Programas en Fortran 77

Fernando Parra

10 de mayo de 2014

1. Análisis estadístico de datos

El objetivo es calcular la media, mediana, moda, desviación estándar, número óptimo,

g

2. Regresión Lineal por mínimos cuadrados

El objetivo de este problema es preparar un programa para calcular los parámetros del ajuste de n datos (x_i, y_i) a una recta $y = ax + b$. Las fórmulas necesarias son:

$$\begin{aligned}
a &= \frac{1}{D}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \langle x\rangle)y_i \\
b &= \langle y\rangle - a\,\langle x\rangle \\
\langle x\rangle &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \\
\langle y\rangle &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i \\
\epsilon_a &\approx \sqrt{\frac{1}{D}\frac{\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n-2}} \\
\epsilon_b &\approx \sqrt{\left(\frac{1}{n} + \frac{\langle x\rangle^2}{D}\right)\frac{\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n-2}} \\
d_i &= y_i - ax_i - b \\
D &= \sum_{i=1}^{n}(x_i - \langle x\rangle)^2
\end{aligned}$$

Para compactar los cálculos, se han hecho las siguientes agrupaciones

$$\begin{aligned}
D &= \sum_i x_i^2 - \frac{(\sum_i x_i)^2}{n} \\
\langle x\rangle &= \frac{1}{n}\sum_i x_i \\
\langle y\rangle &= \frac{1}{n}\sum_i y_i \\
a &= \frac{1}{D}\left(\sum_i x_i y_i - \langle x\rangle \sum_i y_i\right) \\
b &= \langle y\rangle - a\,\langle x\rangle \\
y_{teo,i} &= ax_i - b \\
d_i &= y_i - y_{teo,i}
\end{aligned}$$

A continuación el código utilizado

```
!
! NOMBRE: ajuste.f
! AUTOR: Fernando Parra
! DESCRIPCION: Regresion lineal de n parejas de datos
! FECHA: 30/04/14 22:18
!
      REAL D
      REAL X(1000),Y(1000),YT(1000),DI(1000)
      SUMX = 0.0
      SUMY = 0.0
      SUMXX = 0.0
      SUMXY = 0.0
      SUMDI = 0.0
      WRITE(*,100)
      WRITE(*,200)
      WRITE(*,250)
      OPEN(1,FILE='datos.dat',STATUS='OLD')
      OPEN(2,FILE='datos.out',STATUS='UNKNOWN')
      READ(*,*)N

      DO I = 1, N
      READ(1,*)X(I),Y(I)
      END DO

      CLOSE(1)

      DO I = 1, N
      SUMX = SUMX + X(I)
      SUMY = SUMY + Y(I)
      SUMXX = SUMXX + X(I)**2
      SUMXY = SUMXY + X(I)*Y(I)
      END DO

      D = SUMXX - (SUMX**2)/REAL(N)
      XMED = SUMX/REAL(N)
      YMED = SUMY/REAL(N)
      A = (SUMXY - XMED*SUMY)/D
      B = YMED - A*XMED

      DO I=1,N
      YT(I) = A*X(I) + B
      DI(I) = Y(I) - YT(I)
      SUMDI = SUMDI + (DI(I))**2
      END DO

      EA = SQRT((1.0/D)*(SUMDI/(REAL(N)-2.0)))
      EB = SQRT(((1.0/REAL(N))+(XMED**2/D))*(SUMDI/(REAL(N)-2.0)))
      WRITE(2,350) N

      DO I =1, N
      WRITE(2,300) X(I),YT(I)
      END DO

      WRITE(*,*)'La recta es: y =(',A,'+-',EA,')','x + (',B,'+-',EB,')'
100   FORMAT (20X,'AJUSTE DE PARES DE DATOS A UNA RECTA')
```

```
200   FORMAT (20X,36('*'))
250   FORMAT (10X,'dime el numero EXACTO de datos N=')
300   FORMAT (F9.3,1X,F9.3)
350   FORMAT ('#',' Ajuste de',I3,' datos a una recta')
      CLOSE(2)
      END
```

3. Regresión Lineal considerando los errores

Al igual que en el problema anterior, se ajustará un conjunto de datos a una recta $y = ax + b$, ahora considerando los las incertidumbres de cada medición.

3.1. Errores solo en Y (ΔY)

Si solo tenemos errores en una sola variable usamos las siguientes ecuaciones, cosiderando $\sigma_i = \Delta y_i$.

$$\begin{aligned}
a &= \frac{Cov(yx)}{S_x^2} \\
b &= \langle y \rangle - a \langle x \rangle \\
R &= \frac{Cov(yx)}{S_x \cdot S_y} \\
\langle x \rangle &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \\
\langle y \rangle &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i \\
\left\langle x^2 \right\rangle &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot x_i^2 \\
Cov(yx) &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i (x_i - \langle x \rangle)(y_i - \langle y \rangle) \\
S_x^2 &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i (x_i - \langle x \rangle)^2 \\
w_i &= \frac{1}{\sigma_i^2} \\
W &= \sum_{i=1}^{n} w_i
\end{aligned}$$

Donde a es la pendiente, b es la ordenada y R y $Cov(yx)$ son los coeficientes de de correlación.
Para calcular los errores de la pendiente y de la ordenada usamos:

$$\begin{aligned}
\Delta a &= \sqrt{\frac{\chi_N^2}{(N-2) S_x^2}} \\
\Delta b &= \Delta a \left\langle x^2 \right\rangle \\
\chi_N^2 &= \frac{1}{W} \sum_{i=1}^{n} w_i (y_i - y(x_i))^2
\end{aligned}$$

3.2. Errores en Y y X (ΔY, ΔX)

Si tenemos errores en las dos variables hacemos la siguiente corrección a las ecuaciones anteriores. [1]

$$w_i = \frac{w_{x,i} \cdot w_{y,i}}{a^2 \cdot w_{y,i} + w_{x,i}} \tag{1}$$

De esta forma, para obtener w_i necesitamos a y para obtener a necesitamos w_i, por esta razón procederemos de forma iterativa, cosiderando primero el error en y.
A continuación el código utilizado para los dos casos

```
!
! NOMBRE: ajuste_error.f
! AUTOR: Fernando Parra
! DESCRIPCION: Regresion lineal de n parejas de datos con errores
! FECHA: 30/04/14 22:18
!
      PROGRAM REGRESION
      IMPLICIT NONE

      INTEGER  N,I,J
      DOUBLEPRECISION SUMEY,WY,SDX,YXCOV,A,B,W,CHI2,ERA,ERB
      DOUBLEPRECISION Y(1000),EY(1000),X(1000),EX(1000)
      DOUBLEPRECISION WIX(1000),WIY(1000),WI(1000)
      SUMEY = 0.0

      OPEN(1,FILE='datos.dat')
      READ(1,*) N

      DO I=1,N
      READ(1,*) Y(N),EY(N),X(N),EX(N)
      END DO

!   Primera iteracion
      DO I=1,N
      SUMEY = SUMEY + 1.0/(EY(I)**2.0)
      WIY(I) = 1.0/(EY(I)**2.0)
      WIX(I) = 1.0/(EX(I)**2.0)
      ENDDO

      CALL CD(N,X,Y,WIY,SUMEY,A,B)
      WRITE(*,*) 'Primera iteracion'
      WRITE(*,*) A,B

!   Siguientes iteraciones
      DO I=1,100
      W = 0.0
      DO J=1,N
      WI(J)=(WIX(J)*WIY(J))/((A**2.0)*WIY(J)+WIX(J))
      W = W + WI(J)
      ENDDO

      CALL AJUSTE(N,X,Y,WI,W,A,B)

!   Errores en a y b

      CALL ERROR(N,A,B,X,Y,WI,W,ERA,ERB)

!   EN PANTALLA

      WRITE(*,*) 'El ajuste lineal es:',N
      WRITE(*,*) 'f(x)=',A,'*x+',B
      WRITE(*,*)'PENDIENTE', A,'+/-',ERA
      WRITE(*,*)'ORDENADA ',B,'+/-',ERB
```

```
      ENDDO
      CLOSE(1)
      END PROGRAM
! ---------------------------------------------------------
! ---------------------------------------------------------
      SUBROUTINE AJUSTE(N,X,Y,WI,W,A,B)
      IMPLICIT NONE

      INTEGER N,I
      DOUBLEPRECISION YXCOV,SDX,W,XMED,YMED,A,B,SDY
      DOUBLEPRECISION X(N), Y(N), WI(N)
      XMED = 0.0
      YMED = 0.0
      SDY = 0.0
      SDX = 0.0
      YXCOV = 0.0

      DO I = 1, N
      XMED = XMED + WI(I)*X(I)/W
      YMED = YMED + WI(I)*Y(I)/W
      ENDDO

      DO I = 1, N
      SDX = SDX + (WI(I)* (X(I)-XMED)**2.0)/W
      SDY = SDY + (WI(I)* (Y(I)-YMED)**2.0)/W
      YXCOV = YXCOV + (WI(I)*(X(I)-XMED)*(Y(I)-YMED))/W
      ENDDO

      A = YXCOV/SDX
      B = YMED - A*XMED
      RETURN
      END
! ---------------------------------------------------------
      SUBROUTINE ERROR(N,A,B,X,Y,WI,W,ERA,ERB)
      IMPLICIT NONE

      INTEGER N,I
      DOUBLEPRECISION CHI2, SDX, X2MED, XMED
      DOUBLEPRECISION A,B,W,ERA,ERB
      DOUBLEPRECISION WI(N),X(N),Y(N)
      XMED=0.0
      CHI2=0.0
      SDX=0.0
      X2MED=0.0

      DO I = 1, N
      XMED = XMED + X(I)*(WI(I)/W)
      ENDDO

      DO I = 1, N
      CHI2 = CHI2 + (WI(I)*(Y(I)-A*X(I)-B)**2.0)/W
      SDX = SDX + (WI(I)* (X(I)-XMED)**2.0)/W
      X2MED = X2MED + WI(I)*(X(I)**2)/W
      ENDDO
```

```
ERA = SQRT(CHI2/(REAL(N-2)*SDX))
ERB = ERA*SQRT(X2MED)

RETURN
END
```

Referencias

[1] "Simple method for fitting data when both variables have uncertaintie" D. Barker and L.M. Diana Am. J. Phys. 42, 224 (1974).