COMITATO NAZIONALE PER L'ENERGIA NUCLEARE
Laboratori Nazionali di Frascati

LNF-62/28

G. Fronterotta e A. Rambaldi:

INVERSIONE DI MATRICI CON IL METODO DELL'ORTOGONALIZZAZIONE.

Nota interna: n° 131
18 Aprile 1962

Servizio Documentazione
dei Laboratori Nazionali di Frascati del CNEN
Casella Postale 70 - Frascati (Roma)

Laboratori Nazionali di Frascati del C.N.E.N.
Servizio Documentazione

LNF-62/28

Nota interna: n° 131
18 Aprile 1962

G. Fronterotta[(x)] e A. Rambaldi[(x)]:
INVERSIONE DI MATRICI CON IL METODO DELL'ORTOGONALIZZAZIONE

Si presenta un programma di calcolo, compilato in linguaggio Fortran, per l'inversione di matrici con il metodo dell'ortogonalizzazione.

Il problema della risoluzione dei sistemi di equazioni lineari è un problema molto difficoltoso quando il numero di equazioni supera 6 ÷ 7.

La difficoltà consiste nel fatto che usando degli elaboratori elettronici con un limitato numero di cifre significative, può accadere che l'approssimazione introdotta sia così bassa da portare a delle soluzioni tutt'altro che vicine a quelle vere.

Le cose si complicano notevolmente se si viene a cadere in un sistema mal condizionato, nel senso che il determinante dei coefficienti risulta molto piccolo in valore assoluto rispetto ad uno qualsiasi degli elementi della matrice dei coefficienti: in tale situazione è sufficiente

(x) - Istituto di Fisica dell'Università di Roma

una variazione di $\sim \pm 1‰$ su qualcheduno dei coefficienti più grandi, per portare, anche in casi in cui l'ordine del sistema è 2, a variazioni di $\sim 500 \div 600\%$ (ed oltre) in valore assoluto sulle soluzioni.

Eliminando dalla trattazione i sistemi mal posizionati, lo scopo di questa nota è quello di presentare un metodo di calcolo per l'inversione di matrici e di un programma già provato allo scopo per l'elaboratore elettronico 1620 I.B.M.

Metodo di calcolo (Aparo-Ricerca Scientifica-n° 7-1955)

Data una matrice reale a, con n righe e n colonne, e una matrice b, pure reale, un sistema di equazioni lineari è:

$$\sum_{1k}^{n} a_{hk}\, x_k = b_h \tag{1}$$

indicando con un asterisco in alto la matrice trasposta, la (1) si scrive in forma compatta

$$a^{*}a\ x = a^{*}b \tag{2}$$

Una utile variante di tale sistema si basa sulla ricerca di due matrici p e c tali che

$$\begin{aligned} a\ p &= c \\ c^{*}c &= d \end{aligned} \tag{3}$$

con d matrice diagonale, e p triangolare superiore.

Il sistema (1) si risolve con la formula

$$x = p\ d^{-1}\ c\ b \tag{4}$$

la cui verifica è immediata.

Si tratta quindi di determinare p, c, d essendo b la matrice dei termini noti, che nel nostro caso è ovviamente la matrice unità.

Il calcolo viene eseguito iterativamente, con il seguente schema:

1a) calcolo di $a_1^* a_1 = d_{11} = c_1^* c_1$

2a) calcolo di $c_1^* a_2 / c_1^* c_1 = q_{12}$

3a) calcolo di c_2 come combinazione lineare delle colonne $c_1, a_2, \ldots\ldots, a_n$ con gli n coefficienti $(-q_{12}, 1, 0, \ldots\ldots, 0)$

4a) registrazione della colonna c_2 nel posto ove era registrata precedentemente la colonna a_2

5a) combinazione lineare delle colonne $e_1, e_2, \ldots\ldots, e_n$ (della matrice unità) con gli n coefficienti $(-q_{12}, 1, 0, \ldots\ldots, 0)$ ottenendo così p_2

6a) registrazione di p_2 nel posto già occupato precedentemente dalla colonna e_2

....

....

....

e così via sino ad ottenere c, p.

Quindi detta a la matrice da invertire, avremo

$$a^{-1} = p\, d^{-1}\, c^* \tag{5}$$

In realtà tale soluzione può essere affetta da errori dovuti allo scarso numero di cifre significative eseguiti dall'elaboratore elettronico nel computo delle varie operazioni, quindi è opportuno apportare delle correzioni al calcolo.

Gli errori più notevoli si hanno nel computo della matrice d come risultato dell'operazione $c^* c$; tale operazione darà quindi un risultato pari a

$$c^* c = d + \varepsilon \tag{6}$$

dove ε è una matrice quadrata di ordine n pseudosimmetrica, cioè con gli elementi sulla diagonale tutti nulli, e gli altri elementi tutti simmetrici, essi sono dati da:

$$\varepsilon_{hk} = c_h^* \, c_k \qquad (h < k)$$

In tal modo la soluzione sarà, in seconda approssimazione, data da

$$a^{-1} \cong p \, d^{-1} \, c^* - p \, d^{-1} \, \varepsilon \, d^{-1} \, c^* \tag{7}$$

Conclusioni

Il metodo ora descritto è il metodo dell'ortogonalizzazione in seconda approssimazione.

Da verifiche da noi eseguite possiamo concludere che per matrici che siano ben condizionate è sufficiente usare tale metodo in prima approssimazione.

E' abbastanza ovvio che tale metodo perde quasi di significato quando si abbia a che fare con matrici mal condizionate.

Sembra inoltre che esso vada bene per l'inversione di matrici di ordine ≤ 63.

Risulta ovvio che tale ordine non potrà mai essere raggiunto da una macchina calcolatrice del tipo 1620 I.B.M., poichè tale calcolatore ha un limitato numero di posizioni di memoria; quindi un tale calcolo per ordini così elevati può essere eseguito solo con elaboratori del tipo 704 I.B.M.

Nel programma le variabili sono così indicate:

A(I,K)	matrice da invertire
E(I,K)	matrice unità
Q(I,K)	matrice q descritta precedentemente
P(I,K)	matrice p descritta precedentemente
D(K)	matrice d diagonale
EPS(I,K)	matrice pseudosimmetrica
HC(I,K)	matrice correzione
E(I,K)	matrice inversa approssimata
EPS(I,K)	matrice inversa

Nel programma l'ingresso è il seguente:

ordine della matrice N (N_{max} = 10)
lettura da nastro della matrice da invertire e di quella unità nell'ordine seguente

A(I,K) E(I,K)

L'uscita del programma è costituita dalla matrice inversa

EPS(I,J) I J

Presentiamo infine il programma in linguaggio Fortran, come è stato da noi usato con dei risultati del tutto soddisfacenti:

```
C     ENTRANO NELLA MANIERA SEGUENTE LE DUE MATRICI
C     A(I,K) ED E(I,K)  A(1,1),E(1,1),A(1,2),E(1,2),..
C     ESCE SOLO LA MATRICE INVERSA
C     SE SI VUOLE SOLO LA PRIMA APPROSSIMAZIONE
C     ARRESTARE IL PROGRAMMA ALLA ISTRUZIONE 30
C     QUINDI FARE STAMPARE LA MATRICE E(I,J)
C     CHE VI E SCRITTA
C     QUESTA E LA MATRICE INVERSA IN PRIMA APPROSSIMAZIONE
      DIMENSION A(10,10),E(10,10),Q(10,10),P(10,10),D(10)
      DIMENSION EPS(10,10),HC(10,10)
  500 ACCEPT,N
```

```
      DO 1 I=1,N
      DO 1 K=1,N
    1 READ,A(I,K);E(I,K)
      N1=N-1
      DO 1938 K=1,N1
      K1=K+1
      SUM=0.0
      DO 3 I=1,N
    3 SUM=SUM+A(I,K)°A(I,K)
      D(K)=SUM
      DO 4 J=1,K
      SUM=0.0
      DO 5 I=1,N
    5 SUM=SUM+A(I,J)°A(I,K1)
      COM=SUM/D(J)
    4 Q(J,K1)=COM
      DO 7 I=1,N
      SUM=0.0
      DO 6 J=1,K
    6 SUM=SUM - Q(J,K1)°A(I,J)
      COM=A(I,K1)+SUM
    7 A(I,K1)=COM
      DO 8 I=1,N
      SUM=0.0
      DO 9 J=1,K
    9 SUM=SUM-Q(J,K1)°E(I,J)
      COM=E(I,K1)+SUM
    8 E(I,K1)=COM
 1938 CONTINUE
      SUM=0.0
      DO 55 I=1,N
   55 SUM=SUM+A(I,N)°A(I,N)
      D(N)=SUM
      DO 60 J=1,N
      COM=1./D(J)
   60 D(J)=COM
      DO 20 I=1,N
      DO 20 J=1,N
      COM=E(I,J)°D(J)
   20 P(I,J)=COM
      DO 30 I=1,N
      DO 30 J=1,N
      SUM=0.0
      DO 27 K=1,N
   27 SUM=SUM+P(I,K)°A(J,K)
   30 E(I,J)=SUM
C    INVERSIONE IN PRIMA APPROSSIMAZIONE TERMINATA
C    VOLENDO FAR STAMPARE LA E(I,J)
```

```
C     COMINCIA LA SECONDA APPROSSIMAZIONE
      DO 39 J=1,N
      DO 39 K=J,N
      IF(J-K)833,801,833
  801 EPS(J,J)=0.0
      GO TO 39
  833 SUM=0.0
      DO 47 I=1,N
   47 SUM=SUM+A(I,J)°A(I,K)
      EPS(J,K)=SUM
      EPS(K,J)=SUM
   39 CONTINUE
      DO 70 I=1,N
      DO 70 J=1,N
      COM=EPS(I,J)°D(J)
   70 HC(I,J)=COM
      DO 80 I=1,N
      DO 80 J=1,N
      SUM=0.0
      DO 87 K=1,N
   87 SUM=SUM+P(I,K)°HC(K,J)
   80 Q(I,J)=SUM
      DO 90 I=1,N
      DO 90 J=1,N
      SUM=0.0
      DO 97 K=1,N
   97 SUM=SUM+Q(I,K)°A(J,K)
   90 HC(I,J)=SUM
      DO 203 I=1,N
      DO 203 J=1,N
      COM=E(I,J)-HC(I,J)
      EPS(I,J)=COM
  203 TYPE,EPS(I,J)
      GO TO 500
      END
```