

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 3	1973

01.73.01

TE.28/120

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

GERENCIA DE TECNOLOGIA

METODO DE REGRESION LINEAL APLICADO A
PROBLEMAS DE DIFUSION

E.SANTOS, E.MARENGO, F.DYMENT

BUENOS AIRES
1973

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

GERENCIA DE TECNOLOGIA

METODO DE REGRESION LINEAL APLICADO A
PROBLEMAS DE DIFUSION

E.SANTOS, E.MARENGO, F.DYMENT

BUENOS AIRES
1973

INTRODUCCION

Habitualmente, se presenta la necesidad de ajustar un conjunto de pares de valores experimentales (x_i, y_i) mediante una cierta relación funcional en la que figuran las constantes que se desea determinar.

El caso más conocido es el de una relación lineal entre X e Y llamada recta de regresión o recta de cuadrados mínimos. En casos más complejos, cuando la relación que liga las variables experimentales no es lineal, se intenta llevarla a una forma lineal mediante una transformación de variables adecuada, determinando así nuevas constantes y, a partir de éstas, las originales.

Aún en los casos más sencillos de cuadrados mínimos suelen presentarse varias dificultades. La primera de ellas, que es la más ampliamente tratada en la literatura, es que no todos los pares de valores (x_i, y_i) están afectados de errores similares, por lo tanto se hace necesario otorgar un "peso" estadístico a cada medición. Cuando se trata de experiencias que pueden repetirse, el procedimiento es relativamente sencillo: se estima la varianza de este conjunto de mediciones en la forma habitual y se otorga a cada punto un peso inversamente proporcional a ésta.

Una segunda dificultad consiste en que en muchas experiencias las medidas de los pares (x_i, y_i) sólo se pueden efectuar una vez para cada caso porque se trata de ensayos destructivos o de experiencias muy difíciles de repetir en igualdad de todas las condiciones. Por lo tanto, no se puede estimar la varianza de estas mediciones en forma estadística y para otorgarles un peso resulta necesario elegir un criterio que permita evaluarlo. En muchos casos este criterio queda librado a la experiencia del observador, su conocimiento del sistema en estudio, del instrumental y su "buen sentido". Criterios todos fuertemente subjetivos.

En este trabajo se detalla un posible criterio de evaluación de pesos, razonable en el sentido de que reduce la subjetividad de la estimación, aunque no se lo puede demostrar con rigor.

Se detalla su aplicación al caso de cálculo de rectas de regresión, cuando se cometen errores significativos en las dos variables, y se dan varios casos de aplicación a problemas de utilidad en estudios de difusión en metales, con sus correspondientes programas en FORTRAN IV.

En todos ellos se hace uso de dos subrutinas fácilmente adaptables a cualquier tipo de cálculo de regresión de funciones reducibles a lineales: CUAMI, subrutina que calcula los coeficientes de una recta de regresión y las varianzas de los parámetros y CURVA, subrutina que permite graficar mediante una impresora de línea la función ajustada por CUAMI y los datos experimentales.

La subrutina CUAMI, que calcula los parámetros de la recta de regresión, tiene en cuenta los errores en ambas variables experimentales. Resuelve el problema iterando sobre una ecuación "lineal". Emplea el método propuesto por J.H. Williamson(1), mucho más simple que la resolución de una ecuación "cúbica" propuesta por D. York (2), y más rápidamente convergente. Tiene además la ventaja sobre este último de que no es necesario efectuar una estimación inicial de la pendiente pues el valor de los parámetros que se obtiene en esta primera aproximación (donde se supone la pendiente nula) corresponde al caso en que los errores en la variable independiente son despreciables. La subrutina itera hasta que dos valores consecutivos de la pendiente difieren en menos de la tolerancia que se fije, que en el presente caso es del 1%. El número de iteraciones que efectúe la subrutina es un índice de cuán importantes son los errores en la variable X frente a los errores en la variable Y .

I. REGRESION LINEAL

I.1 Observaciones de pesos diferentes

En los casos en que cada observación está afectada de un error diferente hay que otorgarles un peso. El problema de cuadrados mínimos se limita a minimizar la expresión (3):

$$\sum (y_i - \bar{y})^2 / \sigma_i^2 \quad (I.1)$$

donde σ_i^2 es un estimador de la varianza de la medida i-ésima. La (I.1) puede reescribirse como:

$$\sum w_i v_i^2 = \sum w_i (y_i - \bar{y})^2 \quad (I.2)$$

donde

$$w_i = \sigma^2 / \sigma_i^2 \quad (I.3)$$

y σ^2 es una constante de proporcionalidad. Los w_i son los llamados "pesos estadísticos" de las observaciones. Los valores relativos de los w_i quedan determinados por los valores relativos de los σ_i^2 pero sus valores absolutos dependen de la constante de proporcionalidad y pueden ser ajustados variando σ^2 . De las definiciones anteriores se puede ver que σ es la desviación standard de una medición de peso unitario.

El valor estimado de $\bar{y}$ por cuadrados mínimos está dado por:

$$\sum w_i (y_i - \bar{y})^2 = 0 \quad \bar{y} = \bar{y} = \frac{\sum w_i y_i}{\sum w_i} \quad (I.4)$$

donde $\bar{y}$ es conocida como la "media pesada de y_i ".

La varianza de la media pesada es:

$$\text{var } \bar{y} = \sum \left(\frac{w_i}{\sum w_i} \right)^2 \sigma_i^2 \quad (I.5)$$

I.2 Cálculo de la curva de regresión experimental

En la práctica el número de observaciones disponibles (x_i, y_i) es usualmente pequeño. Un método para estimar la curva de regresión es aplicar el criterio de cuadrados

mínimos para determinar la mejor aproximación

$$y = \sum_{j=0}^p b_j x_j \quad (\text{I. 6})$$

de la curva de regresión real $Y(x)$ (3, 4).

Con el criterio de cuadrados mínimos los valores de las constantes b_j se determinan de manera de minimizar la expresión

$$\sum_i v_i^2 = \sum_i (y_i - \sum_j b_j x_j)^2 \quad (\text{I. 7})$$

En el caso de que las mediciones tengan peso distinto, el criterio de cuadrados mínimos es minimizar la expresión

$$\sum_i (y_i - \sum_j b_j x_j)^2 / \sigma_i^2 = \sum_i w_i (y_i - \sum_j b_j x_j)^2 / \sigma^2 \quad (\text{I. 8})$$

con

$$w_i = \sigma^2 / \sigma_i^2$$

I. 3 Cambio de variables

Es frecuente que la relación que se desea ajustar no sea lineal. En estos casos se hace un cambio de variables adecuado de manera de llevar la relación a una función lineal y luego aplicar cuadrados mínimos.

Por ejemplo: una relación usada comúnmente es la que emplea logaritmos.

Sea:

$$Y = A \cdot H^B \cdot Z^C \quad (\text{I. 9})$$

donde Y, H y Z son determinadas experimentalmente y las constantes A, B y C son las que se quiere determinar. Tomando logaritmos en la (I. 9) resulta

$$\log Y = \log A + B \log H + C \log Z \quad (\text{I. 10})$$

6

$$Y' = \sum B_j X_j \quad (\text{I. 11})$$

donde

$$X_0 = 1; \quad X_1 = \log H; \quad X_2 = \log Z$$

$$Y' = \log Y$$

$$B_0 = \log A; \quad B_1 = B; \quad B_2 = C \quad (\text{I.12})$$

Las ecuaciones normales toman la forma usual:

$$\sum_j b_j \sum_i w'_i x_{ji} x_{ki} = \sum_i w'_i y'_i x_{ki} \quad (\text{I.13})$$

pero los pesos w'_i deben ser los pesos de las variables transformadas y'_i .

Si $\phi(y, z, \dots)$ es una función arbitraria de las variables independientes $y, z, \dots$, entonces vale

$$\frac{\text{var } \phi}{\phi^2} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \text{var } y + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \text{var } z + \dots \quad (\text{I.14})$$

Aplicando la (I.14) a la (I.13), para calcular los pesos de las variables transformadas, resulta

$$w'_i \propto (1/\text{var } y'_i) = 1 / \left[\left(\frac{\partial y'_i}{\partial y_i} \right)^2 \text{var } y_i \right] \quad (\text{I.15})$$

Donde y_i son los valores verdaderos en la relación funcional dada y deben ser reemplazados en la práctica por los valores medidos y'_i .

$$w'_i \propto w_i / \left(\frac{\partial y'_i}{\partial y_i} \right)^2 \quad (\text{I.16})$$

Por ejemplo, para la transformación logarítmica resulta:

$$w'_i = w_i y_i^2 \quad (\text{I.17})$$

En la práctica los valores y_i son desconocidos y se deben usar los valores observados y'_i . Así resulta para la transformación logarítmica:

$$w'_i = w_i y_i'^2 \quad (\text{I.18})$$

Se ve que incluso en el caso en que las variables observadas tengan igual peso, sus transformadas logarítmicas tienen pesos distintos.

I.4 Las dos variables están sujetas a error

Si las variables X e Y están relacionadas mediante la función

$$F(X, Y, B_k) = 0 \quad (\text{I.19})$$

donde las B_k son constantes a determinar, resulta (3) que la condición de cuadrados mínimos es:

$$\sum \omega_{y_i} (y_i - \bar{y})^2 + \sum \omega_{x_i} (x_i - \bar{x})^2 = \sum \omega_i (y'_i - \sum b'_k x'_{ki}) \quad (I. 20)$$

donde

$$y'_i = F(y_i, x_i, b^0_k) \quad (I. 21)$$

y

$$x'_{ki} = -\left(\frac{\partial F}{\partial b_k}\right)_i \quad (I. 22)$$

x_i, y_i son las mediciones experimentales correspondientes a la i -ésima experiencia. El peso ω_i se estima a partir de los pesos de las variables experimentales ω_{x_i} e ω_{y_i} mediante la expresión:

$$\frac{1}{\omega_i} = \frac{1}{\omega_{y_i}} \left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)_i^2 + \frac{1}{\omega_{x_i}} \left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_i^2 \quad (I. 23)$$

I. 5 Estimación de los pesos de las variables experimentales cuando no se pueden repetir las experiencias en igualdad de condiciones

Tal como se ha señalado, éste es el caso de ensayos destructivos, en los cuales cada medición de un sistema está afectada de errores que no se pueden estimar en forma estadística.

En estos casos, la experiencia personal del investigador, su conocimiento del sistema en estudio, del instrumental empleado y, fundamentalmente, su juicio personal determinan los criterios de estimación de pesos.

Para eliminar, dentro de lo posible, la subjetividad de estas apreciaciones se ha introducido una hipótesis que se considera razonable aunque no rigurosa desde el punto de vista matemático.

En los casos en que sí se puede calcular la varianza de una medición, el error absoluto o desviación standard del conjunto de mediciones es igual a la raíz cuadrada de ella. Por analogía, si de alguna manera se puede estimar un error absoluto en la medición experimental (error de apreciación del instrumental, propagación de errores, por ejemplo) se adopta como criterio que el cuadrado de éste es una estimación razonable de la varianza de la medición y, por lo tanto, su inversa es el "peso".

Como no es correcto hablar de varianzas en estos casos, es preferible

enunciar este criterio diciendo que: se toma como peso del valor experimental la inversa del cuadrado del error absoluto. El método es riguroso en los casos de tener muestras suficientemente grandes como para calcular estimadores de la varianza.

Se dará un ejemplo de aplicación de lo expuesto hasta aquí utilizando la resolución de la ecuación de Fick para la difusión unidireccional en volumen en un par de difusión de geometría semi-infinita (ver II.1). La solución correspondiente de la ecuación de difusión es:

$$c(x,t) = \frac{c_0}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (\text{I. 24})$$

donde $c(x,t)$ es la concentración del elemento difundido al tiempo t y a la distancia x de la interfase inicial; c_0 es la concentración total de dicho elemento y D el coeficiente de difusión que se quiere determinar. Los pares de valores (c_i, x_i) y t se determinan experimentalmente (II.1). D se calcula a partir de la pendiente de la recta, obtenida por cuadrados mínimos,

$$y_i = A + B x_i$$

donde

$$\begin{aligned} y_i &= \ln c(x_i, t); & A &= \ln \frac{c_0}{\sqrt{\pi Dt}} \\ x_i &= x_i^2; & B &= -\frac{1}{4Dt} \end{aligned} \quad (\text{I. 25})$$

Las fuentes de error son las siguientes:

- en la medición de t , totalmente despreciable, salvo que se trate de recocidos muy breves.
- en la medición del espesor, la apreciación del micrómetro que se emplee, Δx .
- en la determinación de la concentración -puesto que ésta es proporcional a la actividad específica del radiotrazador usado- los errores provenientes de la medición de la actividad del trazador (si N es el número de cuentas acumulado, su error es $\sqrt{N}$) y de la pesada del material, Δp .

Dado que la actividad específica es:

$$c_i = N/p \quad (\text{I. 26})$$

su error absoluto en función de los anteriores es, propagando errores,

$$\Delta c_i = \frac{\sqrt{N}}{p} + \frac{N \Delta p}{p^2} \quad (\text{I. 27})$$

Los pesos serán, de acuerdo al criterio formulado:

$$\omega_{c_i} \propto \frac{1}{(\Delta c_i)^2} \quad \omega_{x_i} \propto \frac{1}{(\Delta x_i)^2} \quad (\text{I. 28})$$

y los pesos de las variables transformadas:

$$\omega'_{y_i} = \omega_{c_i} \cdot c_i^2 \quad \omega'_{x_i} = \omega_{x_i} \frac{1}{(2x_i)^2} \quad (\text{I. 29})$$

y el valor de ω_i para aplicar la (I. 20) se calcula haciendo uso de la (I. 23) resultando:

$$\frac{1}{\omega_i} = \frac{1}{\omega_{c_i}} + \frac{1}{c_i^2} + \frac{1}{\omega_{x_i}} (2x_i)^2 \quad (\text{I. 30})$$

II. APLICACIONES A PROBLEMAS DE DIFUSION

A continuación se darán como ejemplos de aplicación de lo desarrollado en la sección anterior, una serie de problemas de cálculo de coeficientes de difusión. Las condiciones de contorno varían según los casos y los métodos experimentales empleados son algunos de los descritos en (5).

II.1 Cálculo de coeficientes de difusión en volumen

La ecuación que se debe resolver es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\text{II. 1})$$

con la condición inicial

$$c(x, 0) = c_0 \delta(x) \quad (\text{II. 2})$$

donde δ es la "delta" de Dirac.

Y la condición de contorno:

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad \text{en } x = 0 ; \quad \lim_{x \rightarrow \infty} c = 0 \quad (\text{II. 3})$$

Desde el punto de vista experimental el problema está representado por una capa delgada del isótopo radioactivo del elemento a difundir depositado sobre una probeta de espesor muy grande comparado con la profundidad de penetración que se va a obtener (geometría semi-infinita).

La solución es de la forma

$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4 D t}\right) \quad (\text{II. 4})$$

II.1.1 Método de seccionamiento directo

Este método experimental consiste en seccionar capas muy delgadas de la probeta (el espesor de la capa dependerá de la técnica usada: algunas decenas de micrones si se emplea un torno; algunos micrones si se usa un micrótopo) y medir la concentración relativa del elemento difundido mediante algún análisis de trazas. Generalmente se usan radioisótopos y la actividad específica de cada capa resulta proporcional a la concentración del trazador.

El análisis de errores, correspondiente a este caso, está descrito en I.5. El programa de computadora que lo resuelve es DIREC ().

II.1.2 Método de Gruzin

Este método difiere del anterior en el hecho de que el perfil de concentración se obtiene midiendo la actividad residual de la probeta después de cada seccionamiento. La solución correspondiente de la ecuación (II.1), es (5).

$$\mu I - \frac{\partial I}{\partial x} = k \frac{c_0}{\sqrt{\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (\text{II.5})$$

donde μ es el coeficiente de absorción de la radiación emitida por el trazador e I su actividad.

Esta solución presenta dos extremos de interés:

a) La irradiación se absorbe fuertemente en la probeta

$$\mu I \gg \frac{\partial I}{\partial x} \longrightarrow \ln I = \text{cte} - \frac{x^2}{4Dt} \quad (\text{II.6})$$

En este caso el programa de cálculo es similar al de Seccionamiento Directo, sólo cambia la forma de determinación de la x^2 (se determina por diferencia de pesos de la probeta).

b) La radiación se absorbe débilmente en la probeta

$$\frac{\partial I}{\partial x} \gg \mu I \longrightarrow \ln\left(-\frac{\partial I}{\partial x}\right) = \text{cte} - \frac{x^2}{4Dt} \quad (\text{II.7})$$

Integrando esta expresión resulta:

$$\frac{I}{2I_0} = \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \right] \quad (\text{II.8})$$

Donde I_0 es la actividad inicial. Este extremo está resuelto en el programa **RESIDUAL** **ACTIVIDAD**

La recta ajustada por cuadrados mínimos es:

$$y_i = A + B x_i$$

donde

$$y_i = \arg \text{ de } \left\{ \frac{1}{2} [1 - \operatorname{erf}(x)] \right\} = \frac{I}{2I_0}$$

$$x_i = X_i; \quad B = -\frac{1}{2\sqrt{Dt}}; \quad A = \operatorname{erf}^{-1} \left\{ \frac{1}{2} [1 - \operatorname{erf}(X)] \right\} = \frac{1}{2}$$

que, por definición, debe ser 0.

Si la ordenada al origen calculada por CUAMI difiere de 0 en más de 1%, el programa itera los cálculos cambiando el valor inicial de la actividad.

$$I_o (\text{nuevo}) = 2 \cdot I_o (\text{anterior}) \cdot \frac{1}{2} [1 - \operatorname{erf}(A)]$$

Puede ocurrir que por evaporación durante el recocido de difusión, p.ej., la actividad inicial de la probeta no sea la correcta.

El programa imprime los valores corregidos de actividad cuando ejecuta más de 1 iteración. Asimismo imprime el número de iteraciones efectuadas por CUAMI.

En un caso intermedio, cuando ambos términos del primer miembro en (II.5) son del mismo orden, hay que resolver dos problemas: a) conocer el coeficiente μ que no siempre se encuentra en tablas; b) se debe calcular la pendiente de la curva experimental $I = f(x)$ ya sea en forma gráfica o ajustando la curva experimental numéricamente y calculando la derivada de la misma manera. El paso siguiente es aplicar lo desarrollado en la sección I a la función lineal:

$$y_i = A + B x_i$$

con el cambio de variables:

$$y_i = \ln \left(\mu I - \frac{\partial I}{\partial x} \right); \quad x_i = X_i^2 \quad (\text{II.9})$$

II.2 Cálculo de coeficientes de difusión en límite de grano

En el caso de muestras metálicas policristalinas la contribución a la difusión de un elemento depositado en la superficie de una probeta, por límite de grano puede ser comparable o superior a la contribución debida a difusión en volumen.

En el presente trabajo se aplican los métodos debidos a Fisher (6) y Suzuoka (7) para calcular el coeficiente de difusión en límite de grano, siendo necesario para ello conocer el correspondiente coeficiente de difusión en volumen.

II.2.1 Método de Fisher

La solución de la ecuación de Fick, si se suponen superpuestos un proceso de difusión en volumen y uno en borde de grano, es:

$$\bar{c}(x, t) = c_1 + c_2 = 4\left(\frac{D_v t}{\pi}\right)^{1/2} c_0 \exp\left[-\frac{(2D_v/D_f \delta)^{1/2}}{(\pi D t)^{1/4}} x\right] \quad (\text{II.10})$$

donde

$\bar{c}(x, t)$ es la concentración media del trazador a una distancia x de la superficie

c_2 representa la contribución por difusión en borde de grano

c_1 representa la contribución por difusión en volumen

c_0 es la concentración inicial en la superficie de la probeta y se supone que se mantiene constante durante todo el proceso de difusión.

D_v y D_f son respectivamente los coeficientes de difusión en volumen y en límite de grano

δ es el ancho del límite de grano que se supone es constante a través de toda la probeta y pequeño comparado con las medidas macroscópicas de la misma

A partir de una dada penetración la contribución por límite de grano se hace preponderante y se ve que es

$$\ln \bar{c} \sim \ln c_2$$

Del gráfico $\ln c(x, t)$ vs x que para valores de x grandes es lineal, se deduce el valor de $D_f \delta$. Conociendo el valor de δ se puede hallar el valor de D_f .

II.2.2 Método de Suzuoka

Si se aplica el método de Suzuoka, en la forma simplificada sugerida por él mismo (8), se halla que $\log_{10} \bar{c}(x, t)$ varía linealmente con $x^{6/5}$.

La pendiente de esta recta está dada por:

$$0.973 \log_{10} (\Delta - 1) = 6.567 - 1.644 \log_{10} \delta - \log_{10} \sqrt{D_v t} \quad (\text{II.11})$$

donde

$$\Delta = \frac{D_v}{D_j} ; \quad -\gamma = \frac{\partial \log_{10} C(x,t)}{\partial x^{6/5}} \quad (\text{II. 12})$$

En esta relación se supuso que el límite de grano tiene un ancho $\delta = 5 \times 10^{-8}$ cm. Los coeficientes D_j calculados por este método pueden ser dos o tres veces superiores a los calculados por el método de Fisher (5).

Los dos métodos se aplican en el programa LIMIT ().

II. 3 Cálculo de la energía de activación y del factor de frecuencia de un proceso de difusión

Siendo la difusión de un metal en otro un proceso térmicamente activado, los valores de los coeficientes de difusión están relacionados con la temperatura mediante la ley:

$$D = D_0 \exp(-Q/RT) \quad (\text{II. 13})$$

conocida como ley de Arrhenius; en ella Q es la energía de activación del proceso de difusión y D_0 es el factor de frecuencia que depende de: la estructura cristalina del metal, del mecanismo por el cual ocurre el proceso de difusión, del parámetro de red y de la frecuencia de vibración del átomo en la red.

Si en la ecuación (II.13) se toman logaritmos resulta:

$$\ln D = \ln D_0 - Q/RT \quad (\text{II. 14})$$

y efectuando el cambio de variables

$$y = \ln D \quad x = 1/T \quad (\text{II. 15})$$

queda una expresión lineal a la cual se le puede aplicar el método de cuadrados mínimos explicado en la sección I.

El error en la temperatura se halla experimentalmente y el error en D se obtiene mediante alguno de los programas, aplicación de lo señalado en II.1 y II.2.

En el caso de que se trate de dos mecanismos superpuestos, cada uno con una energía de activación y factor de frecuencia distintos, predominante uno a altas, y el otro a bajas temperaturas, el coeficiente de difusión estará relacionado con la energía por una ley de la forma:

$$D = D_{01} \exp\left(-\frac{Q_1}{RT}\right) + D_{02} \exp\left(-\frac{Q_2}{RT}\right) \quad (\text{II.16})$$

D_{01} y Q_1 corresponden al mecanismo de altas temperaturas y D_{02} y Q_2 al de bajas. Para hallar los valores de D_{01} y Q_1 se divide la curva a estudiar en dos regiones, correspondientes a los dos mecanismos; se hallan los parámetros correspondientes al mecanismo de bajas temperaturas, se extrapolan los valores que tomarían los coeficientes de difusión de este mecanismo a altas temperaturas, se restan de los valores experimentales y con estos valores corregidos se hallan los parámetros correspondientes al mecanismo de altas temperaturas.

El programa correspondiente es ENERG ().

III. DESCRIPCION DE LAS SUBROUTINAS

III.1 Subrutina CUAMI

Sean (X_i, Y_i) los pares de puntos experimentales y

$$\text{var}(X_i) = u_i; \quad \text{var}(Y_i) = v_i \quad (\text{III. 1})$$

las varianzas de las mediciones. Estos datos obedecen una ley lineal

$$y_i = A + B x_i \quad (\text{III. 2})$$

Como se ha visto en la sección I, el criterio de cuadrados mínimos se reduce a minimizar la expresión

$$S = \sum_i (x_i - X_i)^2 / u_i + (A + B x_i - Y_i)^2 / v_i \quad (\text{III. 3})$$

Lo que es equivalente a resolver el siguiente sistema

$$\lambda_i = w_i (A + B x_i - Y_i) \quad (\text{III. 4. a})$$

$$\sum \lambda_i = 0 \quad (\text{III. 4. b})$$

$$\sum \lambda_i x_i = 0 \quad (\text{III. 4. c})$$

donde $w_i = 1 / (v_i + B^2 u_i)$ es el peso de cada punto (ver I. 23).

Es éste un sistema de $(n + 2)$ ecuaciones con $(n + 2)$ incógnitas: A, B y los n valores de λ_i .

De (III. 4. a) y (III. 4. b) se tiene

$$\sum_i w_i (A + B x_i - Y_i) = 0 \quad (\text{III. 5})$$

y de (III. 4. a) y (III. 4. c) se obtiene

$$\sum_i w_i (A x_i + B x_i^2 - x_i Y_i) - \sum_i w_i^2 [B u_i (A + B x_i - Y_i)^2] = 0 \quad (\text{III. 6})$$

Los parámetros A y B se obtienen resolviendo las ecuaciones (III. 5) y

(III. 6) simultáneamente. De la (III. 5) se deduce

$$A = \bar{Y} - B \bar{X} \quad (\text{III. 7})$$

con

$$\bar{X} = \frac{\sum w_i X_i}{\sum w_i} ; \quad \bar{Y} = \frac{\sum w_i Y_i}{\sum w_i}$$

lo que significa que la mejor recta atraviesa el centro de gravedad del sistema de puntos experimentales.

Reemplazando A en (III. 6), York (2), obtiene una ecuación cúbica en B, mientras que Williamson (1) formula una expresión lineal, siendo respectivamente una pseudo-cúbica y una pseudo-lineal dada la aparición de B en el denominador de w_i' . Entonces

$$B \sum w_i Z_i X_i' = \sum w_i Z_i Y_i' \quad (\text{III. 8})$$

donde

$$X_i' = X_i - \bar{X} ; \quad Y_i' = Y_i - \bar{Y} ; \quad Z_i = w_i (\sqrt{w_i} X_i' + B w_i Y_i')$$

El método es iterativo repitiéndose los cálculos necesarios hasta que dos valores consecutivos de la pendiente difieren en menos de una tolerancia otorgada previamente. El valor inicial de B (que se puede estimar gráficamente o calcular aplicando lo desarrollado en la Sección I, cuando en la recta de regresión solo es apreciable el error en los Y_i) es necesario en el caso de resolver la ecuación cúbica (método de York) no así en el de la ecuación lineal, pues si se supone $B = 0$ para la primera iteración, el valor de la pendiente que se obtiene es el que corresponde al caso en que se ignoran los errores en la variable X .

Otra ventaja del método de Williamson sobre el de York es su rápida convergencia. En el caso de York, como ya se dijo, es necesario introducir un valor inicial de B y si éste difiere mucho del correcto, la convergencia puede ser lenta o imposible.

Por otra parte, el número de iteraciones que realice el programa en el método de Williamson es un índice de cuánto influyen los errores en la variable X , comparados con los de la variable Y , para la tolerancia asignada al valor de la pendiente.

Las varianzas de los parámetros de la recta de regresión están dadas según Deming (9) por:

$$\text{var}(B) = \frac{\sum w_i (B X_i' - Y_i')^2}{(n-2) \sum w_i X_i'^2} ; \quad \text{var}(A) = \text{var}(B) \frac{\sum w_i X_i'^2}{\sum w_i} \quad (\text{III. 9})$$

La desviación standard, o error standard de los mismos están dados por:

$$G(B) = [\text{var}(B)]^{1/2}; \quad G(A) = [\text{var}(A)]^{1/2} \quad (\text{III.10})$$

El programa principal pasa a la subrutina CUAMI los valores de X_i, Y_i, U_i, V_i y n .

III.2 Subrutina CURVA

La subrutina permite graficar una función teórica dada $y = f(x)$ y los puntos experimentales (X_i, Y_i) , provenientes de las mediciones. El usuario suministra la función f teórica que desea graficar en forma de subprograma de función. En los casos aquí citados la función es una recta $y = A + Bx$ donde los coeficientes A y B son calculados en la subrutina CUAMI.

AGRADECIMIENTOS

Queremos expresar nuestro agradecimiento a la Dra. D. Fainstein por el impulso inicial aportado a este trabajo y al Sr. C. García Blaya por la colaboración prestada mientras perteneció al Servicio de Computación de esta Gerencia.

COM

DIRECTO

LECTURA DE DATOS GENERALES
CO; KL; TAU; J; NSEC; T; TEMP; BACKG; ERM; ERB.

LECTURA DE DATOS
EXPERIMENTALES
COTA(K); P(K); C(K); KOD(K); CT(K); Z(K)

ESCRIBE TÍTULOS Y DATOS
GENERALES DE ENTRADA

CÁLCULO DE LAS PENETRACIONES
A PARTIR DE LAS COTAS
XX(K)

CÁLCULO DEL CUADRADO DE LA PENETRACIÓN,
DEL LOG. DE LA ACTIVIDAD ESPECÍFICA Y
DE LOS ERRORES CORRESPONDIENTES
X(K); Y(K); U(K); V(K)

SELECCIONA LOS PUNTOS QUE SE DES-
CARTAN EN EL AJUSTE

$KOD(K) = \begin{cases} 0 & \text{PUNTO ACEPTADO} \\ 1 & \text{PUNTO ELIMINADO} \end{cases}$

ESCRIBE
TABLA
XX(K); X(K); U(K); A(K)
V(K)

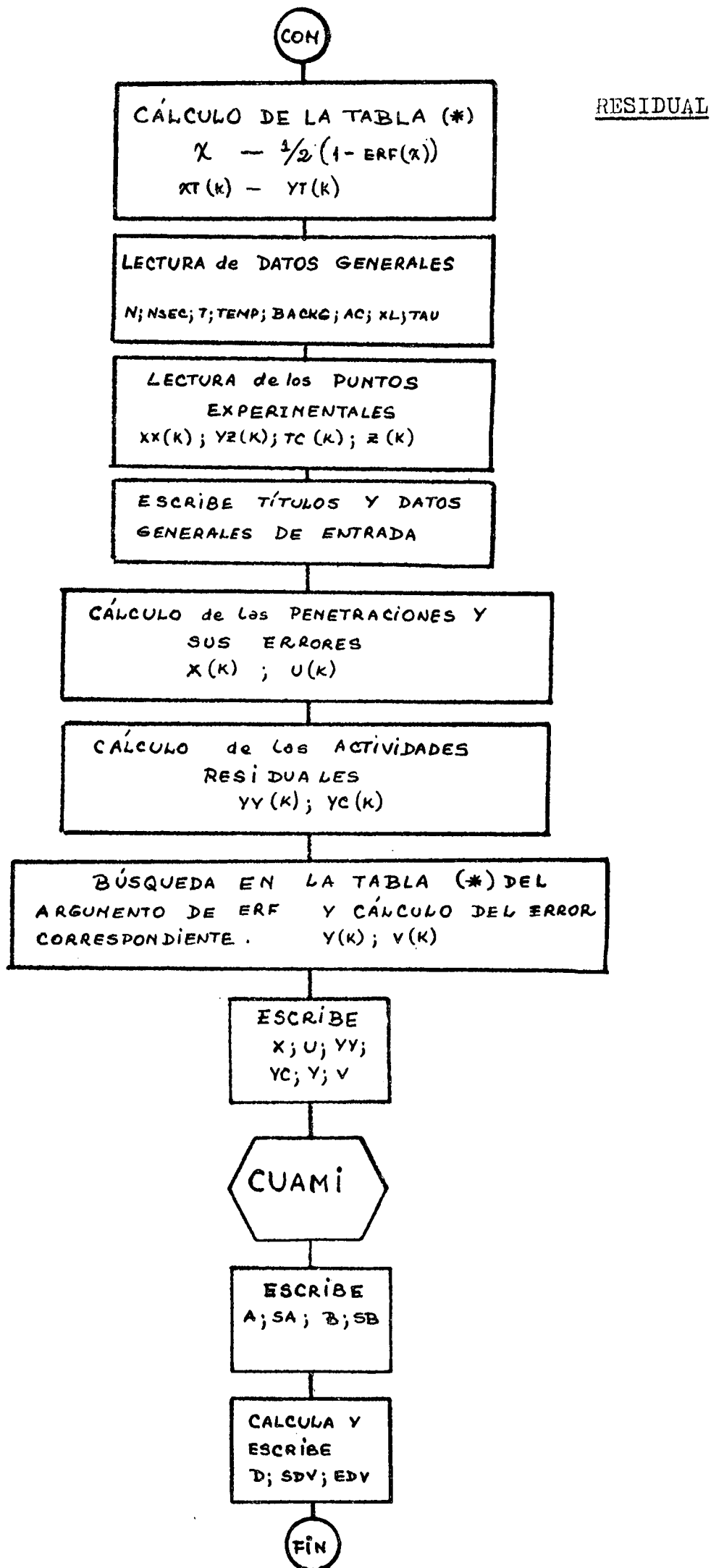
REDUCCIÓN DE LOS VECTORES QUE
PASAN A LA SUBROUTINA CUAMI

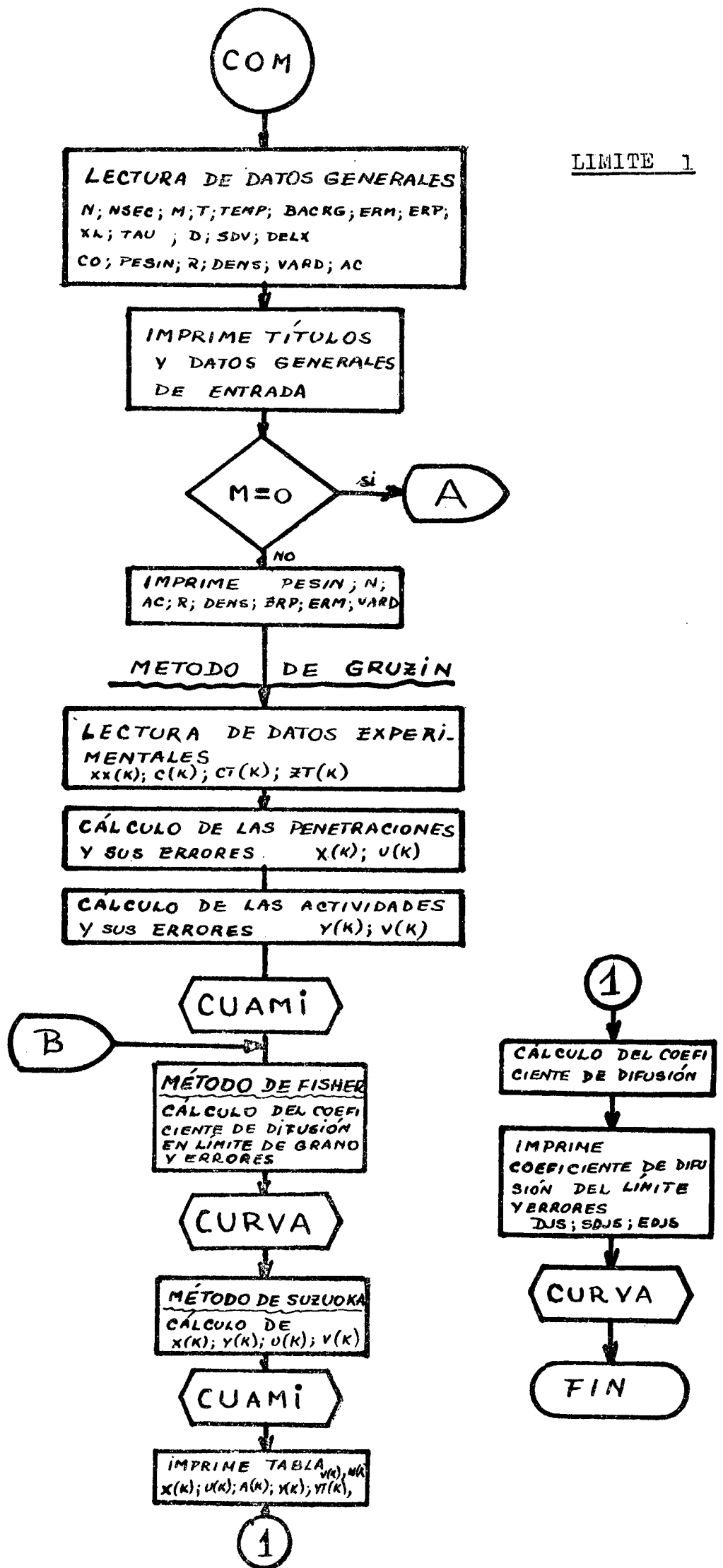
CUAMI

ESCRIBE
O; VA; PEND; VP

CALCULA Y
ESCRIBE
D; SD; ED

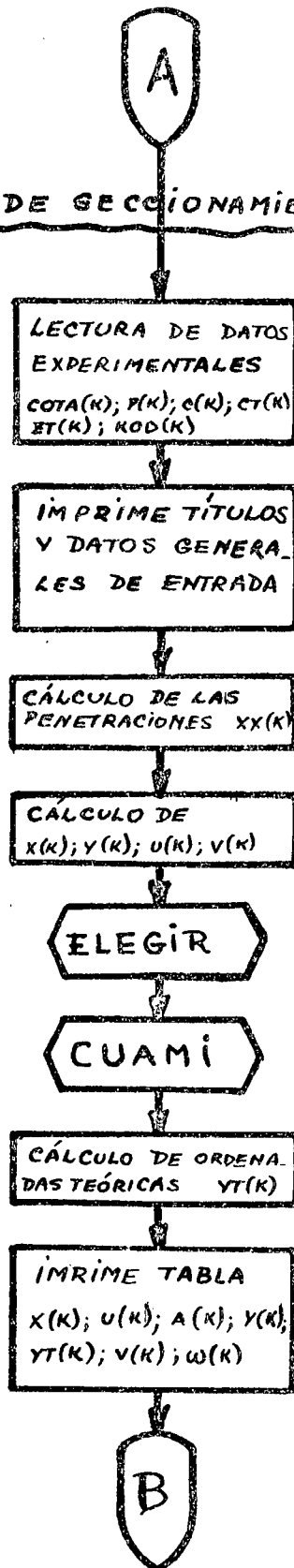
FIN

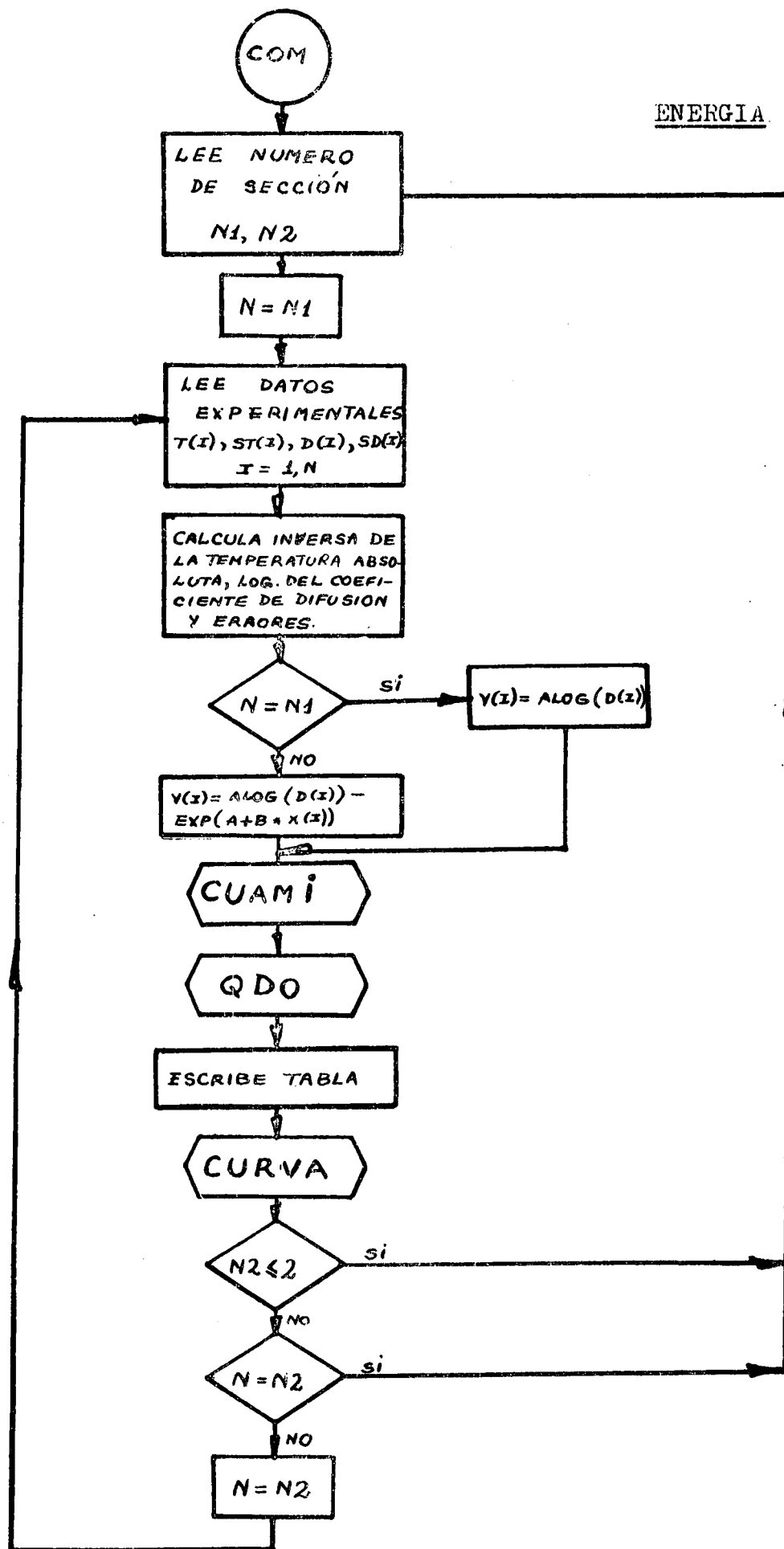


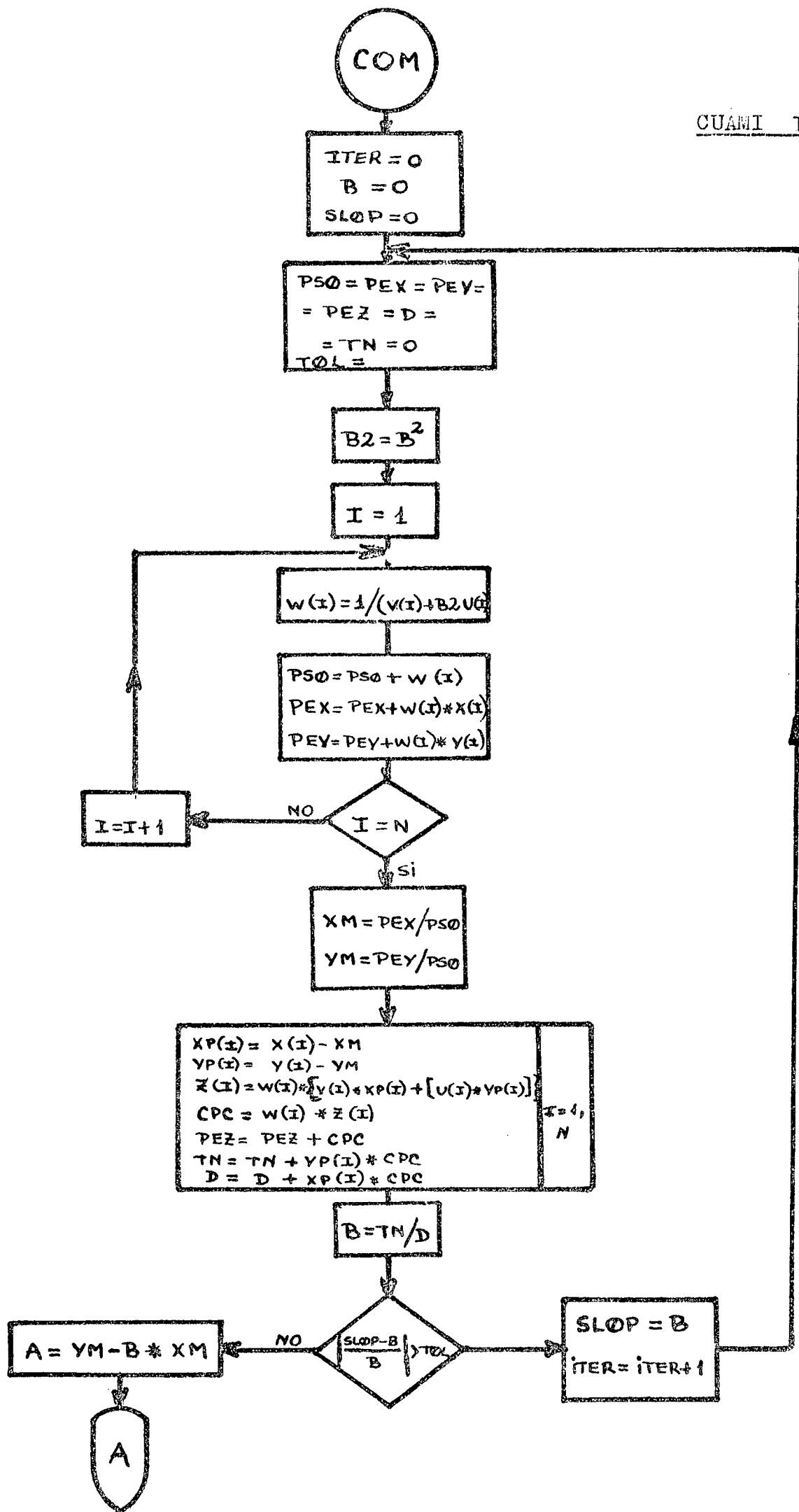


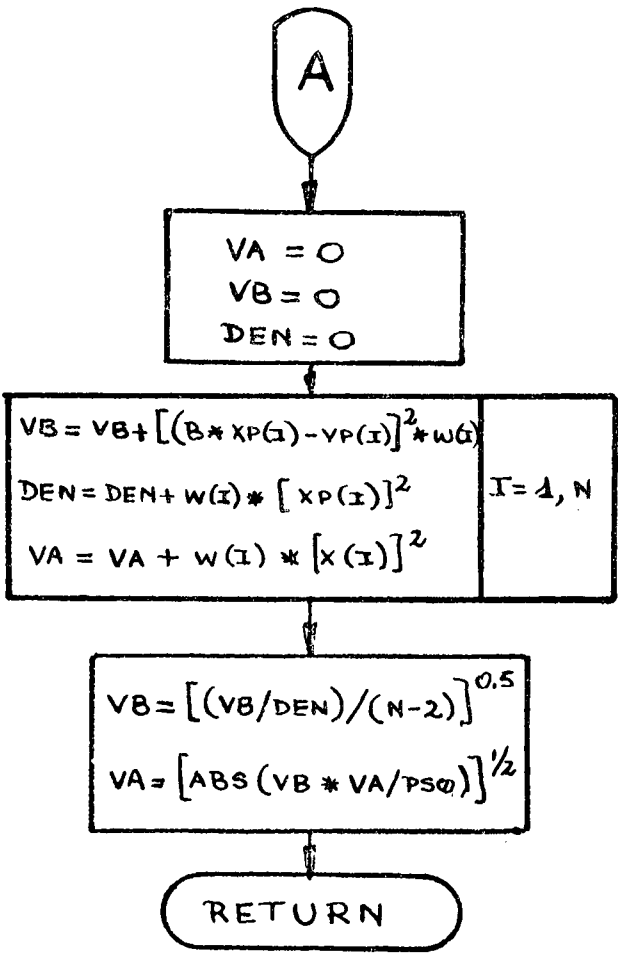
MÉTODO DE SECCIONAMIENTO DIRECTO

LÍMITE 2









0011

M = 119
PASO = .001
EPS = .0005
KDIL = 1

Estos valores
debe fijarlos
el usuario.

CURVA 1

ESCRIBE LINE

BLANQUEA LINE

XMIN = X(1)
XMAX = X(1)
AYMAX = |Y(1)|
AYTHAX = |FUNC(X1)|

i = 2

Decision: $XMIN > X_i$
Si: XMIN = X_i
No: Continúa

Decision: $XMAX < X_i$
Si: XMAX = X_i
No: Continúa

Decision: $AYMAX < |Y_i|$
Si: Aymax = $|Y_i|$
No: Continúa

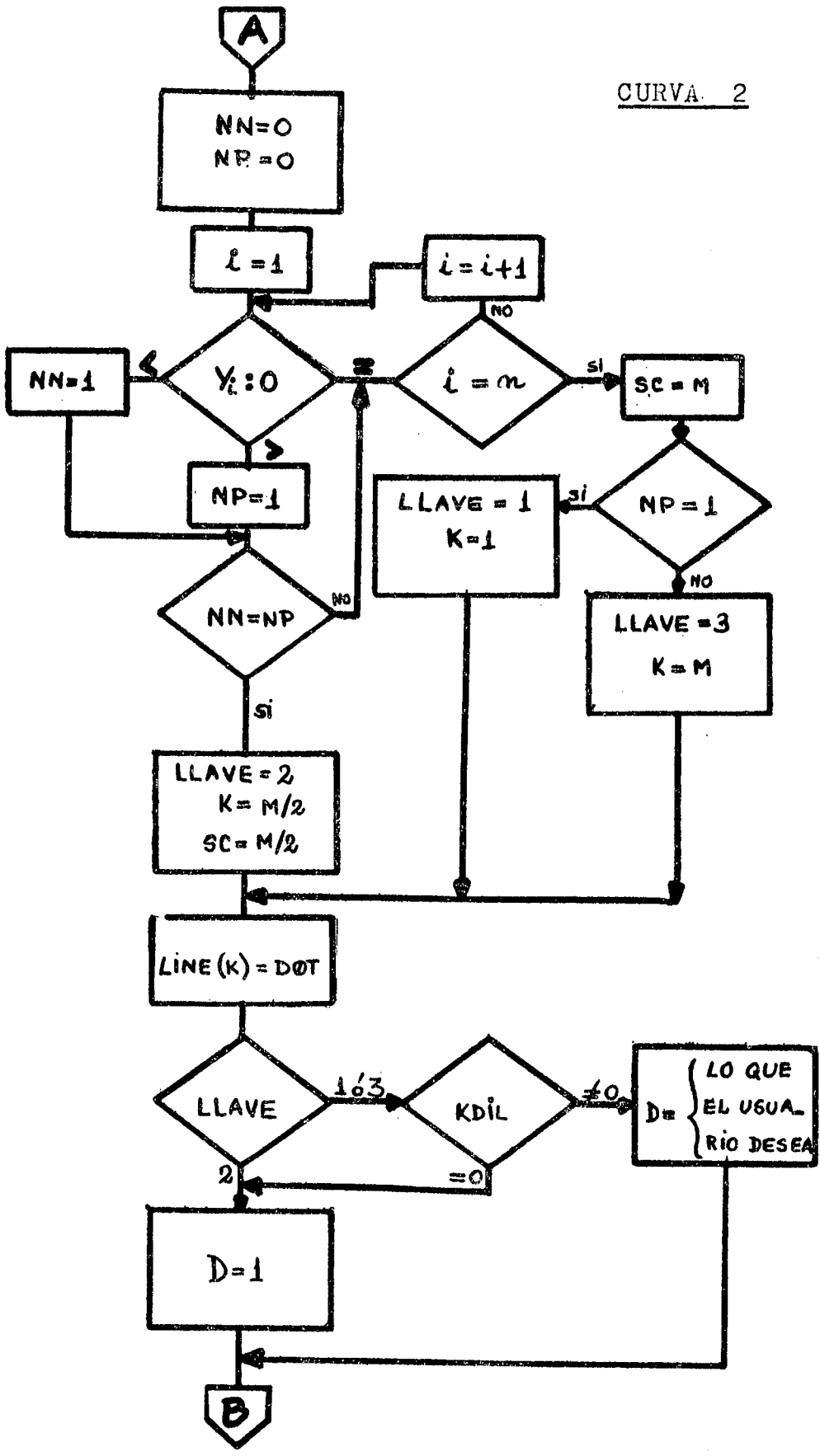
Decision: $AYTHAX < |F(X_i)|$
Si: AYTHAX = $|FUNC(X_i)|$
No: Continúa

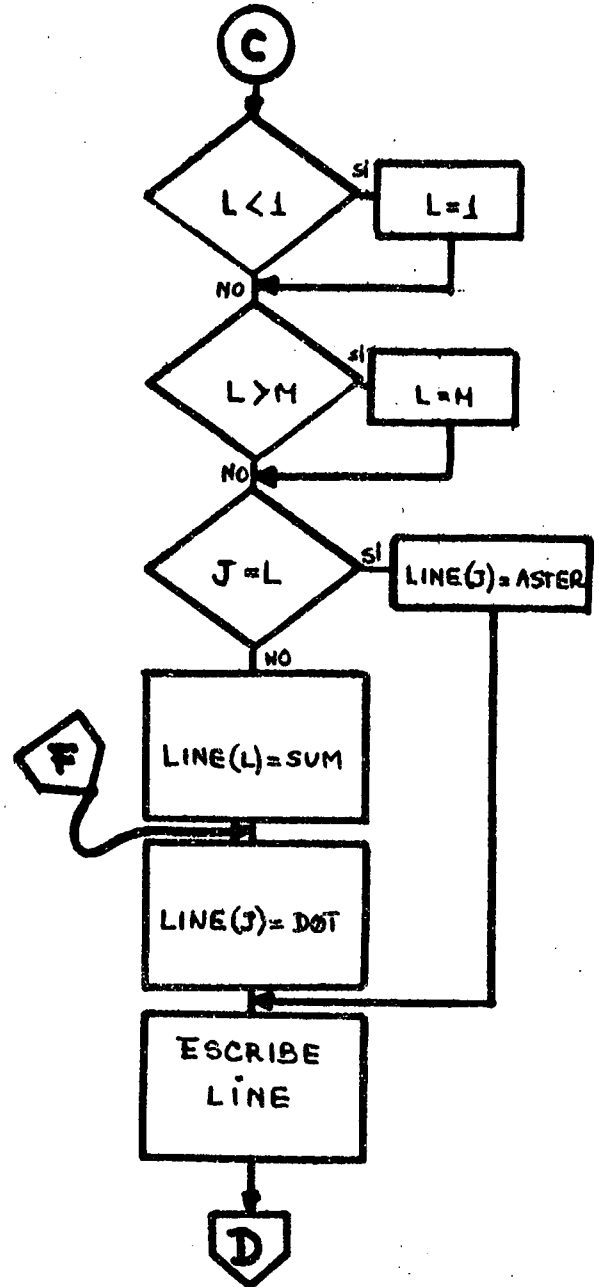
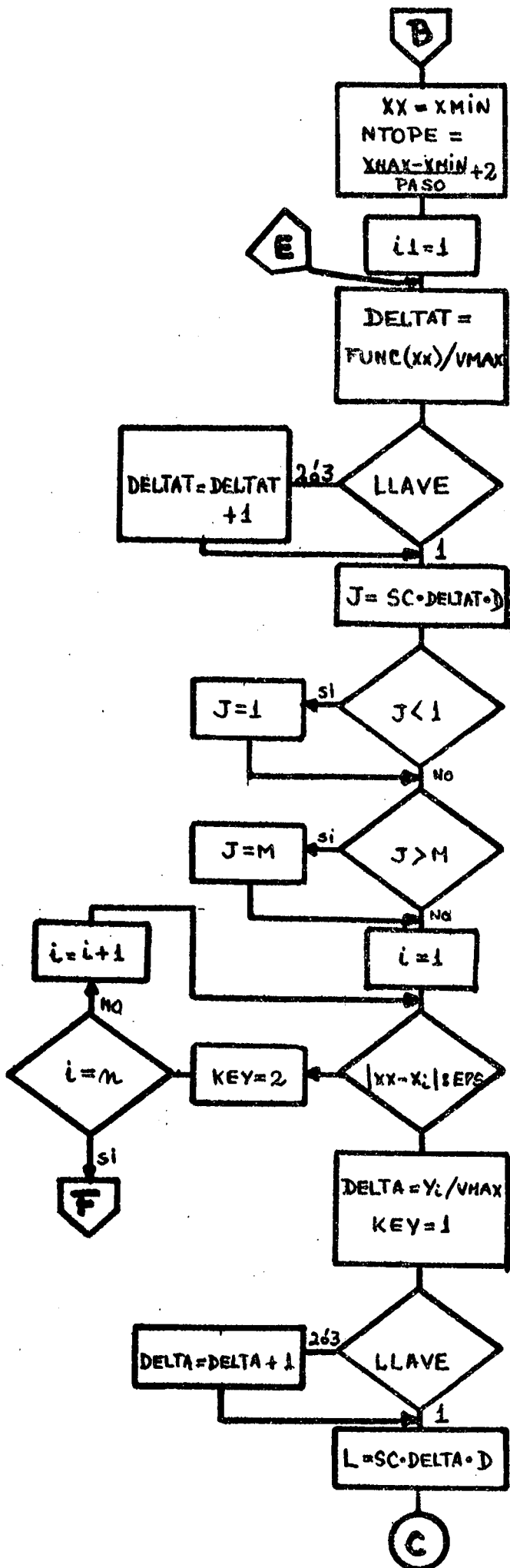
i = i + 1

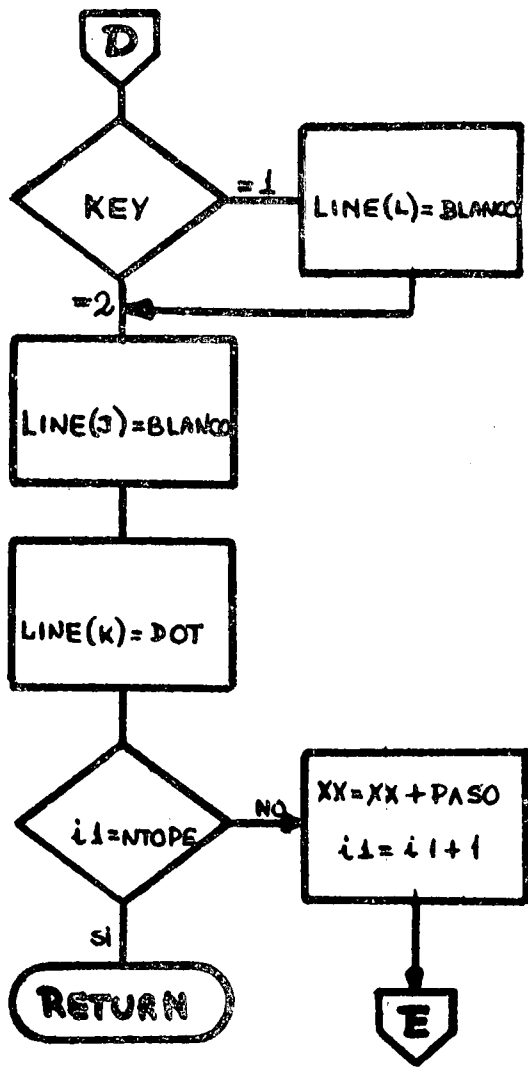
Decision: $i = N$
Si: Continúa
No: Continúa

VMAX = MAX { Aymax, AYTHAX }

A







```

0001 DIMENSION COTA(30),P(30),C(30),CT(30),X(30),A(30),KOD(30),ITT(20)
0002 1,ZAI(20),Z(30),YI(30)
0003 COMMON/AREA1/ X(30),Y(30)
0004 COMMON/AREA2/ U(30),V(30),W(30)
0005 COMMON/AREA3/ G,PEND
0006 DATA BLAVCO/1H /,ASTE/1H+/
0007 DATA KIN/4HFIN /
0008 1 FORMAT (20A4)
0009 2 FORMAT(2I3,8F9.0)
0010 3 FORMAT(2I3F8.0,I2,2F7.0)
0011 4 FORMAT(//17H NUMERO DE PUNTOS I3,5X,5H NSEC I3// 20H TIEMPO DE RECO
ICID F9.0,5H SEG.//7H FONDO F7.3,13H CUENTAS/SEG.//12H TEMPERATURA
2F6.0,2H C,9H 1/T =E12.5,4//5H ERM =E8.2,3H CM,10X,5HEX8 =E8.2,3H
3 MG,10X,4HCO =F8.4,3H CM//)
0012 5 FORMAT(4X,5HXX(K)10X,4HX(K)10X,4HA(K)10X,4HY(K)10X,5H VI
IK)10X//)
0013 8 FORMAT(6E14.6,5X,A1)
0014 10 FORMAT(6X,4HD =E12.4,5X,5HSD = E12.4,5X,5HED = F8.2,4H 0/0//)
0015 13 FORMAT(1H0,23H NUMERO DE ITERACIONES ,I2)
0016 14 FORMAT(1H1,10X,20A4)
0017 389 FORMAT(1H0,1H*,I3,21H PUNTOS DESPRECIADOS.//)
1230 FORMAT(1H05X,4HA = E12.5,5X,5HSA = E12.5,5X,4HB = E12.5,5X,5H8B =
1E12.5//)

```

DESCRIPCION DE VARIABLES

ITT = TITULO QUE IDENTIFICA LA EXPERIENCIA

J = NO. TOTAL DE PUNTOS

NSEC = NO. DE SECCION

T = TIEMPO DE RECOCIDO EN SEG

TEMP = TEMPERATURA EN GRADOS C

BACKG = FONDO

ERM = ERROR DE MICROMETRO EN CM

ERB = ERROR DE BALANZA EN MGR

CO = COTA INICIAL EN CM

XL = COEFICIENTE DE DILATACION TERMICA

COTA(K) = COTA DE CADA COTA EN CM

PLK) = PESO DE CADA COTA EN MGR

C(K) = NO. DE CUENTAS MEDIDAS EN C/CAPA

CT(K) = TIEMPO QUE SE MIDE LA ACTIVIDAD EN C/CAPA

KOD(K) = CODIGO PARA DESCARTAR PUNTOS

KOD(K)=1, PUNTO ELIMINADO - KOD(K)=0, PUNTO ACEPTADO

Z(K)=TIEMPO AL QUE SE MIDE LA ACTIVIDAD DE C/CAPA REFERIDO

AL COMIENZO DEL CONTAJE DE LA PRIMERA

D = COEFICIENTE DE DIFUSION

SD = ERROR EN D

ED = ERROR PORCENTUAL EN D

```

0018 EPS=1.E-2
0019 999 READ(5,1) ITT
0020 IF(ITT(1).EQ.KIN) GO TO 2000
0021 READ(5,2)J,NSEC,T,TEMP,BACKG,ERM,ERB,CO,XL,TAU
0022 TINV=1./(TEMP+273.)
0023 READ(5,3) (COTA(K),P(K),C(K),KOD(K),CT(K),Z(K),K=1,J)
0024 NUMK=KOD(1)
0025 DO 28 K=2,J
0026 NUMK=NUMK+KOD(K)
0027 WRITE(6,14)ITT
0028 WRITE(6,4)J,NSEC,T,BACKG,TEMP,TINV,ERM,ERB,CO
28

```

C
C
C
CALCULO DE LAS PENETRACIONES A PARTIR DE LAS COTAS

```
0029 XX(1)=ABS(CO - COTA(1)) * 9.5
0030 X(1)=ABS(CO-COTA(1))
0031 DO 6 K=2,J
0032 X(K)=ABS(COTA(K-1)-COTA(K))
0033 XX(K)=XX(K-1)+(X(K-1)+X(K))*0.5
0034 WRITE(6,5)
```

C
C
C
CALCULO DEL CUADRO DE LA PENETRACION Y DEL LOG DE LA ACTIVIDAD ESPECIFICA Y DE LOS RESPECTIVOS ERRORES

```
0035 DO 9 K=1,J
0036 X(K)=(XX(K)*(1+XL/TTNV))**2
0037 U(K)=16.*ERM**2*X(K)
0038 A(K)=(C(K)/CT(K) * EXP(TAU * Z(K)) - BACKG)/P(K)
0039 Y(K)=ALOG(A(K))
0040 V(K)=(ERB/P(K)+(1./C(K)*0.5))**2
```

C
C
C
IDENTIFICA LOS PUNTOS QUE SE DESCARTAN

```
0041 IF(NUMK.EQ.0) GO TO 97
0042 DO 93 K=1,J
0043 LLAVE=KOD(K)+1
0044 GO TO(950,951),LLAVE
0045 ZA(K)=BLANCO
0046 GO TO 93
0047 ZA(K)=ASTE
0048 WRITE(6,8) XX(K),X(K),U(K),A(K),Y(K),V(K),ZA(K)
```

C
C
C
REDUCE LOS VECTORES A LOS PUNTOS QUE ENTRAN EN EL CALCULO DE CUAMI

```
0049 I=0
0050 DO 95 K=1,J
0051 LLAVE= KOD(K)+1
0052 GO TO (96,95),LLAVE
```

96

```
0053 I=I+1
0054 X(I)=X(K)
0055 Y(I)=Y(K)
0056 U(I)=U(K)
0057 V(I)=V(K)
0058 CONTINUE
0059 GO TO 105
```

95

97

```
0060 I=J
0061 DO 99 K=1,J
0062 ZA(K)=BLANCO
0063 WRITE(6,8) XX(K),X(K),U(K),A(K),Y(K),V(K),ZA(K)
0064 WRITE(6,389) NUMK
```

C
C
C
CUAMI SUBROUTINA QUE AJUSTA DATOS EXPERIMENTALES A UNA RECTA POR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS

```
0065 CALL CUAMI(I,VA,VP,ITER)
0066 WRITE(6,1230)O,VA,PEND,VP
```

C
C
C
CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION Y DE SUS ERRORES

```

0067      D = -1./14.*PEND*T)
0068      SD = (0.25/(PEND*PEND*T))*VP
0069      ED = SD/D*100.
0070      WRITE(6,1013,SD,ED
0071      WRITE(6,13) IITER
0072      GO TO 999
0073      STOP
0074      END
2000

```

NUMERO DE PUNTOS 17 NSEC 1

TIEMPO DE REGISTRO 1200. SFG.

FONDO 18.280 CUFNTAS/SEG.

TEMPERATURA 1000. C 1/T = 0.7555E-03

ERM = 0.20E-03 CM ERS = 0.10E-01 MG CO = 0.1939 CM

XX(K)	X(K)	U(K)	A(K)	Y(K)	V(K)
0.365001E-02	0.133226E-04	0.352644E-11	0.570925E 01	0.190349E 01	0.528605E-04
0.126000E-01	0.116041E-03	0.745501E-10	0.654233E 01	0.189346E 01	0.457118E-04
0.163503E-01	0.267323E-03	0.171087E-09	0.618382E 01	0.192274E 01	0.936413E-04
0.213503E-01	0.455323E-03	0.291727E-09	0.585109E 01	0.176663E 01	0.749664E-04
0.267000E-01	0.712591E-03	0.458250E-09	0.525319E 01	0.165979E 01	0.101963E-03
0.317200E-01	0.100689E-02	0.643130E-09	0.439148E 01	0.153745E 01	0.923402E-04
0.365503E-01	0.133590E-02	0.854973E-09	0.438965E 01	0.147925E 01	0.115486E-03
0.417503E-01	0.174305E-02	0.111555E-08	0.328952E 01	0.135933E 01	0.989925E-04
0.471500E-01	0.222125E-02	0.142280E-08	0.328937E 01	0.119069E 01	0.865444E-04
0.519503E-01	0.269800E-02	0.172723E-08	0.280122E 01	0.103005E 01	0.111354E-03
0.567503E-01	0.322057E-02	0.206116E-08	0.234421E 01	0.851948E 00	0.105206E-03
0.620500E-01	0.385021E-02	0.248413E-08	0.197682E 01	0.681480E 00	0.117845E-03
0.675003E-01	0.455025E-02	0.291600E-08	0.155007E 01	0.438302E 00	0.109308E-03
0.724000E-01	0.524175E-02	0.335472E-08	0.125373E 01	0.226121E 00	0.114901E-03
0.770003E-01	0.592399E-02	0.379455E-08	0.958343E 00	-0.321686E-01	0.131458E-03
0.821003E-01	0.674040E-02	0.431385E-08	0.745179E 00	-0.294131E 00	0.129764E-03
0.871999E-01	0.760382E-02	0.486645E-08	0.545121E 00	-0.605747E 00	0.110195E-03

* 0 PUNTOS DESPRECIADOS.

X	Y	YT	W
0.133226E-04	0.190349E 01	0.191193E 01	0.185949E 05
0.116041E-03	0.189346E 01	0.187312E 01	0.173174E 05
0.267323E-03	0.182274E 01	0.182881E 01	0.892432E 04
0.455323E-03	0.176663E 01	0.176712E 01	0.940191E 04
0.712591E-03	0.165979E 01	0.168299E 01	0.661975E 04
0.100689E-02	0.153745E 01	0.153743E 01	0.618994E 04
0.133590E-02	0.147925E 01	0.147910E 01	0.481935E 04
0.174305E-02	0.135933E 01	0.134586E 01	0.456524E 04
0.222125E-02	0.119069E 01	0.118875E 01	0.417253E 04
0.269800E-02	0.103005E 01	0.103308E 01	0.335870E 04
0.322057E-02	0.851948E 00	0.855232E 00	0.305789E 04
0.385021E-02	0.681480E 00	0.656270E 00	0.261077E 04
0.455025E-02	0.438302E 00	0.425211E 00	0.236060E 04
0.524175E-02	0.226121E 00	0.220871E 00	0.210116E 04
0.592399E-02	-0.321686E-01	-0.240364E-01	0.185247E 04
0.674040E-02	-0.294131E 00	-0.289578E 00	0.168347E 04
0.760382E-02	-0.605747E 00	-0.572144E 00	0.157774E 04

A = 0.19163E 01 SA = 0.29960E-02 B = -0.32726E 03 SB = 0.18174E 01

D = 0.6366E-06 SD = 0.3535E-08 ED = 0.56 0/0

NUMERO DE PUNTOS 16 NSEC 1
TIEMPO DE RECOCIDO 21412006. SFG.
FONDO 13.270 CUENTAS/SFG.
TEMPERATURA 992. C 1/T = 0.7905E-03

ERM = 0.20E-03 CM EFB = 0.10E-01 MG CO = 0.230E CM

XX(K)	X(K)	U(K)	A(K)	Y(K)	V(K)	
0.305000E-02	0.043815E-05	0.105200E-08	0.163200E 00	-0.181273E 01	0.711067E-04	*
0.749999E-02	0.573725E-04	0.479999E-08	0.211025E 00	-0.155573E 01	0.830887E-04	*
0.104500E-01	0.111392E-03	0.568000E-08	0.360367E 00	-0.172063E 01	0.795371E-04	*
0.141500E-01	0.204219E-03	0.905601E-08	0.363860E 00	-0.171099E 01	0.709832E-04	*
0.182500E-01	0.329710E-03	0.115800E-07	0.347192E 00	-0.195789E 01	0.728665E-04	*
0.222000E-01	0.502677E-03	0.142090E-07	0.374453E 00	-0.232233E 00	0.682640E-04	
0.261500E-01	0.687471E-03	0.167360E-07	0.363777E 00	-0.171122E 01	0.783706E-04	
0.302000E-01	0.930242E-03	0.193280E-07	0.299875E 00	-0.170439E 01	0.735176E-04	
0.343000E-01	0.119557E-02	0.219520E-07	0.238498E 00	-0.143343E 01	0.757898E-04	
0.383000E-01	0.149617E-02	0.245120E-07	0.195122E 00	-0.153413E 01	0.802655E-04	
0.423000E-01	0.182500E-02	0.270720E-07	0.166368E 00	-0.173355E 01	0.784412E-04	
0.464000E-01	0.219557E-02	0.296960E-07	0.111613E 00	-0.219272E 01	0.824051E-04	
0.504500E-01	0.259600E-02	0.322890E-07	0.112428E 00	-0.218544E 01	0.852325E-04	
0.544500E-01	0.302397E-02	0.348480E-07	0.796410E-01	-0.253023E 01	0.869074E-04	
0.586000E-01	0.350250E-02	0.375040E-07	0.559252E-01	-0.239374E 01	0.861325E-04	
0.626000E-01	0.399666E-02	0.400640E-07	0.369997E-01	-0.329635E 01	0.902954E-04	

* 6 PUNTOS DESPRECIADOS.

X	Y	YT	W	
0.502677E-03	-0.982288E 00	-0.948074E 00	0.158755E 03	
0.697471E-03	-0.101122E 01	-0.107429E 01	0.143753E 03	
0.930242E-03	-0.120439E 01	-0.122511E 01	0.122135E 03	
0.119957E-02	-0.143343E 01	-0.139987E 01	0.137625E 03	
0.149617E-02	-0.163413E 01	-0.159179E 01	0.354251E 02	
0.182500E-02	-0.179355E 01	-0.180485E 01	0.373847E 02	
0.219557E-02	-0.219272E 01	-0.204519E 01	0.795853E 02	
0.259600E-02	-0.218544E 01	-0.230441E 01	0.733129E 02	
0.302397E-02	-0.253023E 01	-0.258171E 01	0.579505E 02	
0.350250E-02	-0.298374E 01	-0.289176E 01	0.631678E 02	
A = -0.62237E 00	SA = 0.87582E-02	B = -0.64793E 03	SB = 0.24434E 02	

D = 0.1802E-10 SD = 0.6795E-12 EO = 3.77 0/0

```

C      CALCULO DE COEFICIENTES DE DIFUSION EN VOLUMEN
C      EVALUACION DEL ERROR COMETIDO EN DV
C
C      DESCRIPCION DE VARIABLES
C      N      NUMERO DE PUNTOS
C      NSEC   NO. DE SECCION
C      T      TIEMPO DE RECOCIDO
C      TEMP   TEMPERATURA EN GRADOS C
C      RACKS  FONOS DE RADIACION
C      AC     ACTIVIDAD (CONCENTRACION) INICIAL
C      XL     COEFICIENTE DE DILATACION TERMICA
C      PESIN  PESO INICIAL DE LA PROBETA
C      R      RADIO DE LA PROBETA
C      DENS   DENSIDAD DEL MATERIAL
C      ERP    ERROR DE BALANZA
C      ERM    ERROR DE MICROMETRO
C      TAU ES LOS 2/PIELOGO
C      XX(K)  PESOS DE LA PROBETA RESIDUAL
C      YZ(K)  NO. DE CUENTAS MEDIDO EN LA PROBETA RESIDUAL
C      TC(K)  TIEMPO QUE SE MIDE YZ(K)
C      Z(K)   TIEMPO AL QUE SE MIDE YZ RESPECTO AL COMIENZO DEL PRIMER
C      CONTAJE
C      X(K)   PENETRACION
C      V(K)   ERROR EN LA PENETRACION
C      YV(K)  ACTIVIDAD RESIDUAL
C      YC(K)  VALOR DE U/2(1-EXP(-X/(2*SORT(OT))))
C      V(K)   ERROR DEL ARGUMENTO
C      A      ORDENADA AL ORIGEN
C      SA     ERROR EN LA ORDENADA
C      R      PENDIENTE
C      SR     ERROR EN LA PENDIENTE
C      DV     COEFICIENTE DE DIFUSION
C      SDV    ERROR EN EL COEFICIENTE DE DIFUSION
C      EDV    ERROR PORCENTUAL EN EL COEFICIENTE DE DIFUSION
C
C      DIMENSION UU(2001),ER(2001),XT(2001),YT(2001),XX(30),YY(30),YC(30)
C      1,YZ(30),V(30),TC(30),TT(20),YVT(20)
C      COMMON/AREA1/ X(30),Y(30)
C      COMMON/AREA2/ U(30),V(30),W(30)
C      COMMON/AREA3/A,B
C      EQUIVALENCE (UU(1),XT(1)),(ER(1),YT(1))
C      48 FORMAT(2I5,6F10.0)
C      49 FORMAT(6F10.0)
C      55 FORMAT(5X,14X,10X,10X,10X,12X,2HYV,12X,2HYC,13X,14Y,13X,14V //)
C      55 FORMAT(2E11.3,E14.5,3F14.6)
C      60 FORMAT(5H DV =E12.5,7H SDV =E12.5,7H EDV =E5.1, 4H %//)
C      76 FORMAT(14H10X,20A4//)
C      77 FORMAT(20A4)
C      78 FORMAT(1H018NUMERO DE PUNTOS 13,5X,6H NSEC 13//21H TIEMPO DE REC
C      OCIDO  E11.5,5H SEG.,5X,5HFCNDO F6.2,13H CUENTAS/SEG./13H TEMPERA
C      TURA F6.0,5X,5H1/VT =E14.6//)
C      79 FORMAT(13H PESO INICIAL F10.5,3H GR,22H ACTIVIDAD INICIAL F8.0
C      1,12H CUENTAS/SEG//20H RADIO DE LA PROBETA F7.4,3H CM,14H DENS
C      IDAD F7.3,7H GR/CM3,9H ERPE F9.5//6H ERM F7.4,3H CM,10H VAR
C      30 57.4,74 GR/CM3 //)
C      80 FORMAT(//5X,3HA =E12.4,5X,4HSA =E13.5,5X,3HR =E12.5,5X,4HSH8 =E12.
C      15//)

```

0016 216 FORMAT(1H0,'NUMERO DE ITERACIONES DE CUAMI',I2 '/')
 0017 1000 FORMAT(2(4F10.0))
 0019 3000 FORMAT(2RH ACTIVIDAD INICIAL COPREGIOAF8.0//)

C CALCULO DE LA TABLA X,EP(X)=1/2(1-EP(X))

C
 Q=0.001
 UU(1)=0.
 ER(1)=0.5
 DO 5 I=2,2001
 UU(I)=Q
 ER(I)=0.5*(1.-EP(Q))
 Q=Q+0.001
 READ(5,77,END=2000)TIT
 READ(5,48)N,NSEC,I,TEMP,BACKG,AC,XL,TAU
 WRITE(6,76)TIT
 READ(5,49)DE SIN,R,DENS,EPV,VAPD
 READ(5,1000)(XX(K),YZ(K),TC(K),Z(K),K=1,N)
 TINV=1/(TEMP+273)
 WRITE(6,78)N,NSEC,T,BACKG,TEMO,TINV
 WRITE(6,79)DE SIN,AC,R,DENS,ERD,ERM,VAPD
 VARR=((12/(3.14159*R**3*DENS))*ERM)**2
 VARP=((12/(3.14159*R**2*DENS))*ERP)**2
 DESUP=DENS*3.14159*P#R
 CA=1./AC

C CALCULO DE LAS PENETRACIONES Y SUS ERRORES

C
 X(1)=0
 U(1)=0
 DO 9 K=2,N
 X(K)=X(K-1)-YX(K)
 U(K)=VARP+(VARR+VAPD)*X(K)**2
 X(K)=(X(K)/DE SUP+X(K-1))*XL
 DDS=1./I2.*AC

C CALCULO DE LAS ACTIVIDADES RESIDUALES

C
 DO 1 K=1,N
 YY(K)=(YZ(K)/TC(K))*EXP(TAU*Z(K))
 YC(K)=YY(K)*DCS
 WRITE(6,55)

C BUSQUEDA DEL ARGUMENTO DE ERF EN LA TABLA Y CALCULO DEL
 C ERROR CORRESPONDIENTE

C
 DO 600 K=1,N
 DO 500 I=1,2000
 IF(YC(K)-YT(I)) 500,200,300
 Y(K)=YT(I)
 V(K)=EXP(2*Y(K)**2)*(YY(K)/AC)**2*(1/YY(K)+CA)
 WRITE(6,56)X(K),U(K),YY(K),YC(K),Y(K),V(K)
 GO TO 600

300 Y(K)=(YT(I)+YT(I-1))/2
 V(K)=EXP(2.*Y(K)**2)*(YY(K)/AC)**2*(1./YY(K)+CA)
 WRITE(6,56)X(K),U(K),YY(K),YC(K),Y(K),V(K)
 GO TO 600

500 CONTINUE

0038
 0039
 0040
 0041
 0042
 0043
 0044

0045
 0046
 0047
 0048

0049
 0050
 0051
 0052
 0053
 0054
 0055
 0056
 0057
 0058
 0059
 0060

	600	CONTINUE
0061		CALL CUAMIN(SA,SE,ITER)
0062		WRITE(6,80)A,SA,3,SB
0063		IF(ABS(A)-0.05) 40,40,50
0064		AC=AC*(1-ERF(A))
0065	50	WRITE(6,3000)AC
0066		WRITE(6,216)ITER
0067		GO TO 700
0068		
0069	40	DV=1/(4*8*T)
0070		SDV=0.5*SB/(ABS(3)**3*T)
0071		EDV = SDV*100./DV
0072		WRITE(6,216) ITER
0073		WRITE(6,60)DV,SDV,EDV
0074		GO TO 90
0075	2000	STOP
0076		END

NUMERO DE PUNTOS 14 NSEC 1
 TIEMPO DE REACCION 0.22430E 07 SEG. SCNDD 3.50 CUENTAS/SEG.
 TEMPERATURA 251. 1/T = 0.10040E-02
 PESO INICIAL 10.61584E GP ACTIVIDAD INICIAL 740. CUENTAS/SEG
 RADIO DE LA PROBETA 0.3873 CM DENSIDAD 8.470 GP/CM3 ERR= 0.000002
 FRM 0.0001 CM VADN C.O GP/CM3

X	U	YV	YC	Y	V
0.0	0.0	0.74023E 03	0.50000E 00	0.0	0.270195E-02
0.518E-03	0.132E-11	0.60558E 03	0.40004E 00	0.162499E 00	0.211831E-02
0.775E-03	0.126E-11	0.56545E 03	0.391940E 00	0.212698E 00	0.199227E-02
0.146E-02	0.139E-11	0.43113E 03	0.291383E 00	0.385495E 00	0.159515E-02
0.177E-02	0.127E-11	0.37620E 03	0.254109E 00	0.467495E 00	0.162316E-02
0.251E-02	0.145E-11	0.25577E 03	0.175463E 00	0.650492E 00	0.152845E-02
0.284E-02	0.126E-11	0.22543E 03	0.152441E 00	0.795401E 00	0.153994E-02
0.313E-02	0.127E-11	0.19199E 03	0.129678E 00	0.707490E 00	0.157430E-02
0.382E-02	0.139E-11	0.13090E 03	0.893505E-01	0.255488E 00	0.174300E-02
0.411E-02	0.127E-11	0.10589E 03	0.742221E-01	0.102148E 01	0.185610E-02
0.444E-02	0.127E-11	0.8093E 02	0.601725E-01	0.109843E 01	0.233429E-02
0.457E-02	0.126E-11	0.73583E 02	0.457029E-01	0.115540E 01	0.223292E-02
0.537E-02	0.139E-11	0.47733E 02	0.322421E-01	0.130732E 01	0.282952E-02
0.628E-02	0.146E-11	0.26267E 02	0.177422E-01	0.143722E 01	0.413077E-02

X	Y	W
0.0	0.0	0.920111E-02
0.518302E-03	0.152499E 00	0.104603E-01
0.770413E-03	0.212408E 00	0.111221E-01
0.145714E-02	0.389496E 00	0.131491E-01
0.177115E-02	0.467495E 00	0.139215E-01
0.260745E-02	0.650492E 00	0.144971E-01
0.284150E-02	0.725491E 00	0.143300E-01
0.312708E-02	0.797490E 00	0.140749E-01
0.381647E-02	0.955499E 00	0.12751E-01
0.411161E-02	0.102148E 01	0.119390E-01
0.44415E-02	0.109843E 01	0.108924E-01
0.467295E-02	0.115540E 01	0.292341E-02
0.53665E-02	0.130732E 01	0.793107E-02
0.622133E-02	0.148722E 01	0.535252E-02

A = 0.3487E-01 SA = 0.49650E-02 B = 0.23971E 03 SR = 0.23172E 01

NUMERO DE ITERACIONES DE CUAMI 2

DV = 0.19183E-11 SDV = 0.27088E-13 EDV = 1.9 0/0

C		CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION INTERGRANULAR	
C		METODOS DE FISHER Y SUZUGA	
0001	INTEGER TIT(20),ASTE,BLANCO,FIN		
0002	DIMENSION XX(50),COTA(50),P(50),C(50),CT(50),AI(50),YT(50),ZT(50)		
0003	COMMON /AREA1/ X(50),Y(50)		
0004	COMMON /AREA2/ J(50),V(50),W(50)		
0005	COMMON /AREA3/ DRD,8		
0006	COMMON/AREA4/ ZA(50),KOD(50)		
0007	EXTERNAL FUNC		
0008	DATA BLANCO/LH /,ASTE/LH*/,FIN/4HFIN /		
0009	1 FORMAT(2E14,3,F10.0)		
0010	2 FORMAT(2F10.0)		
0011	4 FORMAT(//4H B =E12.5,84 SB =E12.5//8H OJDEL =E9.3//5H OJ =E9.3, 18H DV =E9.3,74 R =E9.3//6H SDJ =E9.3,8H EDJ =F5.1,4H O/O, 26H JRD =E12.5 //)		
0012	11 FORMAT(2C44)		
0013	12 FORMAT(3I3,7F10.0)		
0014	22 FORMAT(2I3F8.0,2F7.0,12I)		
0015	23 FORMAT(1H0,7F14.6,A1)		
0016	44 FORMAT(//4H B =E12.5,6H SB =E12.5 //6H OJS =E9.3,8H OV =E9.3, 17H R =E9.3 //7H SDJS =E9.3,8H EDJS =F5.1,4H O/O)		
0017	49 FORMAT(6F10.0)		
0018	57 FORMAT(5H PENETRACION INICIAL PARA LA DIFUSION INTERGRANULAR =, 1F7.4,3H CM//)		
0019	76 FORMAT(1H018NUMERO DE PUNTOS 13-5X,5H NSEC 13//21H TIEMPO DE REC 10C10J F9.0,5H SEG.5X,6HFUNDO F5.3,12HCJENTAS/SEG.//14H TEMPERATUR 2A F6.0,5X,5H1/T =E14.6//)		
0020	79 FORMAT(15H PESO INICIAL F10.5,3H GR22H ACTIVIDAD INICIAL F8.0, 113H CUENTAS/MIN.//20H RADIO DE LA PRUBETA F7.4,3H CM14H OEVSIO 240 F8.3,7H GR/CM38H ERP =F10.5,3H GR8H ERM =F8.4,3H CM9H VA 3PD =F8.4,7H GR/CM3//)		
0021	110 FORMAT (//32H APLICACION DEL METODO DE FISHER//)		
0022	111 FORMAT (//33H APLICACION DEL METODO DE SUZUGA//)		
0023	389 FORMAT(1H0,1H*,13,21H PUNTOS DESPRECIADOS ///)		
0024	599 FORMAT(6X,4HX(K),10X,4HUK),10X,4HY(K),10X,5HYT(K),10X, 14HV(K),10X,4HW(K) /)		
0025	600 FORMAT(1H1,20A4)		
0026	790 FORMAT(5H ERM=E3.2,3H CM10X,5HERB =E8.2,3H MG,10X,5H CD =F8.4//)		
C		DESCRIPCION DE VARIABLES	
C		NO. DE PUNTOS NSEC NO. DE SECCION	
C		INDICA EL METODO USADO,M=0 SECCIONAMIENTO DIRECTO	
C		M=1 GRUJIN	
C		TIEMPO E I SEG. TEMP TEMPERATURA DEL RECOCCIO EN GR.C	
C		BAC(G FUND DE RADIACION ERM ERROR ABSOLUTO DEL MICROMETRO(CM)	
C		ERP ERROR ABSOLUTO DE PESADA(GK) XL COEFICIENTE DE DILATACION	
C		TAU LN2/PERIODO DV COEFICIENTE DE DIFUSION EN VOLJHEN	
C		SDV ERROR DEL COEFICIENTE DE DIFUSION EN VOLJHEN	
C		DELX PENETRACION INICIAL PARA LA DIFUSION INTERGRANULAR	
C		COTA INICIAL ENC PESIN PESO INICIAL(GR)	
C		R RADIO DENS DENSIDAD AC ACTIVIDAD INICIAL	
C		XX(K) PESO RESIDUAL DESPUES DE CADA SECCIONAMIENTO	
C		C(K) NO. DE CUENTAS ACUMULADAS	
C		CT(K) TIEMPO DE CONTAJE DE C(K)	
C		ZT(K) TIEMPO AL QUE SE CUENTA C(K) TOMANDO COMO ORIGEN LA HORA DEL PRIMER CONTAJE	
C		COTA(K) COTA DE CADA CAPA	
C		PI(K) PESO DE CADA CAPA	

```

C      KJ0(K) = 1 EL PUNTO NO SE TOMA EN CUENTA =0 SI SE CONSIDERA
C      YTK(K) ACTIVIDAD TEORICA CALCULADA POR CUADRADOS MINIMOS
C      DJDEL COEFICIENTE DE DIFUSION EN LIMITE DE GRANO POR ANCHO DEL
C      LIMITE
C      SDJDEL ERROR EN DJDEL DEL ANCHO DEL LIMITE
C      DJ COEFICIENTE DE DIFUSION DEL LIMITE SDJ ERROR CORRESPONDIENTE
C      EDJ ERROR PORCENTUAL DEL COEFICIENTE
C
C      READ(5,11) TIT
C      IF(TIT(1).EQ.FIN) GO TO 102
C      READ(5,12) N, NSEC, M, T, TEMP, BACKG, ERP, ERPM, XL, TAU
C      READ(5,1) DV, SDV, DELX
C      READ(5,49) CO, PESIN, R, DENS, VARD, AC
C      TINV = 1./TEMP + 273.
C      WRITE(6,600) TIT
C      WRITE(6,76) N, NSEC, T, BACKG, TEMP, TINV
C      WRITE(6,57) DELX
C      IF(M.EQ.1) GO TO 400
C
C      SE USO METODO DE GRUZZIN
C
C      WRITE(6,79) PESIN, AC, R, DENS, ERP, ERPM, VARD
C      VARR = ((2./((3.14159**R**3*DENS)))*ERP)**2
C      VARP = ((2./((3.14159**R**2*DENS)))*ERP)**2
C      DESUP = DENS*3.14159**R**R
C      READ(5,2) (XX(I), C(I), CT(I), ZT(I), I=1,N)
C
C      CALCULO DE LAS PENETRACIONES Y SUS RESPECTIVOS ERRORES
C
C      X(1) = DELX*XL
C      U(1) = VARP + (VARD + VARD)*((PESIN-XX(1))**2
C      DO 3 I=2,N
C      X(I) = XX(I-1) - XX(I)
C      U(I) = VARP + (VARD + VARD)*X(I)**2
C      X(I) = (X(I)/DESUP + X(I-1))*XL
C
C      CALCULO DE LAS ACTIVIDADES Y SUS ERRORES
C
C      DO 6 I=1,N
C      Y(I) = C(I)/CT(I) * EXP(TAU*ZT(I))
C      Y(I) = ALOG(Y(I) - BACKG)
C      V(I) = 1./C(I)
C      I = Y
C      CALL GUAY1(I, SA, SB, ITER)
C      GO TO 450
C
C      SE USO METODO DE S. DIRECTO
C
C      READ(5,22) (COTA(K), P(K), C(K), CT(K), ZT(K), KOD(K), K=1,N)
C      WRITE(6,799) ERP, ERPM, CO
C
C      CALCULO DE LAS PENETRACIONES
C
C      NUMK = KOD(1)
C      DO 943 I=1,N
C      NUMK = NUMK + KOD(I)
C      X(1) = ARS(CO - COTA(1))
C      XX(1) = (X(1)*0.5 + DELX)*XL

```

0062 DO 66 K=2,N
 0063 X(K)=ABS(COTA(K-1)-COTA(K))
 0064 XX(K)=XX(K-1)+(X(K-1)+X(K))*0.5
 0065 XX(K)=XX(K)*XL

66
 C
 C
 C
 METODO DE FISHER

0066 WRITE(06,110)
 0067 WRITE(6,599)
 0068 DO 99 K=1,N
 0069 X(K)=XX(K)
 0070 U(K)=4.*ERM**2
 0071 A(K)=(C(K)/CT(K) *EXP(TAU*ZT(K))-BACKG)/P(K)
 0072 Y(K)=ALOG(A(K))
 0073 V(K)=(ERP/P(K)+(1./C(K)*0.5))**2

99
 CALL ELEGIR(N,NUM,K,I)
 CALL CUAMI(I,SA,SB,ITER)
 DO 33 K=1,N

0076 YT(K)=ORD+8*X(K)
 0077 WRITE(6,23)X(K),J(K),A(K),Y(K),YT(K),V(K),W(K),ZA(K)
 0078 WRITE(6,389) NUM,K
 0079
 0080 DOJDEL=(2.*DV**0.5)/(3.14159*PI)*0.5*B*8
 0081 SOJDEL=(2.)/(3.14159*PI)*0.5) * (0.5*SDV/(DV**0.5*B*8)-2.*(DV**0.5)
 1*SB/B**3)
 DEL=5.E-8
 DOJ=UJDEL/DEL
 R=DJ/DV
 SOJ=SOJDEL/DEL
 EDJ=ABS(SDJ)*100./DJ
 WRITE(6,4)B,SB,DJDEL,DJ,OV,R,SUJ,EDJ,ORD
 CALL CURVA(I,FUNC)

33
 450
 C
 C
 C
 METODO DE SUZUKA

0089 DO 55 K=1,I
 0090 X(K)=X(K)*1.2
 0091 U(K)=1.44*X(K)*0.4*U(K)
 0092 Y(K)=Y(K)*2.303
 0093 V(K)=V(K)*0.184
 0094 CALL CUAMI(I,SA,SB,ITER)
 0095 WRITE(06,111)
 0096 WRITE(6,599)
 0097 DO 32 K=1,N
 0098 YT(K)=ORD+8*X(K)
 0099 WRITE(6,23)X(K),J(K),A(K),Y(K),YT(K),V(K),W(K),ZA(K)
 0100 PX=6.567/0.973
 0101 Q=-1.644/0.973
 0102 Z=-1./1.946
 0103 AX=10.*PX
 0104 BX=(-B)*Q
 0105 CX=(DV*TI)**Z
 0106 DJSI=AX+3*X+C*XL
 0107 DJS=DJSI*DV
 0108 SDJS=DJSI*SDV+SB*Q*(-B)**(Q-1.)*DV*AX*CX+Z*((DV*TI)**(Z-1.))*DV
 1*AX*B*SDV
 R=DJS/DV
 EDJS=ABS(SDJS)*100./DJS
 WRITE(6,44)B,SB,DJS,DV,R,SDJS,EDJS

55
 32
 C
 C
 C
 METODO DE SUZUKA

0109
 0110
 0111

11/19/46

DATE = 73324

MAIN

FUNCTION IV LEVEL 21

0112 CALL CURVAL(F, FUNC)
0113 GO TO 1000
0114
0115
102 STOP
END

SUBROUTINE ELEGIR(N, JMK, I)
COMMON/AREA1/ X(50), Y(50)
COMMON/AREA2/ U(50), V(50), A(50)
COMMON/AREA4/ Z(50), KOD(50)
IDENTIFICA LOS PUNTOS QUE SE DESCARTAN
C IF (MURK=1) GO TO 997
DO 994 K=1, N
LLAVE=KOD(K)+1
GO TO (992, 993), LLAVE
992 Z(K)=BLANCO
GO TO 994
993 Z(K)=ASTE
CONTINUE
C REDUCE LOS VECTORES QUE ENTRAN EN EL CALCULO DE CJAMI
I=0
DO 996 K=1, N
LLAVE=KOD(K)+1
GO TO (995, 996), LLAVE
995 I=I+1
X(I)=X(K)
Y(I)=Y(K)
U(I)=U(K)
V(I)=V(K)
CONTINUE
GO TO 999
997 I=0
DO 998 K=1, N
Z(K)=BLANCO
999 RETURN
END

NUMERO DE PUNTOS 8 NSEC 2

NUMERO 23

TRAZADOR TI 44

TIEMPO DE REGISTRO 21180. SEG. FONDO 10.140 CUENTAS/SEG.

TEMPERATURA 938. I/T = 0.272001E 02

PENETRACION INICIAL PARA LA DIFUSION INTEGRAL = 0.0250-CM

ERR = 0.20E-03 MS CO = 0.0835

APLICACION DEL METODO DE FISHER

X(K)	U(K)	A(K)	Y(K)	YT(K)	V(K)	W(K)
0.276500E-01	0.160000E-06	0.692134E 00	-0.367975E 00	-0.333409E 00	0.103277E-03	0.191738E 04
0.323700E-01	0.160000E-06	0.594490E 00	-0.537000E 00	-0.572825E 00	0.104250E-03	0.191381E 04
0.357500E-01	0.160000E-06	0.469290E 00	-0.758668E 00	-0.753457E 00	0.104350E-03	0.191345E 04
0.397000E-01	0.160000E-06	0.371000E 00	-0.989053E 00	-0.953831E 00	0.103348E-03	0.191712E 04
0.446000E-01	0.160000E-06	0.310355E 00	-0.116943E 01	-0.120412E 01	0.103866E-03	0.191522E 04
0.492500E-01	0.160000E-06	0.227025E 00	-0.147974E 01	-0.144553E 01	0.103495E-03	0.191658E 04
0.541500E-01	0.160000E-06	0.201505E 00	-0.160194E 01	-0.169782E 01	0.102768E-03	0.191925E 04
0.593500E-01	0.160000E-06	0.172154E 00	-0.202373E 01	-0.194555E 01	0.103457E-03	0.191672E 04

0 PUNTOS DESPRECIADOS

Q = -0.51487E 02 SA = 0.19290E 01

MODEL = 0.4075-10

RI = 0.004E-03 DV = 0.289E-00 P = 0.344E 07

SOJ = 0.112E-04 EBJ = 11.3 0/0 CBN = 0.10002E 01

APLICACION DE METODO DE SUZUKA

X(K)	U(K)	A(K)	Y(K)	VT(K)	V(K)	W(K)
0.134907E-01	0.411620E-07	0.692134E 00	-0.847448E 00	-0.810548E 00	0.190959E-04	0.706447E 03
0.162571E-01	0.443506E-07	0.594409E 00	-0.123671E 01	-0.132385E 01	0.192759E-04	0.656215E 03
0.183625E-01	0.465645E-07	0.468290E 00	-0.174721E 01	-0.171450E 01	0.192042E-04	0.625384E 03
0.209233E-01	0.489660E-07	0.371029E 00	-0.227779E 01	-0.217100E 01	0.191091E-04	0.595120E 03
0.239443E-01	0.517802E-07	0.310955E 00	-0.269089E 01	-0.275018E 01	0.192048E-04	0.563104E 03
0.269704E-01	0.543047E-07	0.227925E 00	-0.340553E 01	-0.331167E 01	0.191361E-04	0.537216E 03
0.292217E-01	0.568342E-07	0.201505E 00	-0.368927E 01	-0.391493E 01	0.190018E-04	0.513577E 03
0.337369E-01	0.593916E-07	0.132154E 00	-0.466077E 01	-0.456717E 01	0.191292E-04	0.491639E 03

R = -0.18555E 03 SR = 0.64989E 01

QJS = 0.162E-02 QV = 0.299E-09 R = 0.561E 07

SQJS = 0.117E-03 SQJS = 7.2 0/0

```

0001 DIMENSION J(20),S(20),T(20),ST(20),TI(20),TK(20),YCAL(20)
0002 COMMON/AREA1/A(20),Y(20)
0003 COMMON/AREA2/U(20),V(20),W(20)
0004 COMMON/AREA3/A,B
0005 EXTERNAL FUNC
0006 DATA FIN/4-HFIN /
0007 1 FORMAT(2I3)
0008 2 FORMAT(F6.0,F3.0,2E9.2)
0009 9 FORMAT(1H,7/5H A = E14.5,5X,5HSA = E14.5,5X,5HEA = E14.6,5X,
    15H B = E14.6,5X,5H8 = E14.5//)
0010 10 FORMAT(54 T(C),3X,4HT(K),3X,74SI(T(C),3X,5HI(T(K),7X,1HJ,10X,1HD,
    18X,4HSIG),9X,1HV,9X,2HDT,11X,4HLNDV,10X,1HW //)
0011 11 FORMAT(1H,7F5.0,2F7.0,E12.3,5E11.3,E14.4,E12.4)
0012 12 FORMAT(23A4)
0013 13 FORMAT(1H10X,20A4//)
0014 15 FORMAT(1H23H NUMERO DE ITERACIONES ,13//)

```

N1 Y N2 INDICAN EL NUMERO DE PUNTOS QUE DEFINEN CADA ZONA RECTA EN EL GRAFICO DE ARRENIUS
T(I) VECTOR DE TEMPERATURAS EN GRADOS C
ST(I) VECTOR DE COTAS MAXIMAS DE ERROR ABSOLUTO EN T(I)
S(I) VECTOR DE COEFICIENTES DE DIFUSION
SI(I) VECTOR DE ERRORES EN D(I)
U(I) VECTOR DE VARIANZAS EN X(I)
V(I) VECTOR DE VARIANZAS EN Y(I)
K NO. DE ITERACIONES DE LA SUBROUTINA CJAMI
YCAL VALOR DE Y PROVENIENTE DE CUAMI
YTCAL LOGARITMO DE Y AJUSTADO POR CUAMI
A ORDENADA AL ORIGEN
B PENDIENTE DE LA RECTA
SA DESVIACION STANDARD DE A
SB DESVIACION STANDARD DE B

```

0015 READ(5,12) TIT
0016 IF(TIT(1).EQ.FIN) GO TO 7
0017 WRITE(6,13)TIT
0018 READ(5,1)N1,N2
0019 V=N1
0020 READ(5,2)T(I),ST(I),D(I),SD(I),I=1,N)
0021 DO 3 I=1,N
0022 TK(I)=T(I)+273.
0023 X(I)=1./TK(I)
0024 IF(V.EQ.N1) GO TO 100
0025 Y(I)=ALOG(D(I))-EXP(A+B*X(I))
0026 GO TO 200
0027 Y(I)=ALOG(D(I))
0028 U(I)=(ST(I)/(TK(I))**2)**2
0029 V(I)=(SD(I)/D(I))**2
0030 CALL CUAMIN(SA,SB,K)
0031 CALL CDD(V,YCAL,SA,SB,EA)
0032 WRITE(6,10)
0033 WRITE(6,11)T(I),TK(I),ST(I),X(I),J(I),D(I),V(I),YCAL(I),
    1Y(I),W(I),I=1,N)
0034 WRITE(6,9) A,SA,EA,B,SB
0035 WRITE(6,15)K
0036 CALL CURVA(N,FUNC)
0037 IF(V2.LE.2*OR.N.EQ.N2) GO TO 5
0038 V=N2

```

0039 G3 TO 8
0040 STOP
0041 END

```

SUBROUTINE QDO(N,YCAL,SA,SB,EA)
  DIMENSION YCAL(20)
  COMMON/AREAL/X(20),Y(20)
  COMMON /AREA3/A,B
  DO 7 I=1,N
    YCAL(I)=EXP(A+B*X(I))
    FF=EXP(A)
    ELND=ABS(SA*100./A)
    Q=-3*1.9865
    SQ=1.9865*SB
    NSQ=SQ
    EQ=SQ*100./Q
    NQ=Q
    WRITE(6,8)NQ,NSQ,EQ
    A1=EXP(A+SA)
    A2=EXP(A-SA)
    EA=((A1-A2)/FF)*100.
    A1=ABS(FF-A1)
    A2=ABS(FF-A2)
    *WRITE(6,9)A1,F,A2,ELND
  8 FORMAT(1H39X,14+/34H
    1,18H CAL/MCL EQ = F5.1,5H 3/0 /1H,5X,21(1H-)/)
  9 FORMAT(1H347X,14+EI0.3/334
    15H - ,EI0.3,214 CM2/SEG
    2///)
  RETURN
END

```

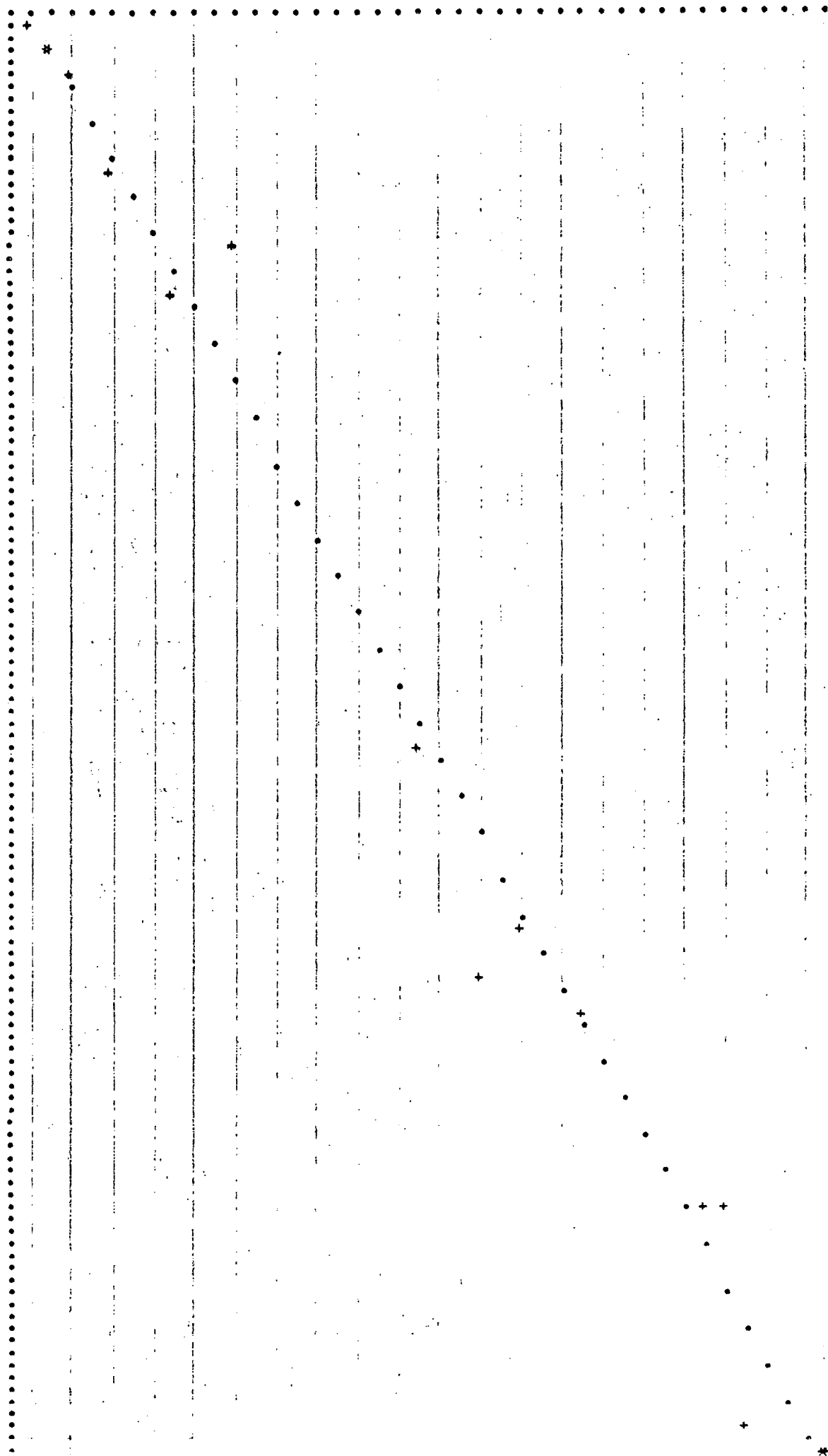
ENERGIA DE ACTIVACION Q = 15.34 - ,15
 FACTOR DE FRECUENCIA D =EI0.3,
 ELND = F5.1,5H 3/0 /1H,5X,20(1H-)

ENERGIA DE ACTIVACION Q = 50692 - 1084 CAL/MOL EQ = 2.1 J/O

FACTOR DE FRECUENCIA D = 0.112E 00 + 0.455E-01 - 0.324E-01 CM2/SEG ELVD = 15.6 J/O

I(C)	I(K)	SIG(C)	1/T(K)	U	D	SIGD	V	DT	LV3V	W
1300.	2173.	10.	0.460E-03	0.448E-11	0.784E-06	0.125E-07	0.258E-03	0.832E-05	-0.140E-02	0.3158E 03
1350.	2123.	10.	0.471E-03	0.492E-11	0.569E-06	0.135E-07	0.790E-03	0.675E-05	-0.142E-02	0.2511E 03
1300.	2073.	10.	0.482E-03	0.542E-11	0.560E-06	0.933E-08	0.278E-03	0.506E-06	-0.144E-02	0.2539E 03
1710.	1983.	10.	0.504E-03	0.647E-11	0.302E-06	0.129E-07	0.182E-02	0.289E-05	-0.150E-02	0.1662E 03
1500.	1873.	10.	0.534E-03	0.813E-11	0.129E-06	0.242E-08	0.352E-03	0.136E-05	-0.158E-02	0.1779E 03
1520.	1793.	20.	0.558E-03	0.387E-10	0.178E-06	0.425E-08	0.573E-03	0.740E-07	-0.155E-02	0.3896E 02
1254.	1527.	2.	0.655E-03	0.736E-12	0.505E-08	0.152E-09	0.631E-03	0.620E-08	-0.189E-02	0.9023E 03
1194.	1467.	2.	0.682E-03	0.854E-12	0.129E-08	0.256E-09	0.425E-01	0.313E-08	-0.204E-02	0.2321E 02
1156.	1429.	5.	0.700E-03	0.600E-11	0.169E-08	0.117E-09	0.479E-02	0.137E-08	-0.202E-02	0.1152E 03
1154.	1427.	2.	0.701E-03	0.955E-12	0.198E-08	0.133E-09	0.854E-02	0.132E-08	-0.200E-02	0.1091E 03
1100.	1373.	5.	0.728E-03	0.703E-11	0.101E-09	0.359E-10	0.133E-02	0.952E-09	-0.207E-02	0.1596E 03
992.	1265.	7.	0.791E-03	0.165E-10	0.269E-09	0.334E-11	0.961E-03	0.135E-09	-0.220E-02	0.8576E 02
980.	1253.	2.	0.798E-03	0.162E-11	0.265E-09	0.193E-10	0.558E-02	0.150E-09	-0.220E-02	0.1507E 03
960.	1233.	5.	0.811E-03	0.108E-10	0.512E-10	0.251E-11	0.168E-02	0.115E-09	-0.235E-02	0.1150E 03
910.	1183.	10.	0.845E-03	0.511E-10	0.509E-10	0.950E-12	0.348E-03	0.431E-10	-0.237E-02	0.2989E 02

A = -0.21857E 01 SA = 0.340467E 00 EA = 0.594155E 02 B = -0.25518E 05 S3 = 0.545982E 03



ENERGIA DE ACTIVACION Q = 50543 - 1039 CAL/MOL EQ = 2.9 0/0

FACTOR DE FRECUENCIA D = 0.106E 00 + 0.395E-01
- 0.288E-01 CM2/SEG ELND = 14.1 0/0

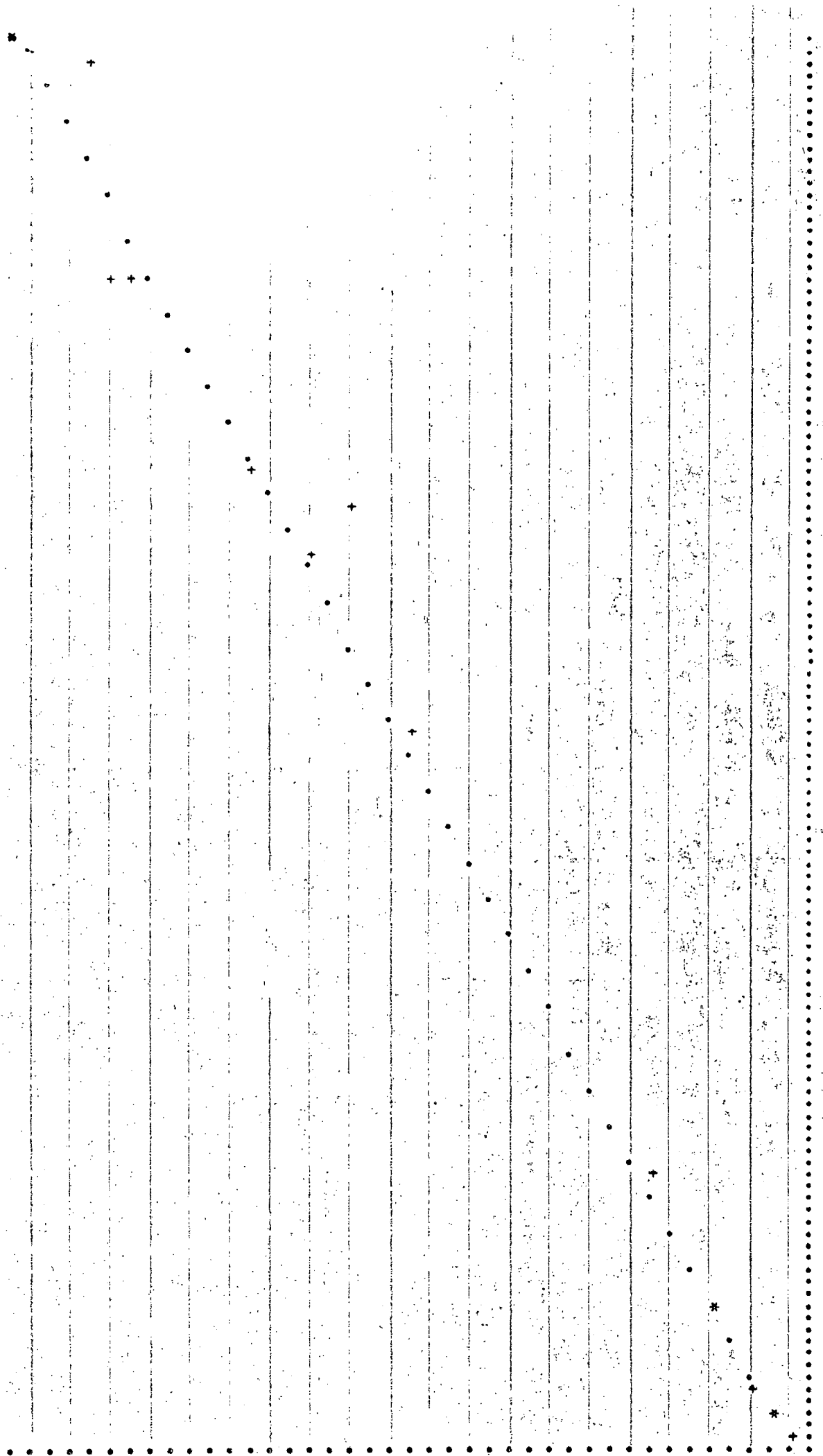
F(C)	T(K)	SIGT(C)	1/T(K)	U	D	SIGD	V	DT	LVDT	W
1900.	2173.	10.	0.460E-03	0.448E-11	0.784E-05	0.125E-07	0.258E-03	0.871E-05	-0.140E-02	0.3187E 03
1950.	2123.	10.	0.471E-03	0.492E-11	0.569E-06	0.133E-07	0.790E-03	0.651E-06	-0.142E-02	0.2531E 03
1900.	2073.	10.	0.482E-03	0.542E-11	0.560E-06	0.933E-08	0.278E-03	0.495E-06	-0.144E-02	0.2663E 03
1710.	1983.	10.	0.504E-03	0.647E-11	0.302E-06	0.129E-07	0.182E-02	0.284E-06	-0.150E-02	0.1673E 03
1500.	1873.	10.	0.534E-03	0.813E-11	0.129E-06	0.242E-08	0.352E-03	0.134E-06	-0.158E-02	0.1796E 03
1254.	1527.	2.	0.655E-03	0.736E-12	0.505E-08	0.152E-09	0.631E-03	0.615E-08	-0.189E-02	0.9061E 03
1194.	1467.	2.	0.682E-03	0.864E-12	0.129E-08	0.256E-09	0.425E-01	0.311E-08	-0.204E-02	0.2322E 02
1156.	1429.	5.	0.700E-03	0.600E-11	0.169E-08	0.117E-09	0.479E-02	0.196E-08	-0.202E-02	0.1157E 03
1154.	1427.	2.	0.701E-03	0.965E-12	0.198E-08	0.133E-09	0.854E-02	0.191E-08	-0.200E-02	0.1092E 03
1100.	1373.	5.	0.728E-03	0.703E-11	0.101E-08	0.359E-10	0.133E-02	0.949E-09	-0.207E-02	0.1709E 03
992.	1265.	7.	0.791E-03	0.155E-10	0.259E-09	0.334E-11	0.961E-03	0.195E-09	-0.220E-02	0.8654E 02
980.	1253.	2.	0.798E-03	0.162E-11	0.265E-09	0.198E-10	0.558E-02	0.161E-09	-0.220E-02	0.1510E 03
960.	1233.	5.	0.811E-03	0.108E-10	0.512E-10	0.251E-11	0.168E-02	0.116E-09	-0.235E-02	0.1159E 03
910.	1183.	10.	0.845E-03	0.511E-10	0.509E-10	0.950E-12	0.348E-03	0.484E-10	-0.237E-02	0.3018E 02

SA = -0.224492E 01 EA = 0.645064E 02 B = -0.254433E 05 S3 = 0.508093E 03

```

0001 SUBROUTINE CUAMI(N,VA,VB,ITER)
0002 DIMENSION Z(30),XP(30),YP(30),YI(30)
0003 COMMON/AREA1/ X(30),Y(30)
0004 COMMON/AREA2/ U(30),V(30),W(30)
0005 COMMON/AREA3/ A,B
C
C TOL = TOLERANCIA ADMITIDA EN EL CALCULO DE LA PENDIENTE
C W(I) = PESO DE CADA PUNTO
C ITER = NO. DE ITERACIONES QUE REALIZA LA SUBROUTINA
C
0006 TOL=0.01
C
C CALCULO DE LA PENDIENTE B
C
0007 ITER=1
0008 B=0
0009 SLOP=0
0010 350 PSD=0
0011 PEX=0
0012 PEY=0
0013 PEZ=0
0014 D=0
0015 TN=0
0016 B2=B**2
0017 35 DO 1 I=1,N
0018 W(I)=1./((V(I)+B2*U(I))
0019 PSD=PSD+W(I)
0020 PEX=PEX+W(I)*X(I)
0021 PEY=PEY+W(I)*Y(I)
C CALCULO DE XMEDIO YMEDIO
0022 XM=PEX/PSD
0023 YM=PEY/PSD
0024 DO 2 I=1,N
0025 XP(I)=X(I)-XM
0026 YP(I)=Y(I)-YM
0027 Z(I)=W(I)*((V(I)*XP(I)+B*(U(I)*YP(I)))
0028 CPC=W(I)*Z(I)
0029 PEZ=PEZ+CPC
0030 TN=TN+YP(I)*CPC
0031 D=D+XP(I)*CPC
0032 B=TN/D
0033 IF(ABS((SLOP-B)/B).GT.TOL)GO TO 4
0034 GO TO 3
0035 4 SLOP=B
0036 ITER=ITER+1
0037 GO TO 350
0038 3 A=YM-B*XM
C CALCULO DE LAS VARIANZAS VAR(A) VAR(B)
0039 VA=0
0040 DEN=0
0041 VB=0
0042 DO 555 I=1,N
0043 VB=VB+((B*XP(I)-YP(I))**2)*W(I)
0044 DEN=DEN+W(I)*((XP(I)**2)
0045 VA=VA + W(I)*X(I)**2
0046 VB=((VB/DEN)/(FLOAT(N)-2.))**0.5
0047 VA=((VA/PSD)*VB)**0.5
0048 DO 556 I=1,N

```



```
0049      YI(I)=A + 5*X(I)
0050      WRITE(6,600) (X(K),Y(K),YI(K),K=1,N)
0051      FORMAT(//20X,2H X,12X,2H Y,12X,3H YI,11X,2H * //14X,4E14.6)
0052      RETURN
0053      END
```

SUBROUTINE CURVA(N,FUNC)

```

C DESCRIPCION DE VARIABLES
C N= NUMERO DE PUNTOS
C M = CANTIDAD DE CARACTERES POR LINEA DE IMPRESION
C X(I)= VALOR DE LAS ASCISAS
C Y(I)= VALOR EXPERIMENTAL DE LAS ORDENADAS
C FUNC= FUNCION DEL USUARIO
C Y(I)= VALOR DE LAS ORDENADAS CALCULADO EN EL SUBPROGRAMA FUNC
C PASO = INCREMENTO DE LA VARIABLE INDEPENDIENTE PARA LA IMPRESION DE
C LOS PUNTOS TEORICOS ----- DEBE SER CALCULADO POR EL USUARIO
C SEGUN EL RANGO DE VARIACION DE SUS DATOS
C EPS = DIFERENCIA POR DEBAJO DE LA CUAL DOS VALORES DE LA VARIABLE
C INDEPENDIENTE SON CONSIDERADOS IGUALES
C EPS = 5/10 * PASO
C KJIL PERMITE DILATAR EL GRAFICO PARA OCUPAR TODA LA HOJA
C KJIL=0---NOSE DILATA
C KJIL=1---SE DILATA

```

```

INTEGER BLANCO,DOT,SUM,ASTER
DIMENSION LINE(119)
COMMON/AREA1/X(20),Y(20)
DATA BLANCO/14 /,DOT/14.,SUM/14.,ASTER/14./
M=119
PASO=.00001
EPS=.000005
KJIL=1

```

ESCRIBE EL EJE DE LAS Y

```

DO 1 J=1,M
LINE(J)=DOT
WRITE(6,9) LINE
FORMAT(11H,119A1)
DO 2 J=1,M
LINE(J)=BLANCO

```

SELECCION DE MAXIMOS Y MINIMOS PARA LA ESCALA

```

XMIN=X(1)
XMAX= X(1)
AYMAX=ABS(Y(1))
AYTMAX=ABS(FUNC(X(1)))
DO 4 I=2,N
IF(XMIN.GT.X(I)) XMIN=X(I)
IF(XMAX.LT.X(I)) XMAX=X(I)
IF(AYMAX.LT.ABS(Y(I))) AYMAX=ABS(Y(I))
IF(AYTMAX.LT.ABS(FUNC(X(I)))) AYTMAX=ABS(FUNC(X(I)))
CONTINUE
VMAX=SMAX1(AYTMAX,AYMAX)

```

UBICA EL PUNTO PARA TRAZAR EL EJE DE LAS X

```

NV=0
NP=0

```

EN EL DO 43 SE DETERMINA SI LA ORDENADA ES POSITIVA,NEGATIVA O NULA

```
0065 GO TO(350,340,340), LAVE
0067 DELTA=DELTA + 1.
0068 L=SC * DELTA * 3 + 1.
0069 IF(L.LT.1) L=1
0070 IF(L.GT.4) L=4
0071 IF(J.EQ.L) 30 TO 420
0072 LINE(L)=SUM
0073 GO TO 410
0074 KEY=2
0075 CONTINUE

C SE COLOCAN LOS SIMBOLOS ELECIDOS EN LAS POSICIONES ADECUADAS DE
C LA LINEA DE IMPRESION
C
0076 LINE(J)=DOT
0077 GO TO 430
0078 LINE(J)=ASTER
0079 WRITE(9,11) LINE
0080 GO TO(440,450),KEY

C SE RESTAURA LA LINEA DE IMPRESION A SU CONFIGURACION INICIA.
C
0081 LINE(L)=BLANCO
0082 LINE(J)=BLANCO
0083 LINE(K)=DOT
0084 XX=XX+PASO
0085 FORMAT(11,119A1)
0086 RETURN
0087 END
```

```
FUNCTION =UNC(X)
COMMON/AREAS/A,3
FUNC=A + 3 * X
RETURN
END
```

```

0029      DO 43 I=1,N
0030      IF(Y(I)) 100,43,200
0031      100      NV=1
0032      GO TO 210
0033      200      NP=1
0034      IF(NV.EQ.NP) GO TO 300
0035      43      CONTINUE

      LLAVE INDICA EL TIPO DE GRAFICO
      LLAVE=1---TODAS LAS ORDENADAS SON POSITIVAS
      LLAVE=2---HAY ORDENADAS DE AMBOS SIGNOS
      LLAVE=3---TODAS LAS ORDENADAS SON NEGATIVAS

      SC=M
      IF(NP.EQ.1) GO TO 220
      LLAVE=3
      K=M
      GO TO 110
      LLAVE=1
      K=1
      GO TO 110
      LLAVE=2
      K=M/2
      SC=M/2
      110      LINE(K)=DOT

      SE DECIDE SI CORRESPONDE DILATAR EL GRAFICO O NO
      LLAVE=2---NUNCA SE DILATA
      LLAVE=1 O LLAVE=3---SE PUEDE ELEGIR ENTRE DILATAR O NO
      ES EL FACTOR DE DILATACION --- DEBE SER CALCULADO POR EL USUARIO
      SEGUN EL TIPO DE GRAFICO QUE TIENE

      GO TO(302,306,302), LLAVE
      IF(KDIL) 304,306,304
      D=L/(FUNC(XMIN)/VMAX+1.)
      GO TO 303
      D=L.

      SE COLOCA EL PUNTO EXPERIMENTAL EN LA POSICION CORRECTA Y SE
      GRAFICA LA FUNCION

      XX=XMIN
      NTOPE=(XMAX-XMIN)/PASO + 2.
      DO 500 II=1,NTOPE
      DELTAT=FUNC(X)/VMAX
      GO TO(320,310,310),LLAVE
      DELTAT=DELTAT+L.
      J=SC * DELTAT * D + L.
      IF(J.LT.1) J=1
      IF(J.GT.M) J=M

      EN EL DO 400 SE PRUEBA SI LA ABSOLUTA RECIENTE CALCULADA ESTA
      SUFICIENTEMENTE PROXIMA A ALGUNO DE LOS PUNTOS DATOS

      DO 400 I=1,N
      IF(ABS(X-K(I))-EPS) 330,330,390
      DELTA=Y(I)/VMAX
      KEY=1

```

