

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1978

00.78.26

CNEA-NT. 3/78

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

ALGORITMO DE OPTIMIZACION PARA PROCESOS DE CINETICA DE
ANIQUILACION DE DEFECTOS PUNTUALES POR RECOMBINACION Y
SUMIDEROS.

H.A. Peretti y G. Sánchez Sarmiento.

Centro Atómico Bariloche, C.N.E.A.
Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo
San Carlos de Bariloche

BUENOS AIRES
Febrero de 1978

RESUMEN

El presente trabajo tiene por objeto divulgar en la C.N.E.A. un algoritmo computacional para estudiar la cinética de procesos de recocido de defectos puntuales, de acuerdo a un modelo que considera migración libre de un determinado tipo de defecto en presencia del anti-defecto y de sumideros no saturables.

El estudio se hace mediante el ajuste de datos de recuperación isotérmica de la resistividad eléctrica y el resultado del ajuste consiste en la obtención de valores optimizados de los parámetros que incluye el modelo antedicho.

La finalidad del trabajo es brindar una herramienta útil a quienes investigan en el tema de defectos puntuales mediante mediciones de recuperación de la resistividad eléctrica, especialmente para el caso de metales deformados plásticamente.

A. INTRODUCCION

El estudio de la recuperación de la resistividad eléctrica residual en los metales es una técnica muy usual para obtener información sobre defectos puntuales [1,2]. En particular, el concimiento de la cinética con que el exceso de concentración de éstos evoluciona hacia el equilibrio, permite especular sobre los posibles mecanismos y tipos de defectos que intervienen en el proceso [3].

Sin embargo, vemos que en algunos casos el ajuste de los datos experimentales da lugar a discusión [4]. En particular en etapas de recuperación observadas después de deformación plástica, se ha encontrado que una misma curva isotérmica puede ser ajustada por leyes cinéticas provenientes de diferentes modelos. Tal es el caso de los datos de Cuddy [5] en hierro alfa, que Stals y Nihoul [6] ajustan a la cinética de Waite [7] que ellos hallan para el molibdeno.

Posteriormente Polák [8] encuentra soluciones que pueden ser aproximadas bien mediante la relación empírica llamada relación de Harper [4], que es del tipo de las que satisface, entre otros, el hierro [5,9].

Recientes datos de la etapa III en tantalio deformado a baja temperatura [10] admiten ser interpretados en términos de migración libre de intersticiales en presencia de vacancias y dislocaciones. El problema se trató desde el nunto de vista de la teoría de velocidad de reacción y, optimizando los parámetros que entran en el modelo, se obtuvo un buen ajuste de las curvas isotérmicas con la teoría.

Resultados no publicados [11] muestran que en forma similar también es posible obtener un buen ajuste de los datos de Cuddy en hierro alfa [5] de acuerdo a dicho modelo.

Dejando aquí de lado la discusión e interpretación de estos resultados [12], se comprende la importancia de poder contar con un modo práctico y accesible de controlar si tales o

cuales datos experimentales son bien descriptos por el modelo en cuestión.

Podría pensarse entonces en un procedimiento gráfico combinado con cálculos "manuales" para ajustar los parámetros del modelo propuesto a los datos experimentales. Ahora bien; generalmente el número de dichos parámetros es elevado (cuatro o cinco), y además puede ocurrir que por dificultades experimentales no se puedan obtener mediciones a tiempos muy largos respecto del tiempo de decaimiento exponencial característico de la cinética de primer orden a la cual se espera que asintotice el modelo propuesto.

En estos casos, dicha técnica de ajuste puede requerir innumerables cálculos tentativos, para cada uno de los cuales deben realizarse integraciones numéricas de funciones complicadas y resoluciones numéricas de ciertas ecuaciones no lineales, y el problema resulta por demás inabordable.

Es necesario entonces emplear, en estas situaciones, algoritmos numéricos de optimización implementados con un computador, obteniéndose rápidamente la optimización de un cierto número de parámetros con la precisión que se desee.

El objetivo de este trabajo es, precisamente, el de presentar un algoritmo computacional de optimización para el modelo mencionado y mostrar diversos casos en que éste se ha aplicado eficientemente.

B. EL PROBLEMA MATEMATICO

En un experimento de recuperación isotérmica se tiene un conjunto de N pares de valores (R_i, t_i) , donde R_i es la resistencia de la muestra luego de recocida un tiempo t_i a una dada temperatura constante. Dichos datos se pueden representar como la curva isoterma de la figura N° 1. Los valores t_i son tales que $0 < t_i < t_{i+1} < \infty$ y los correspondientes R_i análogamente cumplen:

$$R_0 > R_i > R_{i+1} > R_\infty.$$

Los valores R_0 y R_∞ , por razones experimentales, no son conocidos, sino que se pueden acotar dentro de un cierto rango.

El tratamiento matemático aplicado al modelo [10,12], permite efectuar el ajuste partiendo desde tiempos largos hacia más cortos, y no es necesario conocer R_0 ni tomarlo como parámetro a optimizar. Esta es una característica importante que vale la pena destacar y que proviene de la siguiente: la información de lo que ocurre a $t = 0$, es decir, las concentraciones iniciales de los defectos tipo intersticial y vacancia, aparecen en una constante δ , cuyo valor resulta de efectuar el empalme a tiempos largos de las curva teórica y experimental. Esta constante no afecta la forma de la curva sino que su logaritmo natural significa un corrimiento en el eje tiempo. Además, como su valor resulta en función de los demás parámetros, no representa un parámetro independiente a optimizar.

Existe, en cambio, un parámetro γ que sí afecta a la forma de la curva teórica y es necesario optimizar; este γ tiene que ver con la física del experimento isotérmico y representa cuánto compiten asintóticamente los sumideros fijos en relación a las vacancias que quedan sin saturar.

Tenemos entonces, hasta ahora, un parámetro importante asociado a la cinética que hay que optimizar y que llamamos γ y que sale de la teoría.

Una hipótesis básica es que la resistencia eléctrica que se mide es proporcional a las concentraciones de defectos, de la forma:

$$R - R_\infty \propto \rho_I V + \rho_V I$$

donde ρ_I y ρ_V son las resistividades específicas de los defectos tipo intersticial y vacancia respectivamente; I y V son las correspondientes concentraciones y a través de ellas está dada la dependencia temporal de la resistencia medida.

Del modelo resulta que:

$$\text{para } t \rightarrow \infty \quad \left\{ \begin{array}{l} I \rightarrow 0 \\ V \rightarrow V_{\infty} \end{array} \right. = \text{const.}$$

Y también nos dice que cuando es $\gamma \gg 1$, la cinética tiende asintóticamente a primer orden, es decir que el incremento de resistencia $\Delta R = R - R_{\infty}$ es de la forma:

$$\Delta R \rightarrow \Delta R_0 e^{-t/\tau}$$

donde ΔR_0 y τ son constantes.

Quiere decir entonces que, si conociésemos el valor de R_{∞} , graficando ΔR versus t en un gráfico semilogarítmico tendríamos una curva del tipo de la que aparece en la figura N° 2, donde los puntos asintotizan a una recta que tiene ordenada al origen ΔR_0 y pendiente negativa proporcional a la inversa del tiempo de decaimiento τ .

En los casos en que sea $\gamma \gtrsim 1$, el tiempo τ dejará de tener el significado físico antedicho, pero igualmente será un parámetro a considerar.

Definimos entonces, para cualquier tiempo t , los valores ΔR^* como los correspondientes a la recta "asintótica" para ese valor de t . Esto es:

$$\Delta R^* = \Delta R_0 e^{-t/\tau} \quad (1)$$

Del tratamiento matemático del modelo resulta que el ajuste entre teoría y experimento se puede hacer del siguiente modo:

Definimos una variable adimensional ρ tal que:

$$\rho = \Delta R / \Delta R^* \quad (2)$$

Y definimos también un tiempo adimensional experimental θ , dado por:

$$\theta = t / \tau \quad (3)$$

Ambas variables son de tipo experimental, es decir que provienen de datos experimentales de R y t , y de suponer conocidos los valores de R_{∞} , τ y ΔR_0 .

La teoría nos proporciona [10] un tiempo adimensional teórico θ^* , que es posible comparar con el otro, experimental, y

que está dado por la expresión:

$$\theta^* = f(x, \gamma) + \ln \left[1 + \frac{2(\gamma+1)}{x} \right] - \ln \delta \quad (4)$$

donde:

$$f(x, \gamma) = (\gamma+1) \int_{0+\epsilon}^{\infty} \frac{2(e^x - x - 1) - x^2}{x(e^x - 1 + \gamma x) [2(\gamma+1) + x]} dx \quad (5)$$

con $\epsilon > 0$
 $\epsilon \rightarrow 0$

y la variable auxiliar x satisface la ecuación trascendente:

$$\frac{e^x - 1}{x} = \frac{1}{1+c} \{ (1+c+\gamma)\rho - \gamma \} \quad (6)$$

En esta última expresión aparece un nuevo parámetro que según la teoría está definido por el cociente de resistividades específicas de los defectos puntuales en juego:

$$c = \rho_v / \rho_l$$

El parámetro c conviene tomarlo inicialmente constante e igual a la unidad, y recién cuando se haya logrado una primera optimización de los demás parámetros R_∞ , τ , γ y ΔR_0 , dar la posibilidad de relajar a c y optimizar los cinco parámetros juntos, tomando los valores obtenidos primeramente para aquéllos como valores iniciales de esta optimización general. Esto se debe a que como el número total de parámetros es relativamente grande, el algoritmo numérico de optimización a usar puede resultar inestable y conducir a valores de c carentes de sentido físico. Se ha comprobado que, fijando primeramente el valor de c , este peligro se reduce apreciablemente.

Se ve en la expresión (4) que la constante $\ln \delta$ representa, como se dijo antes, un corrimiento en el tiempo y no afecta la forma de la curva isotérmica. La relación con las condiciones iniciales está dada por:

$$\delta = \left\{ 1 + \frac{2(\gamma+1)}{x_0} \right\} e^{f(x_0, \gamma)} \quad (7)$$

donde x_0 es el valor que toma en $t = 0$ la variable auxiliar x cuyo significado físico resulta de su definición dada por la relación:

$$x = \ln(V/V_\infty)$$

en la cual V es la concentración de defectos tipo vacancia a un dado tiempo, y V_∞ es el valor asintótico a tiempo infinito.

Con las fórmulas (2) a (6) que nos proporciona la teoría, vemos que es posible calcular para cada punto experimental i -ésimo, los correspondientes valores de $\rho_i, \theta_i, x_i, f(x_i, \gamma)$ y así llegar finalmente al θ_i^* para poder hacer la optimización de los parámetros imponiendo la condición:

$$\sum_{i=k}^N (\theta_i - \theta_i^*)^2 = \text{mínimo} \quad (8)$$

donde k es un entero tal que $1 < k < (N-6)$.

La elección de k permite excluir si se desea los primeros $(k-1)$ puntos.

Para la evaluación de los θ_i^* vemos que efectivamente no es necesario tomar como parámetro tentativo a optimizar el valor de $\ln \delta$, sino que imponiendo la condición de que las curvas teórica y experimental empalmen bien asintóticamente (por ej. que sea $\theta_N = \theta_N^*$, donde N corresponde al mayor tiempo medido) aquel valor queda automáticamente determinado.

C. ALGORITMO COMPUTACIONAL DE OPTIMIZACIÓN

Se ha realizado un programa de computación para la determinación numérica aproximada de los cinco parámetros $R_\infty, \tau, \Delta R_0, \gamma$ y c del modelo bosquejado en B., para los cuales se verifica la condición de minimización (8). Para tal finalidad este programa emplea una subrutina preelaborada que por el método de optimización de Huang resuelve dicho problema de minimización.

A continuación se reseña sintéticamente la secuencia de operaciones que componen el algoritmo computacional elaborado:

a) Lectura de los datos R_i y t_i medidos de los N puntos experimentales, ordenados de manera que sea $t_{i+1} > t_i$, y de un

número entero k cuyo significado está indicado en (8).

b) Lectura de los valores tentativos de partida para los parámetros R_∞ , τ , ΔR_0 y γ . Se fija $c = 1$ desde este paso hasta el i).

c) Para $i = k, k + 1, \dots, N$ se repiten los pasos c.1) a c.4):

c.1) Se calculan θ_i según (3); ΔR_i^* según (1), ρ_i según (2), y finalmente $\Delta R_i = R_i - R_\infty$

c.2) Con los parámetros leídos en b), o bien obtenidos en h), y con ρ_i calculado en c.1), se resuelve la ecuación trascendente (6) obteniéndose x_i .

c.3) Con el valor x_i de c.2), y el de γ obtenido hasta el momento, se calcula $f(x_i, \gamma)$ según (5) realizándose numéricamente la integración, para lo cual se toma como límite inferior de la integral un número muy pequeño ($\sim 10^{-6}$).

c.4) Con los resultados de c.2) y c.3) se calcula:

$$T_i(x_i, \gamma) = f(x_i, \gamma) + \ln \left[1 + \frac{2(\gamma+1)}{x_i} \right]$$

(Si para los valores de x_i y γ el argumento del logaritmo diese negativo, se cambia el signo de éste).

d) Se calcula:

$$D = T_N - \theta_N$$

f) Para $i = k, k+1, \dots, N$, se obtienen respectivamente:

$$\theta_i^* = T_i - D$$

g) Se calcula la función cuadrado mínimo dada por:

$$FCM = \sum_{i=k}^N (\theta_i - \theta_i^*)^2 \quad (9)$$

h) Se introduce este último valor, junto con los de los parámetros R_∞ , τ , ΔR_0 y γ (y c , según el caso) obtenidos hasta el momento, en la mencionada subrutina que empleando el método de optimización de Huang, devuelve nuevos valores de los pará-

metros mencionados. Si los iniciales estaban dentro de los respectivos radios de convergencia del algoritmo, los nuevos valores serán una mejor aproximación de los valores óptimos buscados que minimizan a (9).

i) Con los nuevos valores de R_∞ , τ , ΔR_0 y $\gamma(y_c)$ se vuelve al punto c) y el proceso se repite iterativamente hasta que, de acuerdo con el valor que haya alcanzado la función FCM y/o la velocidad de convergencia de las últimas iteraciones, se lo interrumpa mediante una instrucción por la consola de la máquina.

j) Se calcula la dispersión media cuadrática relativa entre los valores experimentales θ_i y los θ_i^* predichos por la teoría:

$$\Sigma = \left\{ \frac{1}{N-k+1} \sum_{i=k}^N \left[\frac{(\theta_i - \theta_i^*)}{1/2(\theta_i + \theta_i^*)} \right]^2 \right\}^{1/2}$$

k) Se calcula el parámetro $\delta = \exp(D)$.

l) Se deja ahora libre el parámetro c , y se lo optimiza junto con los otros cuatro restantes, tomando como valores iniciales de estos últimos a los obtenidos hasta ahora. Para ello se repite todo el ciclo desde c) a k).

m) Se imprimen y grafican todos los resultados obtenidos.

El programa fué implementado para una computadora IBM/360, Mod.44, del Centro de Cómputos del Centro Atómico Bariloche.

D. ALGUNOS CASOS RESUELTOS. COMENTARIOS

El algoritmo descripto fué aplicado al ajuste de curvas de recuperación isotérmica de la resistividad eléctrica correspondientes a la etapa III en tantalio después de deformación plástica a baja temperatura [10].

En las figuras N°s. 3,4 y 5 se pueden observar algunos de los resultados obtenidos, en los que se muestran los puntos experimentales superpuestos a las curvas teóricas.

El número de iteraciones requerido en estos ajustes estuvo en el orden de 50 y el criterio seguido para suspender el proceso consistió en considerar el momento en el cual al continuar iterando la dispersión de los puntos mejoraba en forma insignificante (por ejemplo menos de un uno por ciento).

En la figura N°6 se muestra una salida de programa que efectúa las últimas veinte iteraciones correspondientes al ajuste de la isoterma de la figura N°4.

Se comprobó que en algunos casos puede ocurrir que, según sea el valor del R_{∞} tentativo inicial, el ajuste converja hacia valores distintos de los parámetros. Esto indicaría que la función cuadrados mínimos presenta mínimos relativos próximos y que, según sean los valores iniciales, el proceso de ajuste se encauza hacia uno u otro mínimo. En estos casos hay que elegir la solución teniendo en cuenta otros elementos, por ejemplo, el sentido físico de los parámetros optimizados o la comparación con otras isotermas.

También en algunos casos se observó que si se continúa iterando indefinidamente, aunque la dispersión entre los puntos experimentales y teóricos disminuye en forma despreciable, puede ocurrir que los parámetros optimizados varíen dentro de un cierto entorno.

Un efecto tal presumiblemente pueda ocurrir cuando se tienen pocos puntos a ajustar (baja estadística) o mucho error experimental (alta dispersión standard).

En estos casos el conjunto de parámetros optimizados hay que elegirlos entre aquellos valores posibles que tienen más sentido desde el punto de vista físico.

Entre los ejemplos que se ilustran se puede observar que el error promedio entre los tiempos experimentales y teóricos (que mide la dispersión de los ajustes oscila entre el 3% y el 11% en la zona de ajuste. Esta zona, en el caso de la figura N°3 abarca todos los puntos, mientras que en los demás casos se excluyen los primeros cuatro puntos, ya que si se

tienen en cuenta empeoran el ajuste. Esto significa que a tiempos cortos la cinética no responde al modelo y se comprobó que efectivamente sigue otra ley, del tipo $(R - R_{\infty})^{-1}$ proporcional a $t^{1/2}$.

E. CONCLUSIONES

Se concluye que el algoritmo descrito satisface los requerimientos enunciados al comienzo del trabajo, pues proporciona una herramienta que permite controlar rápidamente el ajuste de curvas isotérmicas de acuerdo al modelo teórico considerado.

Dicho modelo describe la recuperación del incremento de la resistividad eléctrica debido a un exceso en la concentración de defectos puntuales, en términos de la migración libre de los de una especie (por ej. los intersticiales) y teniendo lugar la recombinación con los defectos contraparte (vacancias) simultáneamente al encuentro de los defectos móviles con sumideros no saturables (por ej. dislocaciones).

F. AGRADECIMIENTOS

Deseamos expresar nuestro agradecimiento al Dr. Alfred Seeger porque su valiosa colaboración y fructíferas discusiones dieron origen al presente trabajo; a las autoridades del CAB y al Dr. Manuel Angel Mondino que lo permitieron llevar a cabo y finalmente a todos los profesionales y técnicos que en forma directa o indirecta tuvieron que ver con él, especialmente la gente del Centro de Cómputos por su inagotable paciencia y constante espíritu de colaboración.

REFERENCIAS

- 1) A.C. Damask and G.J. Dienes, Point Defects in Metals. Gordon and Breach, New York, 1963.
- 2) Y. Queré, Defauts Ponctuels Dans les Metaux, Collection de Monographies de Physique 5, Masson & Cie., Paris, 1967.
- 3) Por ejemplo artículos de J. Nihoul y también de W. Schilling en Vacancies and Interstitials in Metals, A. Seeger, D. Schumacher, W. Schilling and J. Diehl eds., North-Holland, Amsterdam, 1969.
- 4) R.W. Balluffi and D.N. Seidman, Phil.Mag. 17 (1968), 843.
- 5) L.J. Cuddy, Acta Met. 16 (1968), 23.
- 6) L. Stals and J. Nihoul, Physica. 42 (1969), 165.
- 7) T.R. Waite, Phys.Rév., 107 (1957), 463.
- 8) J. Polák, Crystal Lattice Defects 5 (1974), 155.
- 9) T. Oi and K. Sato, Trans. Japan Inst.Metals 7 (1966) 32.
- 10) H.A. Peretti, tesis, Buenos Aires, 1978.
- 11) M. Balanzat y H.A. Peretti, resultados no publicados.
- 12) H.A. Peretti, M.A. Mondino y A. Seeger, a publicarse.

GRAFICO TIPICO DE RECUPERACION ISOTERMICA

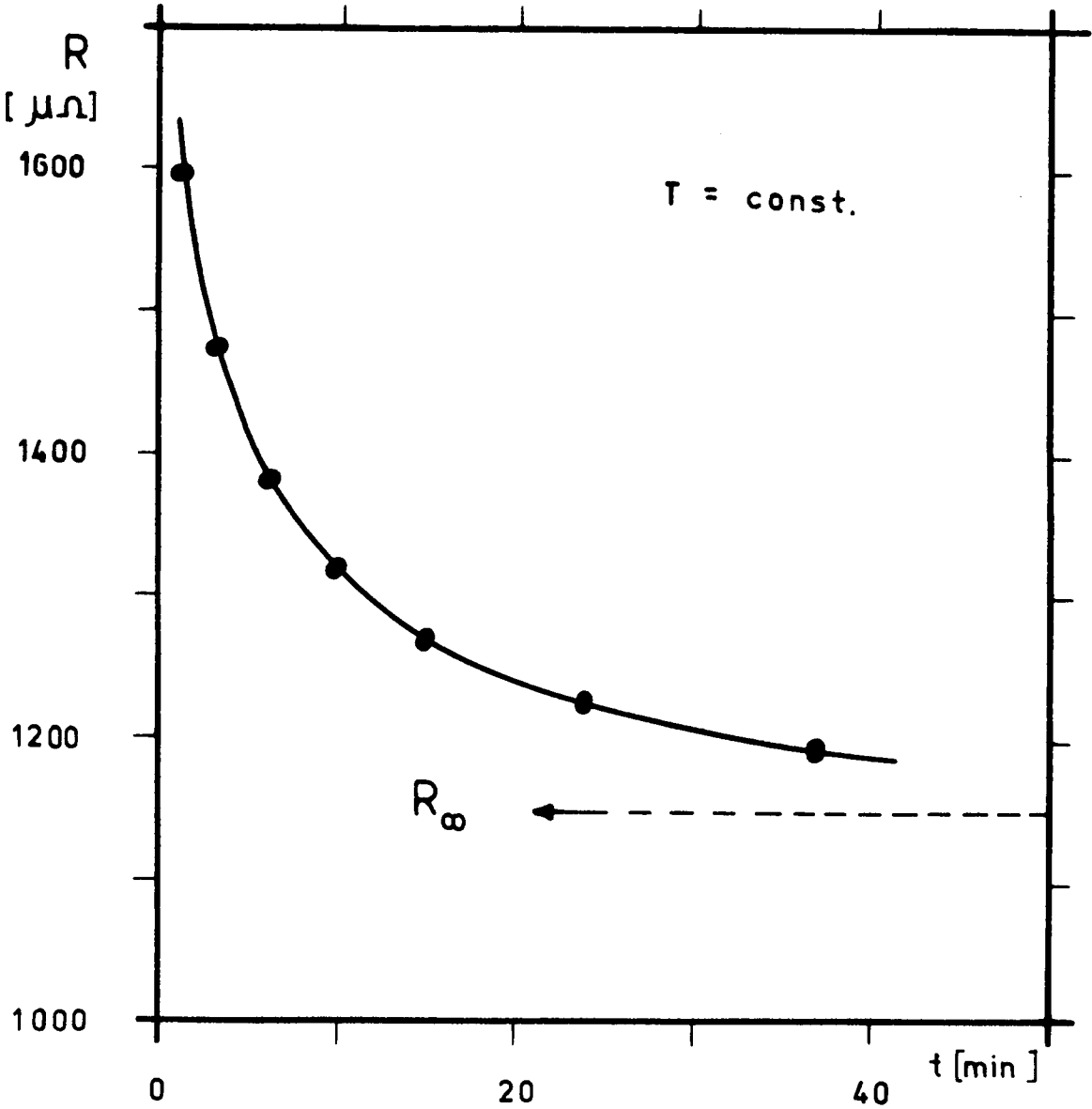


Fig. 1

RECUPERACION ISOTERMICA

GRAFICO SEMILOGARITMICO

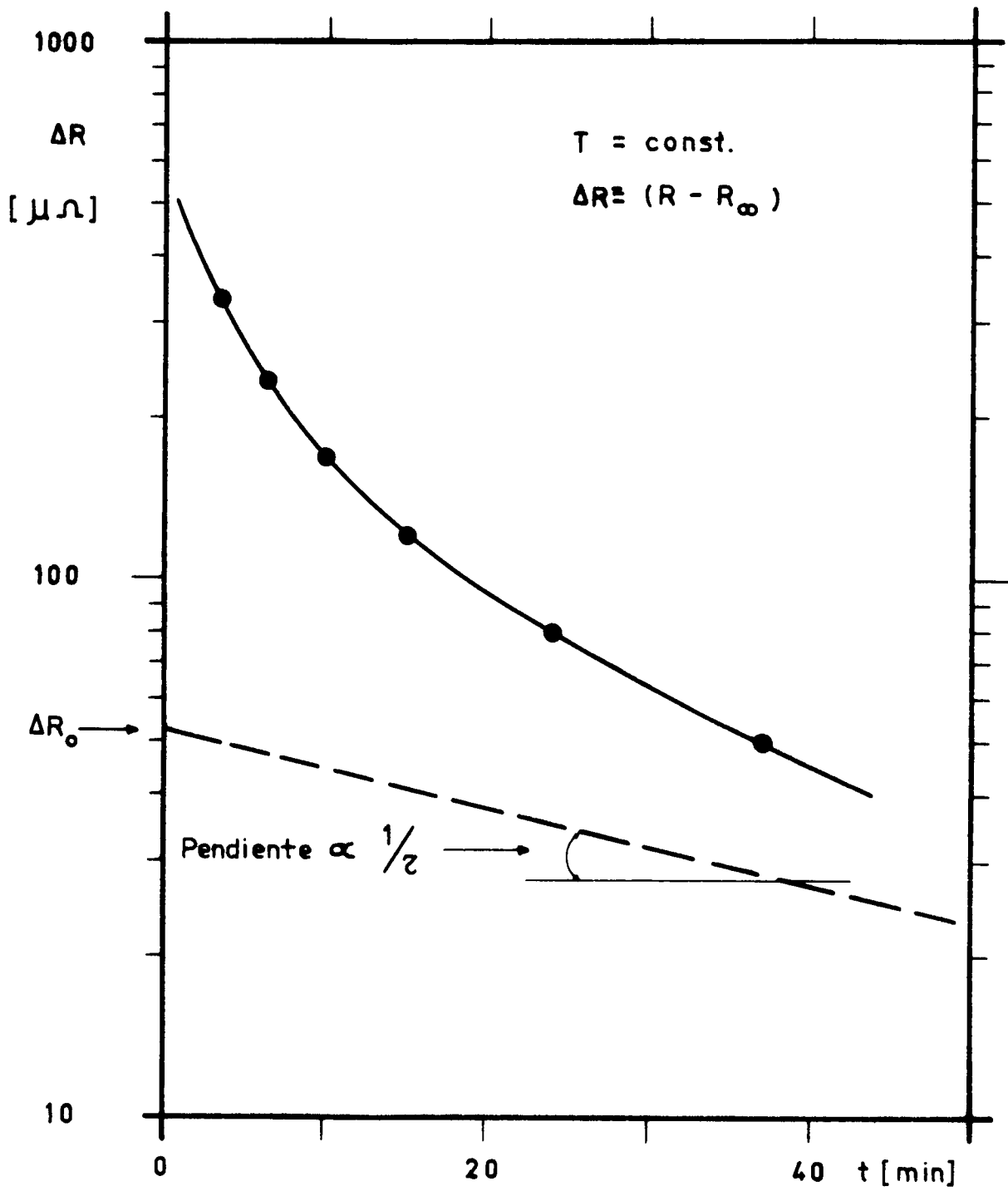


Fig. 2

RECUPERACION ISOTERMICA DE ALAMBRE DE TANTALIO LAMINADO A 4°K

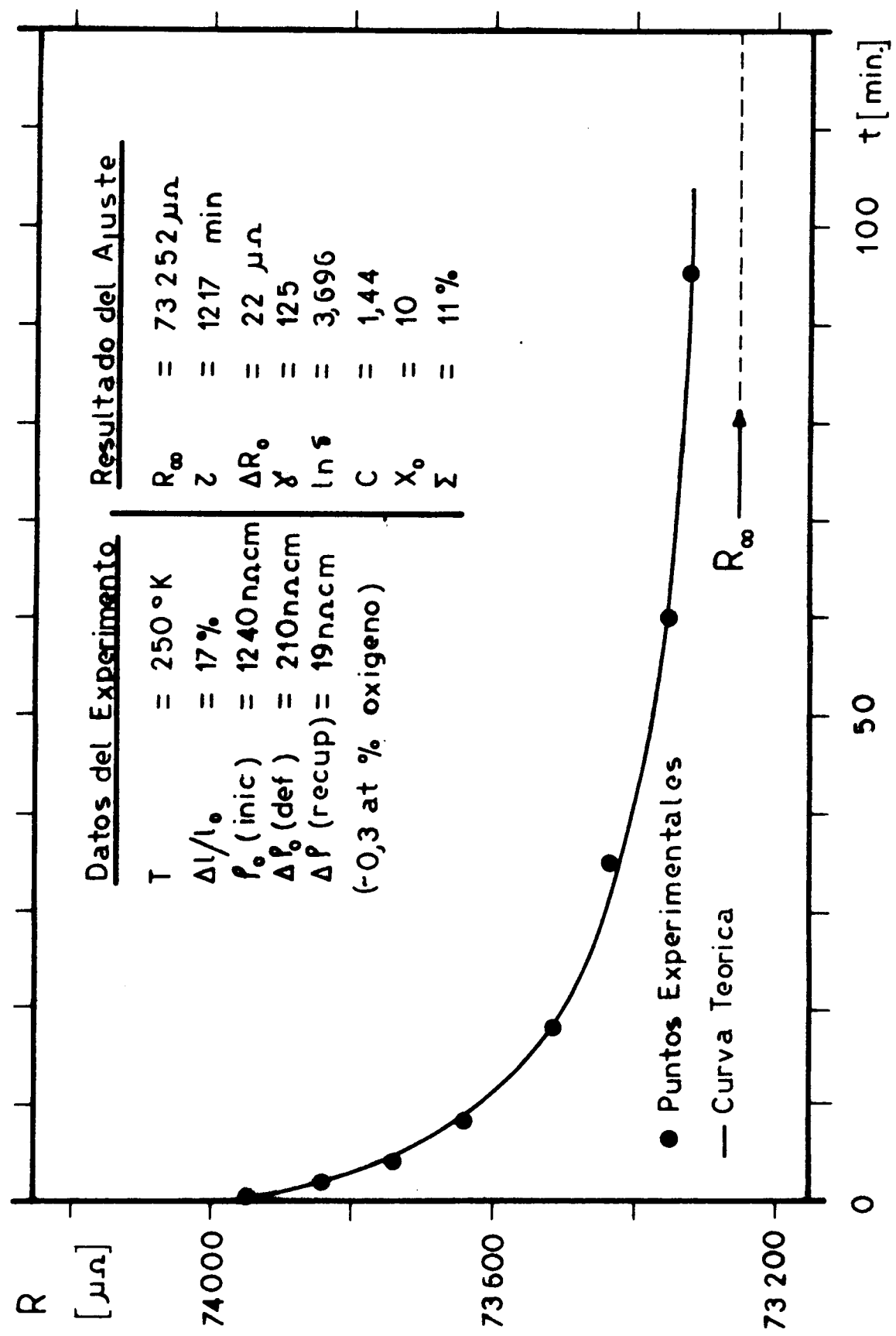


Fig. 3

RECUPERACION ISOTERMICA DE ALAMBRE DE TANTALIO LAMINADO A 4 °K

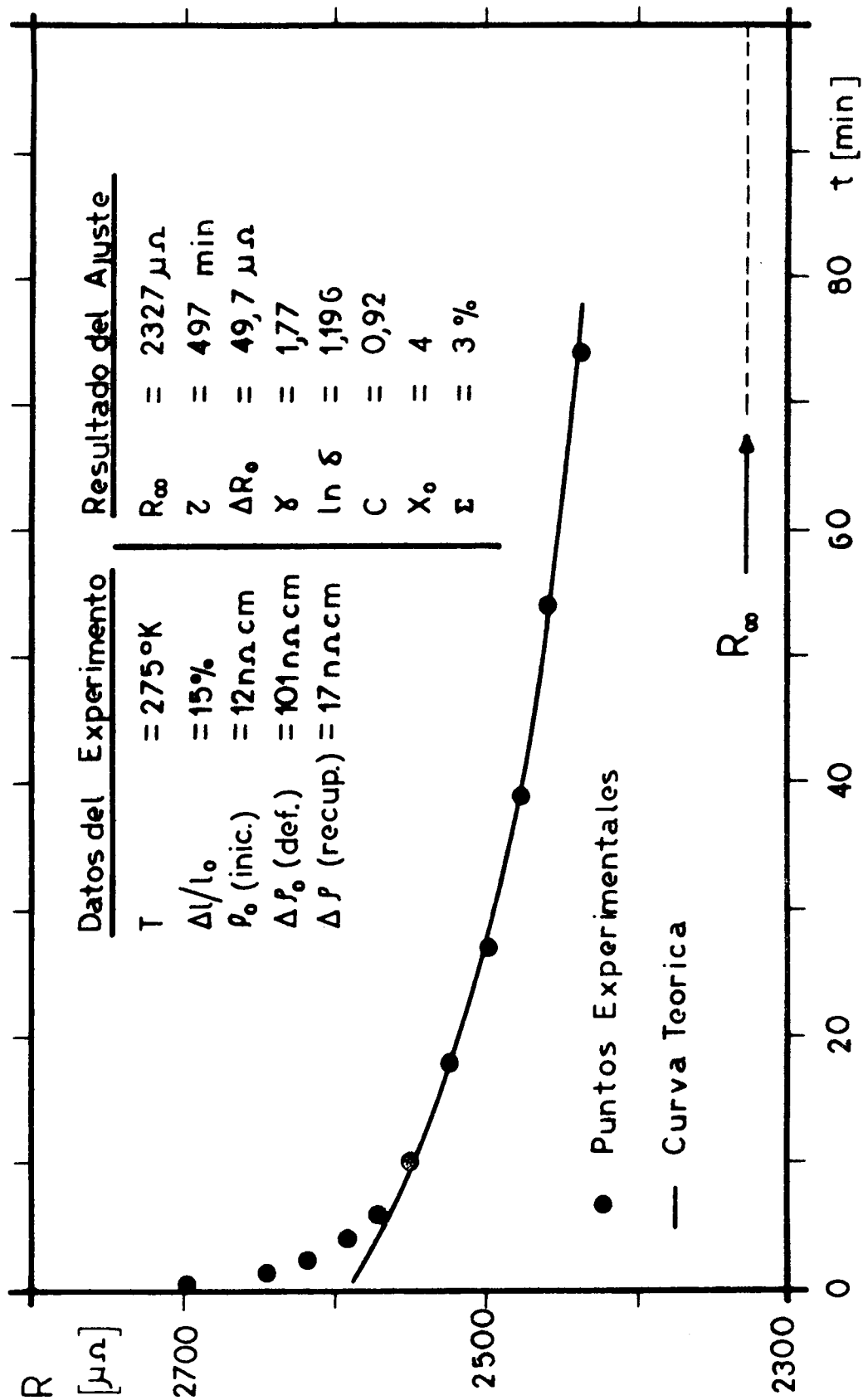


Fig. 4

RECUPERACION ISOTERMICA DE ALAMBRE DE TANTALIO LAMINADO A 4°K

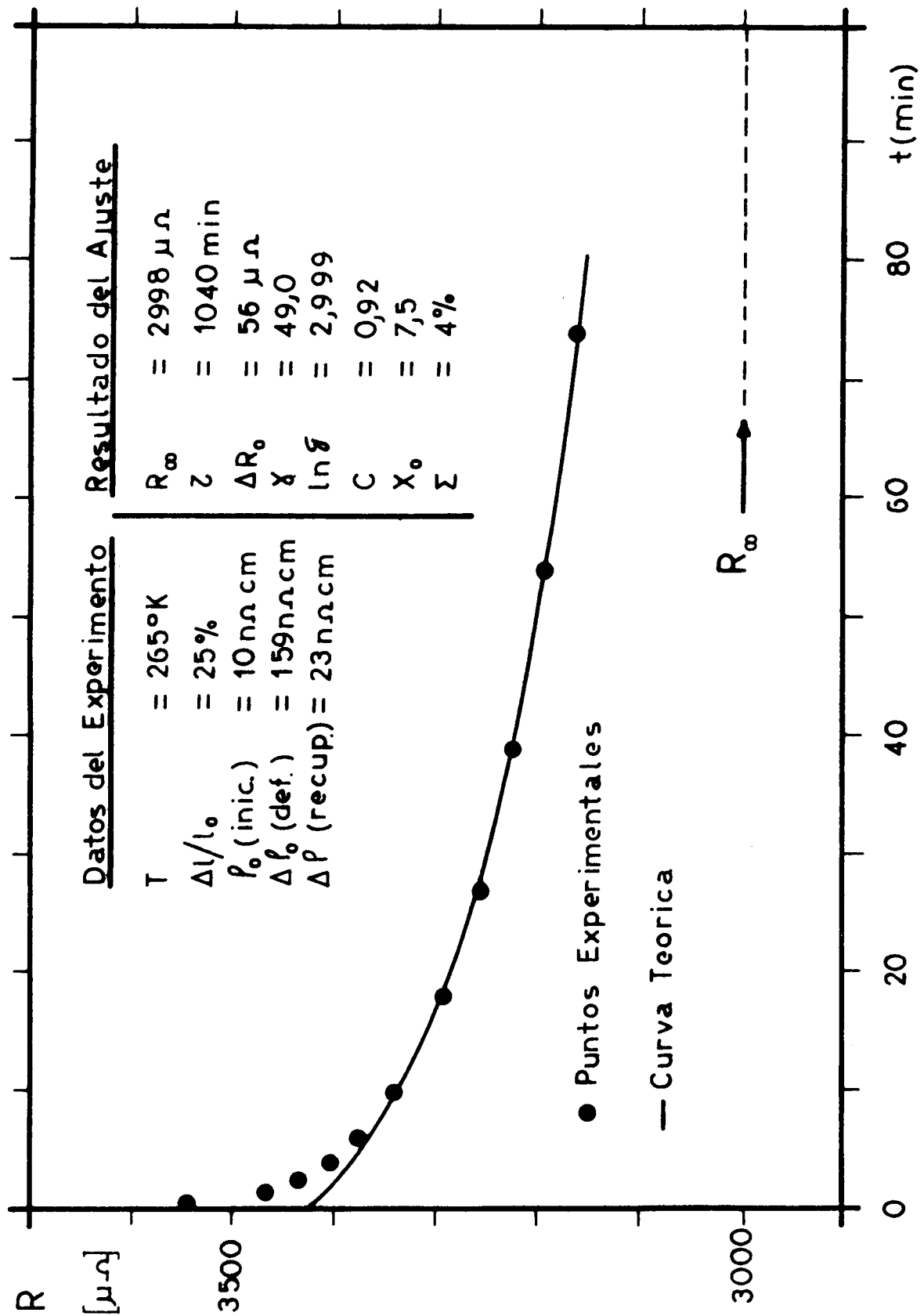


Fig.5

```

-LINKAGE EDITOR HIGHEST SEVERITY WAS 0
// RESET
// EXEC
C INTERMA T=275 K - DEFORMACION 15 POR CIENTO -
E SE EXCLUYEN LOS (K-1) PRIMEROS PUNTOS
I VALORES INICIALES

```

```

0 ARGUMENTO 1 = 0.4948844454976049D 03
0 ARGUMENTO 2 = 0.1708617992000000D 01
0 ARGUMENTO 3 = 0.4176729129321840D 01
0 ARGUMENTO 4 = 0.2329003553476224D 04
0 XM = 0.5000000000000000D 00 YM = 0.2697000000000000D C4
0 XM = 0.1500000000000000D 01 YM = 0.1644000000000000D C4
0 XM = 0.2500000000000000D 01 YM = 0.2618000000000000D C4
0 XM = 0.4000000000000000D 01 YM = 0.2542000000000000D C4
0 XM = 0.6000000000000000D 01 YM = 0.2570000000000000D C4
0 XM = 0.1000000000000000D 02 YM = 0.2548000000000000D C4
0 XM = 0.1800000000000000D 02 YM = 0.2521000000000000D C4
0 XM = 0.2700000000000000D 02 YM = 0.2497000000000000D C4
0 XM = 0.3900000000000000D 02 YM = 0.2476000000000000D C4
0 XM = 0.5400000000000000D 02 YM = 0.2458000000000000D C4
0 XM = 0.7400000000000000D 02 YM = 0.2437000000000000D C4
I

```

MINIMIZACION CON DHUANG

```

VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.187611D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.187611D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.187611D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.187611D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.186695D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.185121D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.184104D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183908D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183614D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183567D-04

```

```

VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO=0.184D-04
DESVIACION STANDARD =0.428D-02
CANTIDAD DE ITERACIONES =10
ARGUMENTO 1 = 0.4958726134454696D 03 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 2 = 0.1711655071350010D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 3 = 0.2985738869383627D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 4 = 0.2326312824293872D 04 DELTA= 0.0

```

```

GRADIENTE= -0.939324C-7
GRADIENTE= -0.349241C-05
GRADIENTE= 0.191320C-06
GRADIENTE= -0.119611C-06

```

SE REQUIEREN MAS ITERACIONES

```

VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183567D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183567D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183567D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.183565D-04
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.4664D-01 IER = 2 I= 1
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.3919D-01 IER = 2 I= 2
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.3557D-01 IER = 2 I= 3
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.3197D-01 IER = 2 I= 4
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.2896D-01 IER = 2 I= 5
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.2604D-01 IER = 2 I= 6
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.2256D-01 IER = 2 I= 7
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.1946D-01 IER = 2 I= 8
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.1682D-01 IER = 2 I= 9
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.1463D-01 IER = 2 I= 10
0 ES MENOR QUE CERO, PROBAR DRO Y TAU MAS PEQUEÑOS-
X(1) = -0.1000D-02 F = -0.1196D-01 IER = 2 I= 11
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.182109D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.181644D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.181501D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.181179D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.180937D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.180864D-04
VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO= 0.180847D-04

```

```

VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO=0.181D-04
DESVIACION STANDARD =0.425D-02
CANTIDAD DE ITERACIONES =10
ARGUMENTO 1 = 0.4966045577472164D 03 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 2 = 0.1695201347098609D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 3 = 0.1716978868163729D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 4 = 0.2327120289892818D 04 DELTA= 0.0

```

```

GRADIENTE= -0.136746C-06
GRADIENTE= -0.754716C-04
GRADIENTE= -0.726704C-06
GRADIENTE= -0.314635C-06

```

SE REQUIEREN MAS ITERACIONES

RESULTADOS FINALES

```

VALOR DE LA FUNCION CUADRADO MINIMO=0.181D-04
DESVIACION STANDARD =0.425D-02
CANTIDAD DE ITERACIONES =10
ARGUMENTO 1 = 0.4966045577472164D 03 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 2 = 0.1695201347098609D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 3 = 0.1716978868163729D 01 DELTA= 0.0
ARGUMENTO 4 = 0.2327120289892818D 04 DELTA= 0.0
IGRAFICO NUMERO= 1

```

```

GRADIENTE= -0.136746C-06
GRADIENTE= -0.754716C-04
GRADIENTE= -0.726704C-06
GRADIENTE= -0.314635C-06

```

Fig. 6a

