

NI - I - N. 59

E. FABRI[^]), L. GUERRI^o) - (Centro Studi Calcolatrici
Elettroniche della Univer
sità di Pisa)

Impiego della "macchina ridotta" del C.S.C.E. di Pi-
sa nella soluzione di alcuni problemi.

La Macchina ridotta del C.S.C.E. è entrata in funzione in modo completo verso la metà del 1957. Da allora fino alla fine del 1958 essa è stata disponibile per calcoli per una larga parte del tempo. Sebbene la macchina non fosse stata originariamente prevista per un impiego effettivo, ma solo per collaudi e prove tecniche, è stato possibile svolgerci un discreto lavoro, anche se le limitazioni cui si farà cenno in seguito hanno pesato sulla possibilità di eseguire calcoli di una certa complessità. Esporremo ora, seguendo all'incirca un ordine cronologico, il lavoro svolto sulla Macchina Ridotta (M.R.) indicando per ogni calcolo origine, difficoltà, tempo richiesto per la programmazione e per l'esecuzione, e ogni altro dato che possa riuscire interessante.

Studio di strutture di cristalli.

Questo studio si riconduce ad un'analisi diretta e

[^]) Attualmente all'Istituto di Fisica dell'Università di Pisa.

^o) Distaccato dalla Sezione di Pisa dell'INFN presso il C.S.C.E.

inversa Fourier.

Nel caso dell'analisi diretta si doveva calcolare:

$$F(x,y) = \sum_{r=0}^N \sum_{s=-N}^N a_{rs} \cos 2\pi(rx + sy)$$

assegnati gli a_{rs} e N (con $N \leq 15$)

e: $x = 0 d, 1 d, 2 d \dots 50 d$
 $y = 0 d, 1 d, 2 d \dots 100 d$

$d = 0,02$ oppure $d = 0,01$

I valori distinti del coseno sono 100 (per $d=0,02$ ne servono solo 50). Questi 100 valori del coseno sono stati incorporati nel programma.

Per $d=0,02$ si ha un reticolo di 1326 punti. L'intero calcolo comporta $(N+1) \cdot (2N+1) \cdot 1326$ moltiplicazioni. La moltiplicazione, non essendo disponibile come istruzione, era eseguita come sottoprogramma. Tempo di calcolo: 1 ora circa di cui $1/3$ impegnato per la stampa dei risultati fatta, carattere per carattere, a mezzo telescrivente.

Nel caso $d=0,01$ le cifre e i tempi sopraindicati vanno moltiplicati per 4.

Per l'analisi inversa si doveva calcolare:

$$G(h,K) = \sum_{r=0}^N a_r(h,k) \cos 2\pi(hx_r + Ky_r)$$

assegnati:

a) N (con $N \leq 20$)

b) l'insieme dei valori di h e k e dei relativi coefficienti

$$a_r(h,k) \quad (r = 0, 1, 2 \dots N)$$

c) x_r e y_r ($r = 0, 1, 2 \dots N$) compresi fra 0 e 1.

Il coseno era calcolato per mezzo di un sottoprogramma. Tempo di calcolo: variabile fra 5 e 10 minuti.

Analisi periodale di frequenze critiche ionosferiche e correlazioni con i dati sulle attività solari.

Questo è il calcolo che ha occupato per più lungo tempo la macchina causa la notevole massa di dati da elaborare. Il calcolo constava di due parti: la prima era l'analisi periodale delle frequenze critiche ionosferiche, con la ricerca delle componenti a periodo 12h e 24h nonché delle componenti a periodo annuale e dell'andamento secolare. Da un punto di vista matematico il problema non presentava alcuna difficoltà; c'era solo la necessità di introdurre un gran numero di dati (circa 25.000 numeri di tre cifre) e di stampare un numero ancora più grande (circa 80.000 di quattro cifre). Tutto il calcolo è stato ripetuto due volte per controllo, e tre o quattro volte nei punti dove si scoprivano errori.

Il tempo effettivo di calcolo era trascurabile rispetto a quello di stampa, nonostante che per ogni numero stampato occorressero in media quattro moltiplicazioni più un numero imprecisato di addizioni e sottrazioni. Questa prima parte del calcolo ha richiesto in totale circa 60 ore di macchina, distribuite però in parecchi giorni a causa di errori, interruzioni varie, necessità di controlli, ecc. Il lavoro di programmazione può essere valutato a 15 giorni di due persone.

La seconda parte del calcolo era matematicamente più semplice della precedente, ma presentava difficoltà di organizzazione. Occorreva infatti utilizzare i risultati della prima parte (già disponibili su nastro perforato) per il calcolo delle somme e somme di qua-
drati per ogni singola serie di dati; occorreva poi calcolare le somme dei prodotti dei termini di ciascu-
na delle serie con quelli di ciascuna serie di dati dell'attività solare (preventivamente preparati su nastro). Non è il caso di entrare ora in dettagli sul la questione: basta accennare che il nastro passato attraverso l'organo di entrata della macchina si mi-
sura in Km. I risultati da stampare erano circa 15.000 numeri di dieci cifre e il tempo impiegato è circa lo stesso della prima parte, con le stesse avverten-
ze. Il lavoro di programmazione è stato invece alquan-
to minore: circa 10 giorni di una persona.

Calcolo delle autofunzioni e dei livelli fondamentali di sistemi atomici.

Il lavoro in questione è stato studiato e programmato a titolo di prova da un gruppo dell'Istituto di Chimica Fisica, nel caso della molecola-ione di idro-
geno. Il calcolo era condotto con un metodo variazio-
nale-iterativo e ha dato risultati soddisfacenti. Non siamo in grado di valutare il tempo di programma-
zione, che non si discosta però come ordine di gran-
dezza da quelli già indicati; il tempo di calcolo era molto breve, di alcuni secondi nel caso effettivamente eseguito.

Calcolo dell'equilibrio di un reticolo cristallino*

Il problema era riducibile alla ricerca del minimo di una funzione algebrica di 4 variabili, alquanto complicata causa la presenza di molte radici quadrate. In questo caso non esistevano questioni derivanti dalla mole del lavoro, ma le limitazioni principali sono derivate dalla scarsa precisione ottenibile (l'uso delle tecniche di "doppia precisione" era impraticabile perchè avrebbe complicato il programma in modo eccessivo rispetto alla importanza del lavoro). Il programma ha effettivamente funzionato, ma senza fornire risultati utili giacchè le variazioni dovute ad arrotondamenti ed approssimazioni nascondevano il minimo reale della funzione. Il tempo di macchina era in questo caso trascurabile; la programmazione ha richiesto 10 giorni di due persone.

Aggiustamento su dati sperimentali di una funzione di prova.

Il calcolo, condotto con il metodo dei minimi quadrati, utilizzava per la ricerca del minimo lo stesso programma impiegato nel caso precedente (calcolo dell'equilibrio di un reticolo cristallino). Il programma ha fornito i risultati voluti, che hanno però mostrato che la scelta della funzione di prova era inadeguata. Il tempo di macchina è stato di qualche ora, quello di programmazione di circa una settimana per una persona.

Ricerche sui metodi di Monte Carlo.

Sono state condotte varie ricerche sull'impiego di tecniche probabilistiche nella risoluzione di vari problemi. Il lavoro è stato orientato in primo luogo verso la ricerca del più conveniente metodo di produzione di numeri "pseudo-casuali" ⁽⁰⁾. Si è trovato che buoni risultati si ottenevano con il metodo noto col nome di "serie di Fibonacci", purchè si lavorasse in doppia precisione. Ciò per evitare il presentarsi di quasi-periodi troppo brevi nella successione, che avrebbe impedito la costruzione di statistiche abbastanza ampie senza errori sistematici.

Col metodo accennato, e con altri sperimentati, è stata programmata la risoluzione di sistemi di equazioni lineari.

0) Conviene accennare che l'impiego di un metodo di Monte Carlo richiede la produzione di eventi casuali, che si può sempre ridurre a quella di numeri casuali. Senza ricorrere a effettive estrazioni o sorteggi, si può ricorrere a tavole di numeri casuali già esistenti; tale procedimento non è però indicato per una macchina con memoria piccola ed entrata non molto veloce, come la nostra M.R. L'altra possibilità è quella di far produrre alla macchina, secondo un processo deterministico, successioni di numeri che abbiano "apparenza casuale", nel senso che la regolarità della successione sia completamente nascosta sotto un'apparente irregolarità. I numeri così ottenuti si dicono pseudo-casuali. Perchè lo si possa accettare, un metodo di produzione di numeri pseudo-casuali deve superare appositi controlli, sui quali non ci possiamo qui soffermare.

Il risultato è stato il seguente: a causa delle limitazioni della macchina non era possibile rendere il Metodo di Monte Carlo competitivo con quelli algebrici; ciò a causa dell'eccessivo tempo necessario a produrre il singolo evento casuale. Un dato indicativo è il seguente; la risoluzione all'1% di un sistema di 10 equazioni si otteneva in alcuni minuti, ma il tempo necessario cresceva col quadrato della precisione richiesta. Il metodo di Monte Carlo è conveniente per precisioni non troppo elevate e con molte equazioni (il tempo di calcolo va infatti col quadrato del numero di equazioni) mentre coi metodi algebrici va col cubo; ma la M.R. non consentiva, causa la scarsità di memoria, di sperimentare i casi interessati. Strettamente legata alla soluzione dei sistemi lineari è l'inversione di matrici, che è stata tentata con risultati del tutto analoghi.

Altre prove sono state condotte su equazioni integrali (problemi di sopravvivenza) e su problemi direttamente probabilistici, sempre con risultati simili: si ottenevano facilmente delle soluzioni grossolane, ma il tempo di calcolo diveniva proibitivo se si cercava di raffinare i risultati.

Un'altra difficoltà pratica che conviene accennare è risultata dall'eventualità di errori della macchina: mentre in un calcolo ripetitivo un errore può influire su un solo o su pochi dei molti risultati finali, nel caso dei metodi di Monte Carlo è necessario che nessun errore si verifichi per tutto il tempo del calcolo, pena ^{la} perdita totale del lavoro già fatto.

Determinazione esatta delle autofunzioni del momento angolare di più elettroni.

Questo calcolo è descritto in dettaglio in altra comunicazione^{o)}, alla quale si rimanda per ogni notizia.

Varie.

E' appena il caso di accennare al lavoro di programmazione preliminare consistente nella elaborazione di tutti i sottoprogrammi che sono stati impiegati nei calcoli descritti; va solo detto che il relativo tempo di programmazione - abbastanza considerevole, data anche l'inesperienza iniziale - non è stato considerato nelle stime date sopra.

Altro tempo, è stato preso dalla complicazione di programmi di prova e diagnostici, sia pure molto semplice, necessari per controllare la macchina e scoprire eventuali guasti.

Altri programmi effettivamente eseguiti sulla M.R. vanno meglio catalogati come esercizi e studi di programmazione che come applicazioni pratiche; ad esempio lavori di teoria dei numeri (divisori di un numero, M.C.D., numeri primi, numeri perfetti, ecc.)

E. Abate, E. Fabri - Impiego di una calcolatrice elettronica nella ricerca delle autofunzioni del momento angolare orbitale in accoppiamento di Russel-Saunders.

o questioni a carattere combinatorio (permutazioni ecc.). Tra questi ultimi programmi merita di essere segnalato per la sua complessità logica e per un certo interesse teorico quello per la costruzione di tautologie del calcolo delle proposizioni. Si tratta di un problema di logica simbolica, immediatamente riducibile ad un problema combinatorio: disporre dei simboli di proposizioni, dei simboli di connettivi logici e delle parentesi in modo che le espressioni risultanti, se interpretate secondo opportune regole, risultino formule di proposizioni identicamente vere (tautologie). Il programma ha potuto essere fatto in pochi giorni, ma il tempo di macchina necessario per ottenere tautologie non banali è risultato eccessivamente lungo (giorni o mesi).
