COMITATO NAZIONALE PER L'ENERGIA NUCLEARE
Laboratori Nazionali di Frascati

LNF-62/27

G. Fronterotta e A. Rambaldi:

PROGRAMMA DI CALCOLO DI UN BEST-FIT.

Nota interna: n° 130
17 Aprile 1962

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

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

LNF-62/27

Nota interna: n° 130
17 Aprile 1962

G. Fronterotta[x] e A. Rambaldi[x]:
PROGRAMMA DI CALCOLO DI UN BEST-FIT.

Si presenta un programma, compilato in linguaggio Fortran e di utilità del tutto generale, per il calcolo di curve che meglio approssimino curve sperimentali con il metodo dei minimi quadrati.

Le suddette curve sono calcolate in serie di potenze. Partendo da un ordine minimo (≥ 1) del polinomio, codesto programma permette di aumentare successivamente lo ordine di esso di una unità.

Il calcolo si arresterà quando l'ordine del polinomio raggiunge un valore fissato inizialmente a piacere.

A causa del grande numero di posizioni di memoria occupate, l'ordine massimo della curva, previsto per l'elaboratore elettronico 1620 I.B.M., nell'ipotesi di avere al massimo 20 punti sperimentali, è circa 10 $\div$ 11.

Tale limitazione non sussiste praticamente più quando si abbia la possibilità di far uso di un calcolato-

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

re più potente e più capace quale è, per esempio, il 704 I.B.M. Con tale calcolatore l'ordine n del polinomio può raggiungere i limiti critici del metodo di risoluzione usato ($\sim$20), poichè esistono dei sottoprogrammi che permettono di eseguire il calcolo in "doppia precisione" (cioè con un numero doppio di cifre significative).

Come detto più sopra, abbiamo fatto uso del metodo dei minimi quadrati, del quale riassumiamo brevemente formule e notazioni.

X_i	variabili indipendenti
Y_i	punti sperimentali
ξ_i	errori statistici
$F(X_i)$	punti calcolati
N	numero dei punti sperimentali
n	ordine del polinomio

Con le precedenti notazioni si ha (1)

$$F(X_i) = \sum_{0\,k}^{n} A_k X_i^k$$

dove gli A_k sono le soluzioni del seguente sistema

$$\sum_{0\,k}^{n} H_{l,k} A_k = B_l$$

se $H_{k,l}$ è la matrice dei coefficienti del sistema e B_l sono i termini noti espressi dalle formule

$$H_{k,l} = \sum_{1\,i}^{N} \frac{X_i^{k+l}}{\xi_i^2} \qquad B_l = \sum_{1\,i}^{N} \frac{Y_i X_i^l}{\xi_i^2}$$

e si ha ancora, come formula risolutiva del sistema

$$A_l = \sum_{0\,k}^{n} \left[H_{k,l}\right]^{-1} B_k$$

(1) - P. Cziffra and M.J. Moravcsik: A practical guide to the method of least squares, UCRL - 8523 - Rev.(1959)

e l'errore su codesti coefficienti è dato da

$$(\Delta A_k)^2 = [H_{k,k}]^{-1} \frac{1}{N-n-1} \sum_{1}^{N} {}_i \frac{[F(x_i)-y_i]^2}{\xi_i^2}$$

mentre l'errore su di un qualsiasi punto calcolato è dato da

$$[\Delta F(x_i)]^2 = \left[\sum_{0}^{n}{}_k \sum_{0}^{n}{}_e [H_{k,e}]^{-1} x_i^{k+e}\right] \frac{1}{N-n-1} \sum_{1}^{N} {}_i \frac{[F(x_i)-y_i]^2}{\xi_i^2}$$

In conclusione le precedenti sono le formule essenziali per l'esecuzione di un qualsiasi calcolo del genere.

Il programma si articola, come il solito, in tre passi:

a) ingresso dei dati

b) elaborazione dei medesimi

c) uscita dei risultati

Al punto a) il programma attende i dati di ingresso seguenti:

ordine minimo del polinomio
ordine massimo del polinomio
numero dei punti sperimentali
} in virgola fissa

dopodichè la macchina calcolatrice legge da nastro, precedentemente preparato, le X_i, Y_i e ξ_i.

Al punto b) segue l'elaborazione che sarà più comprensibile dalla lettura del programma e che ai fini del calcolo non è necessario conoscere.

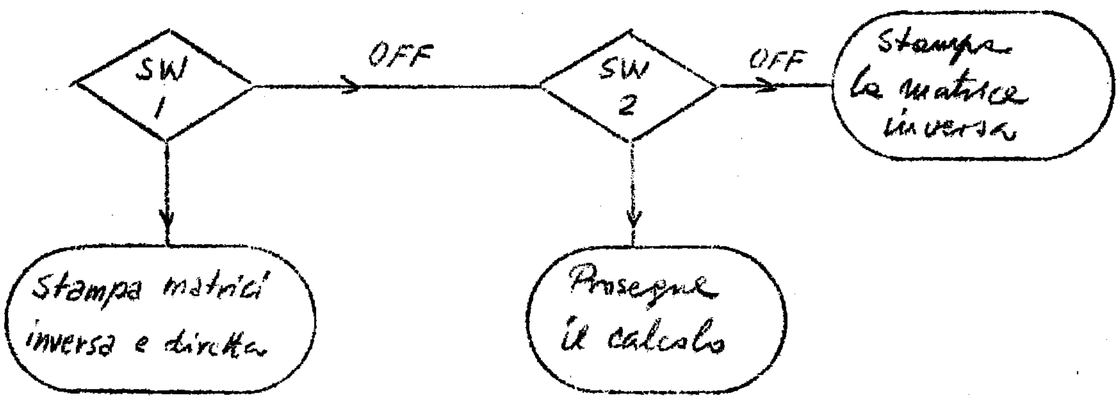
Dobbiamo però qui aggiungere che per l'esecuzione dell'inversione della matrice ci siamo serviti del programma di Jack Burgeson - Dave Anderson - Akron Office.

c) l'uscita dei dati è nella successione seguente

- ordine del polinomio

- matrice diretta e matrice inversa (tale uscita è condizionata dal posizionamento degli switches)
- solo matrice inversa (anche tale stampa è condizionata dagli switches)
- termini noti del sistema e verifiche
- coefficienti del polinomio e loro errori
- punti sperimentali, punti calcolati, errori sui punti calcolati, e pesi statistici ($1/\xi_i^2$)
- numero dei gradi di libertà (MN), somma dei quadrati dei residui (QN), il rapporto QN/MN, e la radice quadrata del precedente.

Lo schema del posizionamento degli switches è il seguente:



Schematizziamo, per semplicità, le uscite

n	ordine del polinomio		
h_{11}	h_{11}^{-1}	1	1
h_{12}	h_{12}^{-1}	1	2
⋮	⋮	⋮	⋮
h_{1n}	h_{1n}^{-1}	1	n
⋮	⋮	⋮	⋮

h_{nn}	h_{nn}^{-1}	n	n

oppure

h_{11}^{-1}	1	1	
h_{12}^{-1}	1	2	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
h_{nn}^{-1}	n	n	
b_k	b_k^1 (verifiche del sistema)		k
a_k	Δa_k	k	
Y_i	$f(x_i)$	$\Delta f(x_i)$	$1/\xi_i^2$
MN	QN	QN/MN	$\sqrt{QN/MN}$

Presentiamo infine il programma in linguaggio Fortran come è stato da noi usato, e con successo:

```
C       PROGRAMMA BEST FIT
C   LO SW.1 ON VOLENDO STAMPARE LE DUE MATRICI
C   SW.1 OFF-SW.2 OFF VOLENDO STAMPARE SOLO LA MATRICE INVERSA
C   SW.1 OFF-SW.2 ON SE NON SI VOGLIONO MATRICI
      ACCEPT,N,NM,M
      DIMENSION X(20),Y(20),CSI(20),PHI(10,20),B(10),A(10),
                H(10,10)
      DIMENSION ALPA(10),F(10,10),FN(20),DFN(20)
      DO 50 I=1,M
      READ,X(I),Y(I),CSI(I)
   50 CSI(I)=1./(CSI(I)°CSI(I))
  100 N1=N+1
      DO 2 I=1,M
      DO 2 K=1,N1
      J=K-1
      IF(J)10,10,400
   10 PHI(1,I)=1.
      GO TO 2
  400 PHI(K,I)=X(I)°°J
    2 CONTINUE
      DO 85 L=1,N1
      DO 85 K=1,N1
      SUM=0.0
      DO 4 I=1,M
    4 SUM=SUM+PHI(L,I)°PHI(K,I)°CSI(I)
   85 H(K,L)=SUM
```

```
      DO 666 K=1,N1
      DO 666 L=1,N1
  666 F(K,L)=H(K,L)
      DO 314 K=1,N1
      COM=F(K,K)
      F(K,K)=1.
      DO 311 J=1,N1
      SUM=F(K,J)/COM
  311 F(K,J)=SUM
      DO 314 I=1,N1
      IF(I-K)312,314,312
  312 COM=F(I,K)
      F(I,K)=0.0
      DO 313 J=1,N1
      SUM=F(I,J)-COM°F(K,J)
  313 F(I,J)=SUM
  314 CONTINUE
      DO 5 L=1,N1
      SUM=0.0
      DO 22 I=1,M
   22 SUM=SUM+PHI(L,I)°Y(I)°CSI(I)
    5 B(L)=SUM
      DO 6 K=1,N1
      SUM=0.0
      DO 35 L=1,N1
   35 SUM=SUM+F(K,L)°B(L)
    6 A(K)=SUM
      QN=0.0
      DO 8 I=1,M
      SUM=0.0
      DO 7 K=1,N1
    7 SUM=SUM+A(K)°PHI(K,I)
      FN(I)=SUM
    8 QN=QN+(FN(I)-Y(I))°(FN(I)-Y(I))°CSI(I)
      MN=M-N-1
      ZN=MN
      WN=QN/ZN
      RWN=SQR(WN)
      DO 30 K=1,N1
      IF(F(K,K))333,333,444
  333 ALPA(K)=WN°F(K,K)
      GO TO 30
  444 ALPA(K)=SQR(WN°F(K,K))
   30 CONTINUE
      DO 555 I=1,M
      SUM2=0.0
      DO 34 K=1,N1
      SUM=0.0
```

```
      DO 33 L=1,N1
   33 SUM=SUM+F(K,L)°PHI(K,I)°PHI(L,I)
   34 SUM2=SUM2+SUM
      IF(SUM2)888,888,999
  888 DFN(I)=SUM2°WN
      GO TO 555
  999 DFN(I)=RWN°SQR(SUM2)
  555 CONTINUE
      IF(SENSE SWITCH 1)770,771
  771 IF(SENSE SWITCH 2)777,778
  778 DO 801 K=1,N1
      DO 801 L=1,N1
  801 TYPE,F(K,L),K,L
      GO TO 777
  770 DO 998 K=1,N1
      DO 998 L=1,N1
  998 TYPE,H(K,L),F(K,L),K,L
  777 DO 7777 K=1,N1
      SUM=0.0
      DO 7778 L=1,N1
 7778 SUM=SUM+H(K,L)°A(L)
 7777 TYPE,B(K),SUM,K
      DO 222 K=1,N1
  222 TYPE,A(K),ALPA(K),K
      DO 1111 I=1,M
 1111 TYPE,Y(I),FN(I),DFN(I),CSI(I)
      TYPE,MN,QN,WN,RWN
      N=N+1
      IF(N-NM)300,300,301
  300 TYPE,N
      GO TO 100
  301 STOP
      END
```