e Henrique Lindenberg Neto.

O PEFMAT é uma coleção de subrotinas escritas em FORTRAN para operações matriciais, solução de sistemas de equações lineares e cálculo de autovalores ou autovetores para uso específico em aplicações estruturais. Ele deverá ser básico para o desenvolvimento do sistema de análise não-linear de estruturas do convênio BID/USP.

Com o desenvolvimento deste pacote espera-se:

- a) evitar repetição de trabalho nas pesquisas, dissertações e teses elaboradas no LMC
- b) coordenar as pesquisas em métodos numéricos tipicamente associados a problemas estruturais
- c) normalizar, organizar e padronizar a programação de métodos numéricos no LMC
- d) incrementar o relacionamento entre os professores e pesquisadores do Departamento

No desenvolvimento do PEFMAT respeitar-se-á a seguinte filosofia:

- a) as subrotinas deverão ser independentes de máquina
- b) as subrotinas terão seus nomes definidos por regras mnemônicas de nomenclatura a serem especificadas neste boletim
- c) a programação obedecerá normas a serem especificadas num manual de programação
- d) as subrotinas serão expostas em futuros boletins técnicos através de relatórios padronizados por este boletim e que serão reunidos num manual do usuário
- e) o pacote deverá aproveitar ao máximo subrotinas de outros pacotes conhecidos e testados, como EISPACK [1], LINPACK [2] e FORMAT [3]

O item e) acima influenciou fortemente a estrutura do pacote e justifica a adoção da linguagem FORTRAN. Esta linguagem também facilita a comunicação com outros centros de pesquisa em Análise Estrutural que a utilizam. Esta também é a razão pela qual, na padronização da nomenclatura, utilizamos letras indicativas das iniciais das palavras em inglês.

2. Considerações gerais de programação

Conforme já mencionado, o PEFMAT tem por objetivo agrupar, de forma sistemática, subrotinas matemáticas necessárias na resolução de problemas estruturais. Com vistas neste objetivo, tiveram que ser adotadas diversas convenções e normas de programação, como também foram fixadas algumas nomenclaturas que serão utilizadas nas subrotinas do pacote.

O PEFMAT está sendo desenvolvido em linguagem FORTRAN 77 normalizada pelo ANSI de modo a ser independente de máquina. Não serão utilizados comandos não normalizados, constantes dependentes de máquina, atribuições específicas de entrada e saída. Além disso alguns comandos, que podem trazer problemas na montagem de sistemas de porte, como os comandos de COMMON e EQUIVALENCE não serão permitidos.

As matrizes tratadas pelo PEFMAT deverão estar armazenadas conforme as normas especificadas no item seguinte deste boletim. Com vistas na eficiência adotaremos o armazenamento por colunas, isto é, como no FORTRAN o armazenamento de matrizes retangulares é feito por colunas, isto será extrapolado a todos os outros tipos de matrizes, e o acesso dentro dos laços será efetuado também por colunas, como indicado no exemplo abaixo,

```
      DO 10 J=1,N
      DO 20 I=1,M
      A(I,J) = ...
20    CONTINUE
10    CONTINUE
```

Maiores detalhes quanto a programação serão apresentados no manual de programação a ser publicado em breve.

3. Nomenclatura e normas de armazenamento de matrizes

3.1. Introdução

O nome de cada subrotina será um código indicativo do trabalho computacional efetuado por ela, sendo que todos os nomes terão no mínimo 4 letras e no máximo 6 letras.

A primeira letra do nome das subrotinas indicará o tipo das constantes envolvidas na computação. Este tipo de convenção visa facilitar a geração de variantes de programas. Desta forma o usuário poderá converter de um tipo

de aritmética para outra simplesmente mudando as declarações de tipo de constantes de seu programa e a primeira letra das subrotinas do PEFMAT utilizadas.

As demais letras do nome das subrotinas indicarão os tipos e formas de armazenamento de matrizes envolvidas assim como o tipo de computação efetuada pela subrotina.

No item 3.2. os tipos de constantes e a sua letra indicadora serão apresentados. No item 3.3. os tipos e formas de armazenamento de matrizes serão apresentados, enquanto nos itens 3.4. a 3.7. será fixada a nomenclatura das subrotinas relativas aos seguintes tipos de computação:

- a) operações matriciais
- b) decomposições
- c) resolução de sistemas de equações lineares
- d) cálculo de autovalores e autovetores

3.2. Tipos de constantes

Os tipos de constantes considerados até o momento e respectivas letras indicadoras estão listados abaixo.

- S constantes reais em precisão simples
- D constantes reais em precisão dupla
- I constantes inteiras
- C constantes complexas em precisão simples

3.3. Tipos de matrizes e formas de armazenamento

Serão considerados inicialmente fatores escalares e matrizes retangulares, simétricas, triangulares superiores, diagonais e vetores, designados por uma letra e armazenados conforme as seguintes normas.

F - fatores escalares

Constantes reais em simples ou dupla precisão.

R - matrizes retangulares

Armazenada de forma orientada por colunas, utilizando 3 parâmetros:

M número de linhas
 N número de colunas
 LD número de linhas declarado no comando de dimensionamento do subprograma que chama a subrotina do PEFMAT.

Se a matriz for armazenada num vetor, coluna após coluna, o que é recomendável, pois aumenta a eficiência do programa, o usuário deve fazer $LD = M$. Por exemplo, uma matriz retangular 2x3 será armazenada da seguinte forma.

$$\begin{bmatrix} R_1 & R_3 & R_5 \\ R_2 & R_4 & R_6 \end{bmatrix}$$

onde o índice indica o elemento do vetor, no qual o elemento da matriz retangular está armazenado.

P - matrizes simétricas armazenadas em forma "packed"

Uma matriz simétrica é armazenada em forma "packed" quando suas colunas forem armazenadas em um vetor, de cima para baixo, até a diagonal inclusive. Apenas um parâmetro é necessário:

N número de linhas ou colunas

Por exemplo, uma matriz simétrica 4x4 tem seus elementos armazenados conforme o seguinte esquema.

$$\begin{bmatrix} P_1 & P_2 & P_4 & P_7 \\ & P_3 & P_5 & P_8 \\ & & P_6 & P_9 \\ & & & P_{10} \end{bmatrix}$$

onde o índice indica o elemento no vetor, no qual o elemento da matriz é armazenado.

Note-se que o vetor, onde a matriz será armazenada, tem $N*(N+1)/2$ elementos.

B - matrizes simétricas armazenadas em banda

Uma matriz simétrica é armazenada em forma de banda se os seus elementos forem armazenados num vetor coluna por coluna, de cima para baixo, da extremidade da banda até a diagonal inclusive. Dois parâmetros são necessários:

N número de linhas ou colunas

IB semi-largura da banda

Por exemplo, uma matriz simétrica 5x5 com semi-largura de banda igual a 3 é armazenada de acordo com o seguinte esquema.

$$\begin{array}{c} \text{IB} \\ \left[\begin{array}{ccccc} B_1 & B_2 & B_4 & & \\ & B_3 & B_5 & B_7 & \\ & & B_6 & B_8 & B_{10} \\ & & & B_9 & B_{11} \\ & & & & B_{12} \end{array} \right] \end{array}$$

onde o índice indica o elemento no vetor, no qual o elemento da matriz é armazenado.

Note-se que o vetor, onde a matriz será armazenada, tem $IB*(IB+1)/2 + IB*(N-IB)$ elementos.

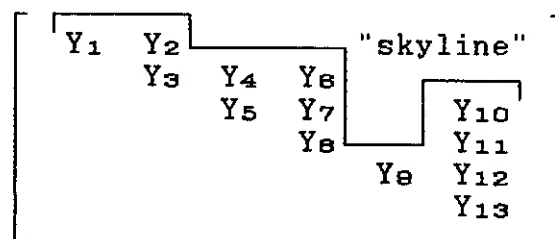
Y - matrizes simétricas armazenadas em "skyline"

Uma matriz simétrica é armazenada em "skyline" se os seus elementos forem armazenados em um vetor, coluna por coluna, de cima para baixo, do primeiro elemento não-nulo até a diagonal inclusive. São necessários os seguintes parâmetros:

N número de linhas ou colunas

IY vetor com N constantes inteiras com os endereços do elemento da diagonal da matriz, isto é, IY(I) contém o número da linha do vetor onde o elemento da diagonal da linha ou coluna I da matriz está armazenado

Por exemplo, uma matriz simétrica 6x6 é armazenada em "skyline" conforme o seguinte esquema.



onde o índice indica o elemento no vetor, no qual o elemento da matriz é armazenado. O vetor IY é neste exemplo dado por

$$IY = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 8 \\ 9 \\ 13 \end{bmatrix}$$

Note-se que o vetor, onde a matriz será armazenada, tem $IY(N)$ elementos.

U - matrizes triangulares superiores

Uma matriz triangular superior é armazenada em um vetor, coluna por coluna, do primeiro elemento até a diagonal inclusive. Apenas um parâmetro é necessário:

N número de linhas ou colunas

Uma matriz triangular inferior pode ser armazenada transposta o que a transforma numa matriz triangular superior.

Note-se que o vetor, onde a matriz será armazenada, tem $N*(N+1)/2$ elementos.

D - matrizes diagonais

Uma matriz diagonal é armazenada em um vetor, sendo necessário apenas um parâmetro:

N número de linhas ou colunas

Note-se que o vetor, onde a matriz será armazenada, tem N elementos.

V - vetores

Para um vetor apenas um parâmetro é necessário:

N número de linhas

3.4. Nomenclatura de subrotinas de operações matriciais

O formato do nome das subrotinas de operações matriciais é dado pelos seguintes esquemas:

```
* # $$
* # $$ #
* # $$ # $$
* # $$ # $$ #
```

onde

```
*      letra indicadora do tipo de constante
#      letra indicadora do tipo e forma de
        armazenamento de matriz
$$     letra ou letras indicadoras do tipo de
        operação matricial
```

Algumas operações e suas letras indicadoras são listadas abaixo.

```
A      adição
S      subtração
M      multiplicação
T      transposição
I      inversão
C      cópia
TO     conversão
SQ     raiz quadrada
CT     transformação congruente com transposta
```

CI transformação congruente com inversa
 IN inserção
 EX extração

exemplos

a) SDMR

S constantes reais em precisão simples
 D matriz diagonal
 M multiplicação
 R matriz retangular

A subrotina acima efetua a multiplicação de uma matriz diagonal por uma matriz retangular, sendo os dados reais em precisão simples.

b) SRTMP

S constantes reais em precisão simples
 R matriz retangular
 T transposição
 M multiplicação
 P matriz simétrica "packed"

A subrotina acima efetua a multiplicação de uma matriz retangular transposta por uma matriz simétrica armazenada em forma "packed".

3.5. Nomenclatura de subrotinas de decomposição

O formato do nome das subrotinas de decomposição matricial é dado pelo seguinte esquema:

* # &&

onde

* letra indicadora do tipo de constante
 # letra indicadora do tipo e forma de armazenamento de matriz
 && letra ou letras indicadoras do tipo de decomposição

Algumas decomposições são listadas abaixo.

CH decomposição em fatores de Choleski
 QR decomposição QR
 LU decomposição LU
 RU decomposição polar
 CR decomposição em fatores de Crout

exemplo

a) DPCH

D constantes reais em precisão dupla
 P matriz simétrica em forma "packed"
 CH decomposição em fatores de Choleski

A subrotina acima efetua a decomposição em fatores de Choleski de uma matriz simétrica positiva definida armazenada em forma "packed".

3.6. Solução de sistemas de equações lineares

O formato do nome das subrotinas para solução de sistemas de equações lineares está indicado abaixo.

* # && %%

onde

* letra indicadora do tipo de constante
 # letra indicadora do tipo e forma de armazenamento da matriz
 && letra ou letras indicadoras do método de solução
 %% letras indicadoras do tipo de cálculo efetuado

Alguns métodos de solução são representados pelas seguintes letras.

CH Método de Choleski
 CR Método de Crout

GS Método de Gauss-Seidel
 QN Método quase-Newton
 QR Método QR de Householder

Os seguintes tipos de cálculo são previstos:

SL solução sem o cálculo do número de condição
 SC solução com o cálculo do número de condição

exemplo

a) DYCHSL

D constantes reais em precisão dupla
 Y matriz simétrica em "skyline"
 CH método de Choleski
 SL solução sem o cálculo do número de condição

A subrotina acima resolve um sistema de equações lineares pelo método de Choleski sem calcular o número de condição. O sistema possui uma matriz simétrica armazenada em forma de "skyline".

3.7. Nomenclatura de subrotinas para o cálculo de autovalores e autovetores

O formato do nome das subrotinas para o cálculo de autovalores e autovetores está indicado abaixo.

* # && %%

onde

* letra indicadora do tipo de constante
 # letra indicadora do tipo e forma de armazenamento da matriz
 && letra ou letras indicadoras do método de cálculo de autovalores ou autovetores
 %% letras indicadoras do tipo de cálculo efetuado

Alguns métodos de cálculo são representados pelas seguintes letras.

SE iteração por sub-espacos

LZ método de Lanczos

O seguinte tipo de cálculo é previsto:

EV cálculo de autovalores e auto vetores

4. Relatório do usuário

O relatório do usuário deverá seguir o seguinte formato:

NOME DA SUBROTINA: nome da subrotina

OBJETIVO: rápida descrição do objetivo da subrotina bem como eventuais restrições

UTILIZAÇÃO: CALL nome da subrotina (lista de argumentos)

ARGUMENTOS: lista de todos os argumentos da subrotina, indicando as suas características e se podem ser superpostos

ALGORITMO UTILIZADO: rápida descrição do algoritmo utilizado com indicação da bibliografia pertinente (somente se for necessário)

SUBROTINAS REQUERIDAS: lista das subrotinas do PEFMAT chamadas por esta subrotina (somente se for necessário)

OBSERVAÇÕES: observações e precauções relevantes à utilização da subrotina

5. Referências

[1] Smith B.T. *et alli*, Matrix Eigensystem Routines: EISPACK GUIDE, 2nd ed., Lecture Notes in Computer Science 6, Springer Verlag, New York, 1976.

[2] Dongana, J.J. *et alli*, LINPACK USER'S GUIDE, SIAM, Philadelphia, 1979.

- [3] Argyris, J.H. *et alli*, FORMAT USER'S MANUAL, ISD Report 233, Stuttgart, 1982.