



**MÍNIMOS QUADRADOS PARA COMBINAÇÃO LINEAR DE
EXPONENCIAIS**

por

MYRIAN DE CARVALHO PAIANO e J. MAX COHENCA

PUBLICAÇÃO I.E.A. N.º 106

Novembro — 1965

INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA
Caixa Postal 11049 (Pinheiros)
CIDADE UNIVERSITÁRIA "ARMANDO DE SALLES OLIVEIRA"
SÃO PAULO — BRASIL

MÍNIMOS QUADRADOS PARA COMBINAÇÃO LINEAR DE EXPONENCIAIS

por

Myrian de Carvalho Paiano e J. Max Cohenca

Divisão de Física de Reatores -- Instituto de Energia Atômica
São Paulo, Brasil

Programa para Computadores
IBM-1620 (modelos I e II) em
linguagem FORTRAN.

Publicação IEA nº 106

Novembro -- 1965

Comissão Nacional de Energia Nuclear

Presidente: Prof. Luiz Cintra do Prado

Universidade de São Paulo

Reitor: Prof. Luiz Antonio da Gama e Silva

Instituto de Energia Atômica

Diretor: Prof. Rômulo Ribeiro Pieroni

Conselho Técnico-Científico do IEA

Prof. Hélio Lourenço de Oliveira

Prof. Walter Borzani

Prof. Rui Ribeiro Franco

Prof. Theodoreto H.I. de Arruda Souto

} pela USP

} pela CNEN

Divisões Didático-Científicas:

Div. de Física Nuclear: Prof. Marcello D.S. Santos

Div. de Engenharia Nuclear: Prof. Pedro Bento de Camargo

Div. de Ensino e Formação: Prof. Luiz Cintra do Prado
(licenciado)

Div. de Radioquímica: Prof. Fausto Walter de Lima

Div. de Radiobiologia: Prof. Rômulo Ribeiro Pieroni

Div. de Metalurgia Nuclear: Prof. Tharcísio D.S. Santos

Div. de Engenharia Química: Prof. Kazimiers J.Brill

de la décroissance d'isotopes radioactifs comportant plusieurs périodes. Ce programme comporte les particularités suivantes: 1) nombre maximum de points expérimentaux 200; 2) nombre maximum d'exponentiels 10; 3) les points doivent être répartis uniformément dans le temps. On considère qu'il n'y a pas d'erreurs sur le temps.

Ce rapport utilise la méthode des moindres carrés décrit par Keepin⁽¹⁾. Le programme est basé sur celui de Moscati⁽²⁾.

ABSTRACT

This program has been often used in analysis of decay curves coming from pulsed neutron experiments performed at the Instituto de Energia Atômica.

These decay curves are fitted by a linear combination of exponentials plus a constant background.

The same program may be used to study the decay of any mixture of radioactive isotopes, with the following restrictions; 1) the maximum number of experimental points is 200; 2) the maximum number of exponentials is 10 and; 3) the points are equally spaced on the time axis, which is considered free of errors.

The present work uses the least squares method described by Keepin⁽¹⁾. The program is based on Moscati's program⁽²⁾.

I - Teoria

O problema consiste em determinar a curva do tipo:

$$Y(t) = A_0 + \sum_{j=1}^k A_j \exp(-B_j t) \quad (\text{II-1})$$

que melhor se aproxima de uma série de dados experimentais $Y'(t)$.

Para isto procura-se tornar mínima a função F definida do seguinte modo:

$$F = \sum_{i=1}^n W_i \left[Y'(t_i) - Y(t_i) \right]^2 \quad (\text{II-2})$$

onde, W_i é o peso de cada medida e vale $1/\sigma_{y_i}^2$, ou seja, o inverso dos quadrados dos desvios médios quadráticos. A solução do problema é obtida desenvolvendo-se a função $Y(t)$ em série de Taylor até 1ª. ordem, num entôrno de valores aproximados A_{j_0} e B_{j_0} de A_j e B_j , determinados previamente por análise gráfica. Dêste modo F passa a ser uma função linear dos acréscimos $\Delta A_j = A_j - A_{j_0}$ e $\Delta B_j = B_j - B_{j_0}$. Para se determinar os valores de ΔA_j e ΔB_j que tornam mínima a função F impõe-se que:

$$\frac{\partial F}{\partial A_{j_0}} = \frac{\partial F}{\partial B_{j_0}} = 0 \quad (\text{II-3})$$

Desta forma obtêm-se 2 $k+1$ equações a 2 $k+1$ incógnitas.

Determinados ΔA_j e ΔB_j faz-se $A_j = A_{j_0} + \Delta A_j$ e $B_j = B_{j_0} + \Delta B_j$. A_j e B_j assim determinados são agora usados como valores iniciais para se obter uma melhor aproximação. Procedem-se a sucessivas iterações obtendo-se para cada parâmetro uma sucessão que converge para o valor que melhor o representa, de acordo com o critério dos mínimos quadrados.

Devido ao fato de a função F haver sido desenvolvida apenas até a 1ª. ordem deve-se evitar valores de ΔA_j que excedam 10% (é um critério) de A_{j_0} . Usa-se então a expressão de amortecimento:

$$\overline{\Delta A_j} = \left[\frac{\Delta A_j}{1 - 100 \left(\frac{\Delta A_j}{A_{j_0}} \right)^2} \right]^{1/2} \quad (\text{II-4})$$

Um parâmetro importante no ajuste das curvas é a variância

ponderada dos pontos experimentais em relação à curva calculada

$$S^2 = \frac{1}{n - g} \sum_{i=1}^n w_i \left[Y'(t_i) - Y(t_i) \right]^2$$

onde n é o número de pontos e g o número de parâmetros que estão sendo determinados ($2K+1$). Quando $g \ll n$, S^2 deve ser próximo da unidade quando se chega a um ajuste aceitável.

As varianças em A_j e B_j são dadas por

$$S_{A_j}^2 = C_{jj} S^2 \quad \text{e} \quad S_{B_j}^2 = C_{j+k, k+j} S^2$$

onde os C_{jj} representam os elementos da diagonal principal da matriz inversa da matriz dos coeficientes de ΔA_j e ΔB_j .

Moscatti⁽²⁾ dá vários critérios para se interromper o processo de iterações sucessivas:

- 1) Para o bom ajuste de uma curva após certo número de iterações S^2 deve decrescer até um valor próximo da unidade e não mais variar de iteração para iteração, do mesmo modo que os parâmetros calculados; os desvios sobre os parâmetros devem ser pequenos em comparação com eles.
- 2) Se, após o estacionamento dos valores mencionados acima, o valor de S^2 se mantiver superior à unidade pode-se supor que o número de parâmetros escolhidos é pequeno e deve-se tentar uma nova decomposição da curva com k maior.
- 3) Se o valor de S^2 permanece próximo à unidade e os desvios dos parâmetros são grandes comparados a eles pode-se supor que a estatística dos dados não permite uma conclusão segura quanto ao número de parâmetros escolhidos que deve ser considerado excessivo.

A principal diferença entre este programa e o de Moscatti é que, no presente caso, se tem, além da combinação linear de exponenciais, uma componente contínua. Porém, o programa de Moscatti é mais maleável pois faz também a análise de dados tomados em intervalos não consecutivos e não necessariamente iguais, o que não é possível no presente caso. Além disso, os erros nas contagens são dados a critério do experimentador ao passo que aqui se considera sempre o erro estatístico.

II - Equivalência dos símbolos em Fortran

São dados neste tópico os símbolos que representam alguns valores principais do cálculo e especialmente aqueles que aparecem como entrada e saída do programa. Devido a limitações da memória do computador alguns deles são usados mais de uma vez, mas aparecem aqui na ordem em que são usados no programa.

<u>Notação Fortran</u>	<u>Notação da Teoria</u>	
N1	n	número de pontos experimentais usados
M1	k	número de exponenciais
Y(J)	$Y_i'(t)$	dados experimentais (Contagem/tempo)
X(M)	A_j	atividades iniciais
X(MLM)	B_j	constante de decaimento
X(M12+1)	A_0	componente contínua (B.G.)
U	-	largura de canal
F	t_1	tempo
EM	$Y(t_{1,2})$	ponto da curva calculada
S2	S^2	variações ponderada dos pontos experimentais em relação a curva calculada
ET1	$\hat{\sigma}_{A_j}$	erro nas atividades
TM	$\hat{\sigma}_{B_j}$	erro nas constantes de decaimento
ET1	$\hat{\sigma}_{A_0}$	erro no "back ground"

III - Andamento do Programa. Entrada e Saída de Dados

Número máximo de pontos experimentais analisáveis por ês
te programa:

NI MAX = 200

Número máximo de exponenciais

M1 MAX = 10

Os dados de entrada são perfurados em cartões IBM, a par
tir da primeira coluna do cartão e sem coluna de separação entre
dois dados.

Sua ordem e formatos são os seguintes:

1) no 1º cartão tem-se, no formato I4, I3, E14.8:

n k U

2) nos n/7 cartões seguintes estão os pontos da curva ex
perimental (7 pontos por cartão), cada ponto no forma-
to F10.0:

Y(1)	Y(2)	Y(3)	Y(4)	Y(5)	Y(6)	Y(7)
Y(8)
.
.
Y(n-6)	Y(n)

3) depois tem-se k+1 cartões com os seguintes dados (no
formato E14.8):

A ₁	B ₁
.	.
.	.
.	.
A _K	B _K
A ₀	

Com estes dados o computador faz iteração e, ao terminá-la, são impressos pela máquina de escrever os valores:

$$IT = . . . \quad S2 = . . .$$

(nos formatos 13 e E14.8 respectivamente).

Para iniciar uma nova iteração basta comprimir a tecla "START" no painel. Após a convergência de S2, para se ter os valores dos parâmetros, deve-se ligar o switch 2 antes de nova iteração. A saída será então:

IT = . . .	S2 = . . .		
A	EA	L	EL
A ₁	σ _{A₁}	B ₁	σ _{B₁}
.	.	.	.
.	.	.	.
A _k	σ _{A_k}	B _k	σ _{B_k}
A _o	σ _{A_o}		

Para terminar o cálculo e entrar com novos dados liga-se o "Switch" 3, quando o computador estiver na instrução "PAUSE".

Se, com os parâmetros obtidos, se quiser construir a curva teórica, liga-se "switch" 1 (e não o 3). São então perfurados n cartões cada um deles contendo:

$$t_1 \quad Y'(t_1) \quad Y(t_1) \quad (3E 14.8)$$

Isto feito o computador fica posicionado para receber novos dados.

ENTRADA DE DADOS

MQCLE

n nº de pontos experimentais (max. 200)

t nº de exponenciais

Y(J) contagens no canal J

A_j atividades iniciais

B_j constantes de decaimento

1º Cartão

n,	K,	U
I4	I3	E14.8

variável
formato

n/7 Cartões

Y(1), Y(2)	Y(7)
F10.0, F10.0	F10.0

K Cartões

A _j	B _j
E14.8	E14.8

último
cartão

A ₀	(componente contínua)
E14.8	

C MÍNIMOS QUADRADOS PARA COMBINAÇÃO LINEAR DE EXPONENCIAIS

C TEA MC/JMC

C NÚMERO MÁXIMO DE PONTOS N1MAX=200 NÚMERO DE EXPONENCIAIS

C M1MAX=10

C ALIMENTAÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA 1. N1,M1 FORMAT I4,I3

C LARGURA DE CANAL=U FORMAT E14.8 / 2.7Y(J) FORMAT 7F10.0

C 3.ATIVIDADES=X(M), DECAYS=X(M1M) FORMAT E14.8, E14.8

500 DIMENSION Y(200),A(21,21),A1(21),X(21),E(10)

READ 110, N1, M1, U

110 FORMAT (I4,I3,E14.8)

130 FORMAT (7F10.0)

DO 300 J=1, N1, 7

300 READ 130, Y(J), Y(J+1), Y(J+2), Y(J+3),Y(J+4),Y(J+5),Y(J+6)

M12=M1+M1

M3=M12+1

M=N1-M12-1

FIMN=M

FIMN=1./FIMN

DO 330 M=1, M1

M1M=M1+M

330 READ 190,X(M),X(M1M)

READ 190,X(M12+1)

NIT=0

1 NIT=NIT+1

DO 350 M=1, M3

DO 340 N=1, M3

340 A(M,N) = 0.0

350 A1(M) = 0.0

C CÁLCULO DA MATRIZ DOS COEFICIENTES

DO 400 J=1, N1

M1M=J-1

F=MLM

F=F^XU

SUM = X(M12+1)

DO 380 M=1, M1

MLM=ML+M

E(M)=-X(MLM)^XF

IF(E(M)+90.) 360,360,370

360 E(M)=0.0

GO TO 380

370 E(M)=EXP(E(M))

380 SUM=SUM+E(M)^XX(M)

A1(M12+1)=A1(M12+1)+1.-SUM/Y(J)

A(M12+1,M12+1)=A(M12+1, M12+1) + 1./Y(J)

DO 400 M=1,M1

MLM=ML+M

EM=E(M)/Y(J)

TM= F^XX(M)

DO 390 N=1,M1

MLN=ML+N

EN=EM^XE(N)

ET1=EN^XF

ETN=ET1^XX(N)

A(M,N)=A(M,N) + EN

A(MLM,N)=A(MLM,N) + EN^XTM

A(M,MLN)=A(M,MLN) - ETN

390 A(MLM,MLN)=A(MLM,MLN)-TM^XETN

A(M,M12+1)= A(M,M12+1) + EM

A(MLM,M12+1)=A(MLM,M12+1) + EM^XTM

EN = EM^X (Y(J) - SUM)

A1(M) = A1(M) + EN

400 A1(MLM) = A1(MLM) + EN^X TM

DO 10 M=1, M1

MLM=M+M1

```

A(M12+1, M1M) = -A(M1M, M12+1) -
10 A(M12+1, M) = A(M, M12+1)
C INVERSÃO DA MATRIZ DOS COEFICIENTES
DO 460 M=1, M3
SUM=A(M,M)
A(M,M) = 1.
DO 430 J=1, M3
430 A(M,J) = A(M,J)/SUM
DO 460 N=1, M3
IF(N-M)440,460,440
440 SUM=A(N,M)
A(N,M) = .0
DO 450 J=1, M3
450 A(N,J)=A(N,J)-SUM*A(M,J)
460 CONTINUE
C CÁLCULO DAS RAÍZES
DO 471 J=1, M3
EM = . 0
DO 470 M=1, M3
470 EM=EM+A1(M)*A(J,M)
EN=EM/X(J)
471 X(J)=X(J)+EM/SQRT(1.+100.*EN*EN)
C CÁLCULO DOS ERROS
EN=.0
480 DO 530 J=1, N1
M1M=J-1
F=M1M
F=F*U
EM=X(M12+1)
DO 490 M=1, M1
M1M=M1+M
SUM=X(M1M)*F
IF(90.-SUM)490,490,485

```

```
485 EM=EM+X(M)MEXP(-SUM)
490 CONTINUE
    IF(SENSE SWITCH 1)510,520
510 PUNCH 190,F,Y(J),EM
520 TM=Y(J)-EM
530 EN=EN*(TMMTM)/Y(J)
    IF(SENSE SWITCH 1) 580, 540
540 EN=ENMFIMN
    PRINT 180, NIT, EN
180 FORMAT (3HIT=, I3,7X, 3HS2=, E14.8)
    IF (SENSE SWITCH 2) 700, 710
700 PRINT 200
200 FORMAT (6X, 1HA, 12X, 3HE A,12X, 1HL, 12X, 3HE L)
    DO 560 N=1, M1
    MLN=M1+N
    ET1=SQRT (ENMA(N,N))
    TM=SQRT(-(ENMA(MLN,MLN)))
560 PRINT 190, X(N), ET1,X(MLN), TM
190 FORMAT (4E14.8)
    ET1 = SQRT(ENMA(M12 + 1, M12 + 1))
    PRINT 190, X(M12+1), ET1
710 PAUSE
    IF(SENSE SWITCH 3) 580, 720
C PARA TERMINAR A ITERAÇÃO COLOCAR SW1 EM ON.
720 IF(SENSE SWITCH 1) 480,1
580 PAUSE
    GO TO 500
    END
```

BIBLIOGRAFIA

(1) - G.R. Keepin, J. Nuclear Energy, 7, 13, 1958

(2) - Moscati, Giorgio - Neutrons atrasados emitidos na foto-
fissão do U^{238} e Th^{232} , Tese, 1962.

.....