

Problema 1: Interpolación de Lagrange

Para este problema se optó por utilizar funciones ya implementadas de las bibliotecas de Python para obtener el polinomio interpolante de Lagrange. La función utilizada proviene de la biblioteca scipy y se denomina `scipy.interpolate.lagrange`¹.

Los datos utilizados para la interpolación fueron los provistos

$i =$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$E_i (MeV)$	0	25	50	75	100	125	150	175	200
$f(E_i) (MeV)$	10.6	16.0	45.0	83.5	52.8	19.9	10.8	8.25	4.7
$\sigma_i (MeV)$	9.34	17.9	41.5	85.5	51.5	21.5	10.8	6.29	4.14

mismos que fueron escritos en ordenador en el archivo nombrado `BretWeigner.txt`².

El polinomio interpolante resultante de la rutina de scipy se muestra junto con los datos provistos en la Figura 1. Se puede observar que, en efecto, el polinomio pasa por todos los puntos $(E_i, f(E_i))$, $i = 1, \dots, 9$; adicionalmente, se graficaron las barras de error³ correspondientes a los valores de $f(E_i)$.

Como se puede observar en la Figura 1, el polinomio interpolante de Lagrange presenta oscilaciones características de este tipo de método de interpolación entre los nodos (puntos de interés). La extrapolación de datos utilizando este polinomio no es recomendable porque, a pesar de que efectivamente cumple con la tarea de interpolar, no necesariamente representa la tendencia de los datos ocupados.

¹ Documentación de la interpolación de Lagrange, disponible en los siguientes sitios:

- <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.interpolate.lagrange.html>
- <https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/chapter17.04-Lagrange-Polynomial-Interpolation.html>

² Una referencia útil para leer archivos de texto con Numpy está disponible en:

<https://www.geeksforgeeks.org/numpy-loadtxt-in-python/>

³ La siguiente página incluye material útil sobre cómo graficar barras de error:

<https://www.geeksforgeeks.org/errorbar-graph-in-python-using-matplotlib/>

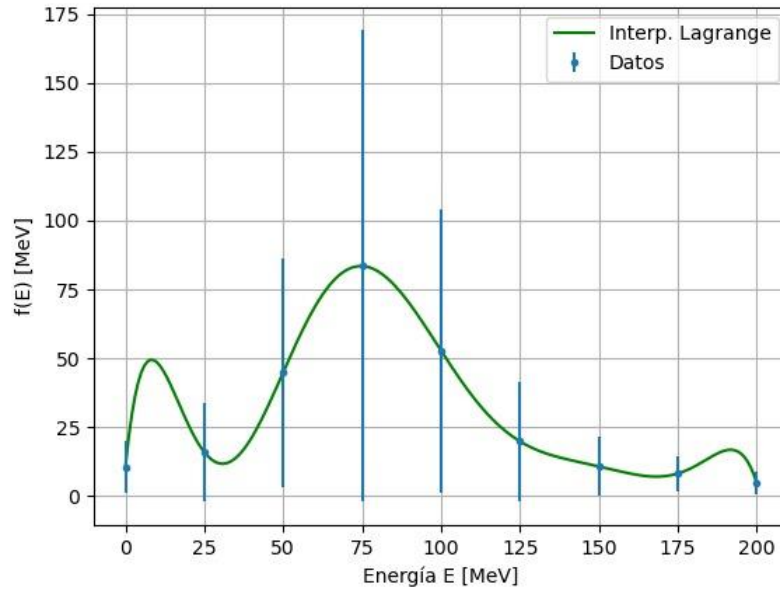


Figura 1. Datos de Breit-Weigner, graficados con sus incertidumbres, en conjunto con su polinomio interpolante de Lagrange.

Problema 2: Interpolación vía *splines* cúbicos

Se interpolaron los mismos datos del problema anterior pero ahora utilizando la rutina de interpolación por splines cúbicos de scipy denominada `scipy.interpolate.CubicSpline`⁴. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 2.

Recordemos que este tipo de interpolación funciona ajustando una serie de polinomios cúbicos entre cada par de puntos en conjunto con condiciones sobre sus derivadas, relacionadas con condiciones de continuidad y suavidad, lo que los hace una excelente opción para evitar comportamientos extraños como las oscilaciones de la interpolación de Lagrange.

⁴ La referencia de esta función está disponible en

<https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.interpolate.CubicSpline.html#scipy.interpolate.CubicSpline>

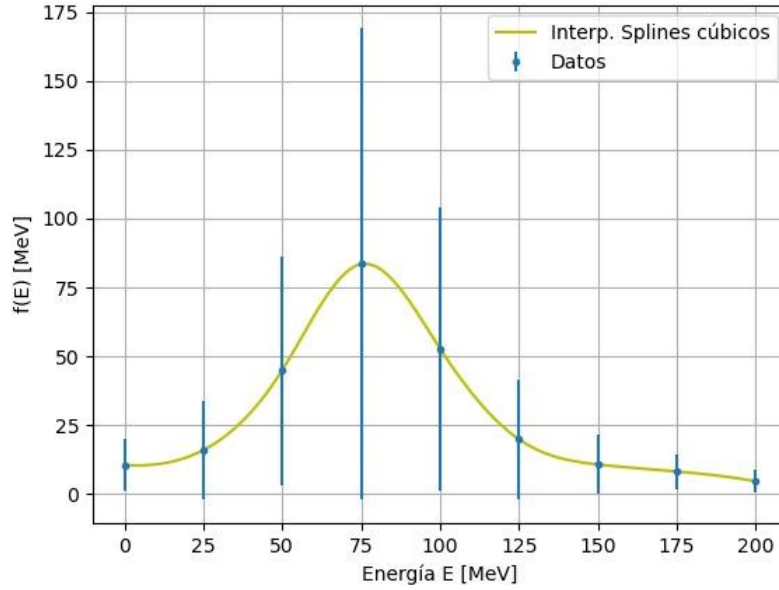


Figura 2. Datos de Breit-Weigner, graficados con sus incertidumbres, en conjunto con la interpolación vía splines cúbicos. Las características de suavidad que presenta este tipo de interpolación la hacen tener menos error que con la interpolación de Lagrange en cuanto a la tendencia de los datos.

Problema 3: Ajuste de la fórmula de resonancia de Breit-Wigner

Consideremos la fórmula de resonancia de Breit-Wigner, característica del fenómeno físico medido y reportado en la serie de datos de los ejercicios anterior:

$$f(E) = \frac{f_r}{(E - E_r)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}}$$

El problema consiste en determinar valores para los parámetros E_r , f_r y Γ a través del ajuste de los datos provistos por el método de mínimos cuadrados.

Para esto, considere renombrar los parámetros como

$$a_1 = f_r \quad a_2 = E_r \quad a_3 = \frac{\Gamma^2}{4} \quad x = E$$

de modo que la fórmula de Breit-Weigner se transforma en una función $g(x)$ que también depende de los a_1, a_2, a_3 :

$$g(x) = \frac{a_1}{(x - a_2)^2 + a_3}$$

que será la función de ajuste del método. En este caso se cuenta con las incertidumbres σ_i de cada par de datos $(E_i, f(E_i)) \rightarrow (x_i, y_i)$ para la variable y_i , es decir, se tienen puntos para el ajuste de la forma

$$(x_i, y_i \pm \sigma_i), \quad i = 1 \dots, n_{\text{datos}}, \quad n_{\text{datos}} = 9$$

Recordemos la definición de la función de optimización de ajuste χ^2 :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \left(\frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i} \right)^2, \quad \text{datos } \{a_1, a_2, a_3\} \text{ para } g(x)$$

Para minimizar esta función (objetivo del método de mínimos cuadrados) se requiere encontrar los valores de los parámetros a_1, a_2, a_3 para los cuales se tiene un punto extremo, es decir

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_m} = 0, \quad m = 1, \dots, 3$$

Aplicando la regla de la cadena sobre la definición de χ^2 se obtiene que esta condición extremal es equivalente a

$$\sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{\partial g(x_i)}{\partial a_m} = 0, \quad m = 1, \dots, 3$$

$$\frac{\partial g}{\partial a_1} = \frac{1}{(x - a_2)^2 + a_3}, \quad \frac{\partial g}{\partial a_2} = \frac{-2a_1(x - a_2)}{((x - a_2)^2 + a_3)^2}, \quad \frac{\partial g}{\partial a_3} = \frac{-a_1}{((x - a_2)^2 + a_3)^2}$$

De modo que se pueden definir a las funciones f_1, f_2, f_3 como

$$f_1(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{1}{(x_i - a_2)^2 + a_3}$$

$$f_2(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{-2a_1(x_i - a_2)}{((x_i - a_2)^2 + a_3)^2}$$

$$f_3(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{-a_1}{((x_i - a_2)^2 + a_3)^2}$$

para construir una función $\mathbf{f} = [f_1, f_2, f_3]^T$ tal que $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ de la que debemos encontrar valores específicos de a_1, a_2, a_3 para los cuales $\mathbf{f} = \mathbf{0}$, esto es, buscar las raíces de \mathbf{f} (equivalentemente, buscar las raíces de las tres funciones simultáneamente).

Para completar esta tarea se emplea el método de Newton-Raphson multivariable para la búsqueda de raíces. Este método aproxima de manera sucesiva valores de a_1, a_2, a_3 (en este caso) para los cuales $\mathbf{f}(a_1, a_2, a_3) = \mathbf{0}$ y está definido como

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}(\mathbf{x}_n) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_n)$$

donde

- \mathbf{x}_n representa un vector que contiene los mejores valores aproximados de los parámetros a_1, a_2, a_3 que son raíces de \mathbf{f}
- \mathbf{x}_{n+1} es la siguiente aproximación a la raíz de \mathbf{f}
- $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)$ representa la matriz Jacobiana de \mathbf{f} con respecto a los parámetros, evaluada en \mathbf{x}_n
- $\mathbf{f}(\mathbf{x}_n)$ es la función \mathbf{f} evaluada en \mathbf{x}_n

La primera aproximación a estos valores se debe proponer y se conoce como **semilla inicial**, denotada por \mathbf{x}_0 . Se sabe que esta semilla debe estar razonablemente cerca de la raíz que se quiere determinar, es decir, se deben proporcionar valores de a_1, a_2, a_3 que estén cercanos a cumplir dicho propósito, mismo que es ajustar mediante la función $g(x)$ a los datos provistos.

Entonces, con la finalidad de proporcionar una buena semilla inicial para el método, se optó por utilizar el software gráfico Geogebra para graficar adecuadamente los puntos provistos y graficar $g(x)$ para algunos valores de a_1, a_2, a_3 , como se muestra en la Figura 3.

Así, se proporcionó la semilla $\mathbf{x}_0 = [60000, 50, 700]^T$ y se implementó el método de Newton-Raphson multivariable para el cálculo de aproximaciones sucesivas con una tolerancia de error absoluto impuesta de 10^{-6} . Los valores ajustados y la gráfica de este último se muestran en la Figura 5.

Se obtuvieron los siguientes valores para los parámetros

$$a_1 = 70878.1926, \quad a_2 = 78.1875, \quad a_3 = 875.234$$

y recordando la relación de cada uno de ellos con los parámetros E_r, f_r y Γ se puede concluir que sus valores óptimos para el ajuste de los datos proporcionados son

$$f_r = 70,878.1926 \text{ [MeV}^2\text{]}, \quad E_r = 78.1875 \text{ [MeV]}, \quad \Gamma = 59.1687 \text{ [MeV]}$$

En un problema anterior se menciona que los valores predichos por soluciones teóricas corresponden a

$$E_r = 78 \text{ [MeV]}, \quad \Gamma = 55 \text{ [MeV]}$$

de modo que podemos concluir que los resultados obtenidos a partir del ajuste de los datos concuerdan de buena manera con los resultados teóricos proporcionados.

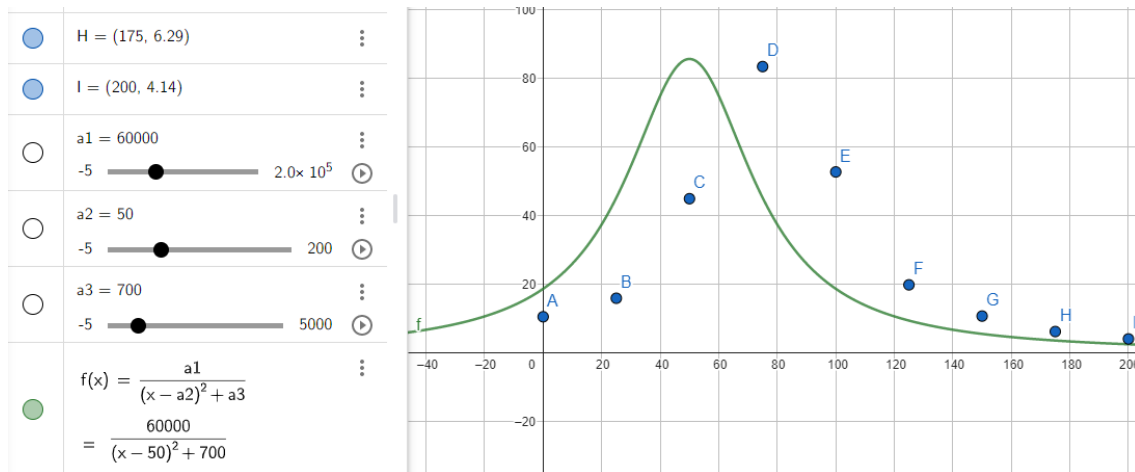


Figura 3. Utilización de Geogebra para escoger parámetros idóneos para proporcionar una semilla al método de Newton-Raphson multivariable para el ajuste por mínimos cuadrados de los datos Breit-Wigner.

```
In [179]: runfile('/home/diego/Desktop/Fisica_Numerica/Tarea_6/
BreitWigner.py', wdir='/home/diego/Desktop/Fisica_Numerica/Tarea_6')
Aproxinación de raíces por Newton-Raphson con tolerancia de 1e-06
x_0 =
[[60000]
 [ 50]
 [ 700]]

x_1 =
[[1.24652509e+05]
 [9.39282508e+01]
 [6.09300085e+02]]

x_2 =
[[9.59680164e+04]
 [7.97250793e+01]
 [5.12910091e+02]]

x_3 =
[[64188.68626592]
 [ 79.11074981]
 [ 569.75584096]]

x_4 =
[[66573.67782236]
 [ 78.38525539]
 [ 692.89023217]]

x_5 =
[[69239.91702725]
 [ 78.23745146]
 [ 801.15847808]]

[ 78.23745146]
[ 801.15847808]]

x_6 =
[[70580.67300799]
 [ 78.19736737]
 [ 860.89763843]]

x_7 =
[[70866.11163577]
 [ 78.18799023]
 [ 874.63171875]]

x_8 =
[[70878.17064034]
 [ 78.18754146]
 [ 875.23281378]]

x_9 =
[[70878.19256015]
 [ 78.1875406 ]
 [ 875.23391669]]

x_10 =
[[70878.19256015]
 [ 78.1875406 ]
 [ 875.23391669]]

Parametros de ajuste para Breit-Weigner
a1= [70878.19256022]
a2= [78.1875406]
a3= [875.2339167]
```

Figura 4. Ejecución del método de Newton-Raphson multivariable para determinar los parámetros de ajuste por mínimos cuadrados para los datos Breit-Wigner.

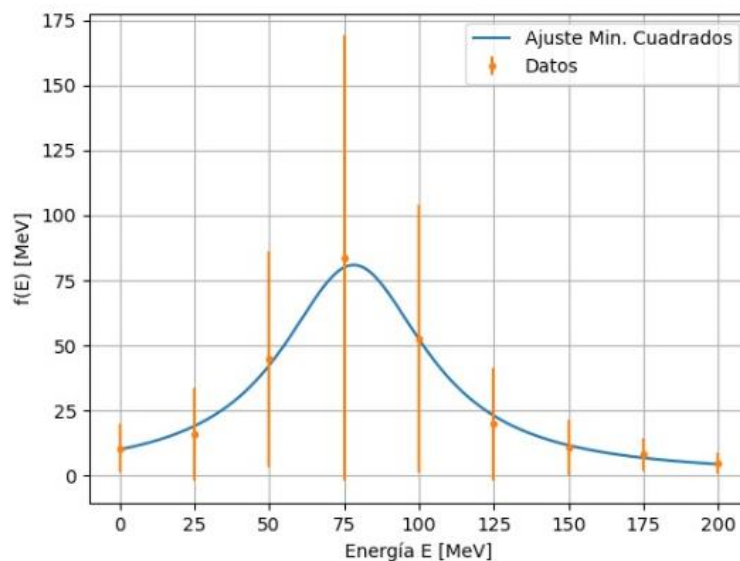


Figura 5. Datos de Breit-Weigner en conjunto con el ajuste obtenido por el método de mínimos cuadrados en el que se empleó el método de Newton-Raphson multivariable.

Problema 4: Decaimiento de voltaje en circuito RL

En este problema se proporcionan los siguientes datos del voltaje medido en un circuito RL en función del tiempo, con sus respectivas incertidumbres:

Data for decay of voltage across an inductor
in an RL circuit
Date: 24-Oct-2012
Data taken by D. M. Blantogg and T. P. Chaitor

time (ns)	voltage (volts)	uncertainty (volts)
0.0	5.08e+00	1.12e-01
32.8	3.29e+00	9.04e-02
65.6	2.23e+00	7.43e-02
98.4	1.48e+00	6.05e-02
131.2	1.11e+00	5.25e-02
164.0	6.44e-01	4.00e-02
196.8	4.76e-01	3.43e-02
229.6	2.73e-01	2.60e-02
262.4	1.88e-01	2.16e-02
295.2	1.41e-01	1.87e-02
328.0	9.42e-02	1.53e-02
360.8	7.68e-02	1.38e-02
393.6	3.22e-02	8.94e-03
426.4	3.22e-02	8.94e-03
459.2	1.98e-02	7.01e-03
492.0	1.98e-02	7.01e-03

El decaimiento de voltaje V en función del tiempo t para este circuito está dado por la expresión:

$$V(t) = V_0 \exp(-\Gamma t)$$

donde $\Gamma = \frac{R}{L}$ es el cociente de la resistencia R y la inductancia L del circuito.

Se pide determinar el mejor estimado para los valores V_0 y Γ para estos datos. Para esto se renombran los parámetros $a_1 = V_0$, $a_2 = \Gamma$, $x = t$ para obtener la función

$$g(x) = a_1 \exp(-a_2 x)$$

que se buscará ajustar a los datos provistos a través del método de mínimos cuadrados, buscando minimizar la expresión de χ^2 utilizada en el problema anterior. En este caso también se obtienen ecuaciones no lineales de la forma

$$f_1(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \exp(-a_2 x_i) = 0$$

$$f_2(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} (-a_1 a_2 \exp(-a_2 x_i)) = 0$$

que corresponden, al igual que el problema anterior, a un problema de aproximación de raíces multivariable (esta vez en \mathbb{R}^2) que se puede resolver adaptando el código del problema anterior.

El ajuste obtenido y los datos se muestran en la Figura 6; mientras que en la Figura 7 se muestra en gráfica semilog para el voltaje, así como su ejecución en la Figura 8.

Adicionalmente, en la Figura 9 se muestra el empleo de Geogebra para determinar un valor apropiado para la semilla necesaria para la búsqueda de los valores por el método de Newton-Raphson multivariable, la cual se eligió como $\mathbf{x}_0 = [5, 0.01]^T$.

Los valores para los parámetros obtenidos son

$$a_1 = V_0 = 4.5414 \text{ [V]}$$

$$a_2 = \Gamma = 0.01096 \left[\frac{\Omega}{\text{H}} \right]$$

Finalmente, se implementó el cálculo explícito de χ^2 para este ajuste, resultado en un valor de $\chi^2 = 80.609$ que, a pesar de ser mayor que el número de datos (16), no representa una medida mala del ajuste obtenido dado que éste es bueno, más bien, en este caso representa una aleatoriedad en la fuente de los errores.

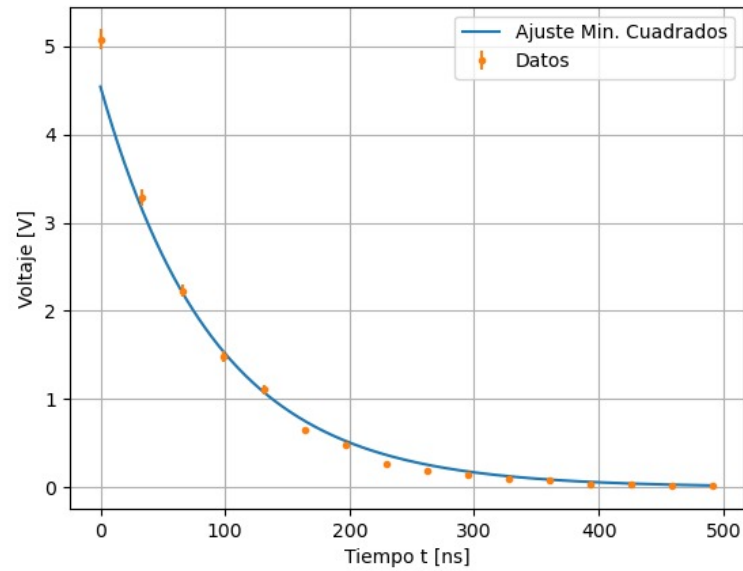


Figura 6. Datos de decaimiento de voltaje en conjunto con el ajuste obtenido por el método de mínimos cuadrados en el que se empleó el método de Newton-Raphson multivariable.

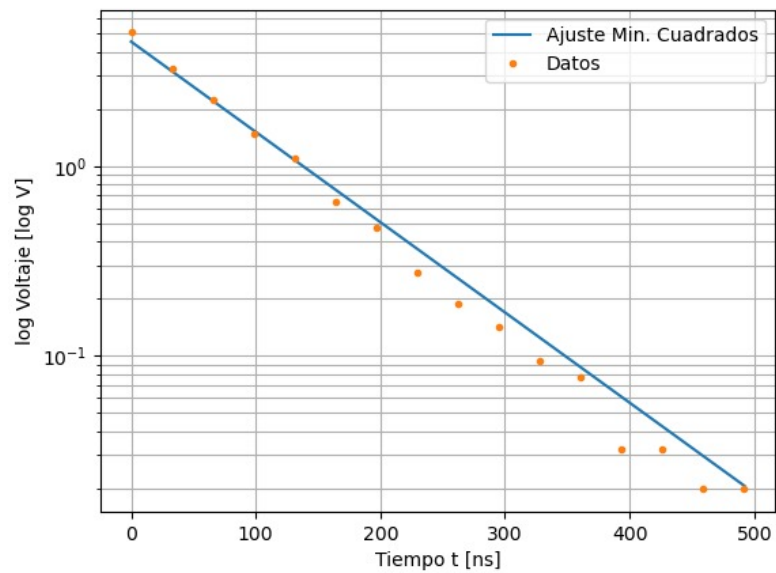


Figura 7. Datos de decaimiento de voltaje, en gráfica semilog, en conjunto con el ajuste obtenido por el método de mínimos cuadrados en el que se empleó el método de Newton-Raphson multivariable.


```
In [180]: runfile('/home/diego/Desktop/Fisica_Numerica/Tarea_6/
voltaje.py', wdir='/home/diego/Desktop/Fisica_Numerica/Tarea_6')
Aproxinación de raíces por Newton-Raphson con tolerancia de 1e-06
x_0 =
[[5. ]
 [0.01]]

x_1 =
[[4.62134645]
 [0.01076314]]

x_2 =
[[4.54312976]
 [0.01095062]]

x_3 =
[[4.54138091]
 [0.01096223]]

x_4 =
[[4.54137535]
 [0.01096223]]

x_5 =
[[4.54137535]
 [0.01096223]]

Parametros de ajuste para decaimiento de voltaje
a1= [4.54137535]
a2= [0.01096223]

Coeficiente Chi cuadrada: [80.60900544]
Numero de datos: 16
```

Figura 8. Ejecución del método de Newton-Raphson multivariable para determinar los parámetros de ajuste por mínimos cuadrados para los datos de decaimiento de voltaje.

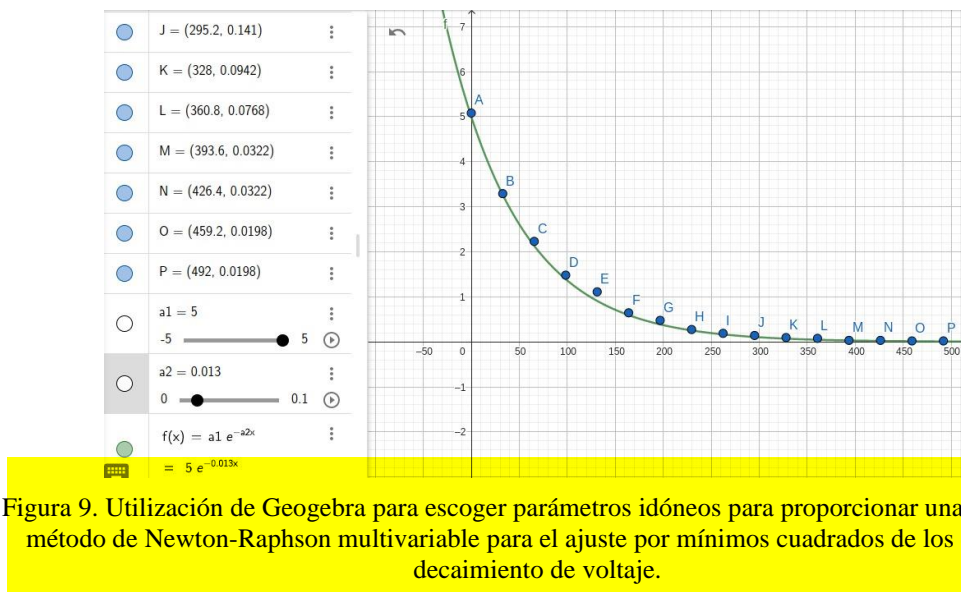


Figura 9. Utilización de Geogebra para escoger parámetros idóneos para proporcionar una semilla al método de Newton-Raphson multivariable para el ajuste por mínimos cuadrados de los datos de decaimiento de voltaje.

Problema 5: COBE

Para este problema se empleó el mismo método que los dos problemas anteriores con los siguientes datos proporcionados:

ν 1/cm	$I(\nu, T)$ M.Jy/sr	Error kJy/sr	ν 1/cm	$I(\nu, T)$ M.Jy/sr	Error kJy/s	ν 1/cm	$I(\nu, T)$ M.Jy/sr	Error kJy/sr
2.27	200.723	14	2.72	249.508	19	3.18	293.024	25
3.63	327.770	23	4.08	354.081	22	4.54	372.079	21
4.99	381.493	18	5.45	383.478	18	5.90	378.901	16
6.35	368.833	14	6.81	354.063	13	7.26	336.278	12
7.71	316.076	11	8.17	293.924	10	8.62	271.432	11
9.08	248.239	12	9.53	225.940	14	9.98	204.327	16
10.44	183.262	18	10.89	163.830	22	11.34	145.750	22
11.80	128.835	23	12.25	113.568	23	12.71	99.451	23
13.16	87.036	22	13.61	75.876	21	14.07	65.766	20
14.52	57.008	19	14.97	49.223	19	15.43	42.267	19
15.88	36.352	21	16.34	31.062	23	16.79	26.580	26
17.24	22.644	28	17.70	19.255	30	18.15	16.391	32
18.61	13.811	33	19.06	11.716	35	19.51	9.921	41
19.97	8.364	55	20.42	7.087	88	20.87	5.801	155
21.33	4.523	282						

La expresión analítica de Planck sobre la potencia $I(f, T)$ es

$$I(f, T) = \frac{2hf^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{hf}{kT}\right) - 1}$$

Para la cual se renombra $a_1 = \frac{2h}{c^2}$, $a_2 = \frac{h}{k}$ y $a_3 = T$, con lo cual se siguió exactamente el mismo procedimiento que en los problemas anteriores, empleando de nuevo el método de Newton-Raphson multivariable para aproximar las raíces de las ecuaciones resultantes:

$$f_1(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{x_i^3}{\exp\left(\frac{a_2 x_i}{a_3}\right) - 1} = 0$$

$$f_2(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{-a_1 x_i^4 \exp\left(\frac{a_2 x_i}{a_3}\right)}{a_3 \left(\exp\left(\frac{a_2 x_i}{a_3}\right) - 1\right)^2} = 0$$

$$f_3(a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^{n_{\text{datos}}} \frac{y_i - g(x_i)}{\sigma_i^2} \frac{a_1 a_2 x_i^4 \exp\left(\frac{a_2 x_i}{a_3}\right)}{a_3^2 \left(\exp\left(\frac{a_2 x_i}{a_3}\right) - 1\right)^2} = 0$$

La ejecución, ajuste obtenido y utilización de Geogebra en la determinación de la semilla inicial $\mathbf{x}_0 = [42, 1, 2]^T$ se muestran respectivamente en las Figura 8, 9 y 10.

Se encontró que, en particular $a_3 = T = 1.7356 \text{ [K]}$ es una estimación de la temperatura requisitada.

```
In [184]: runfile('/home/diego/Desktop/Fisica_Numerica/
Tarea_6/COBE.py', wdir='/home/diego/Desktop/
Fisica_Numerica/Tarea_6')
Aproximación de raíces por Newton-Raphson con tolerancia
de 1e-06
x_ 0 =
[[42]
 [ 1]
 [ 2]]

x_ 1 =
[[31.48029043]
 [ 0.7947041 ]
 [ 1.60156655]]

x_ 2 =
[[38.32714403]
 [ 0.91388815]
 [ 1.74624882]]

x_ 3 =
[[39.67179861]
 [ 0.91634196]
 [ 1.73584991]]

x_ 4 =
[[39.72884277]
 [ 0.9163824 ]
 [ 1.73561114]]

x_ 5 =
[[39.72932065]
 [ 0.91638334]
 [ 1.7356078 ]]
```

```
x_ 5 =
[[39.72932065]
 [ 0.91638334]
 [ 1.7356078 ]]
```

```
x_ 6 =
[[39.72931793]
 [ 0.91638333]
 [ 1.73560782]]
```

```
x_ 7 =
[[39.72931793]
 [ 0.91638333]
 [ 1.73560782]]
```

```
Parametros de ajuste para Planck
a1= [39.72931794]
a2= [0.91638333]
a3= [1.73560782]
El parametro a3 representa el valor de temperatura [K]
```

Figura 8. Ejecución del método de Newton-Raphson multivariable para determinar los parámetros de ajuste por mínimos cuadrados para los datos de radiación cósmica.

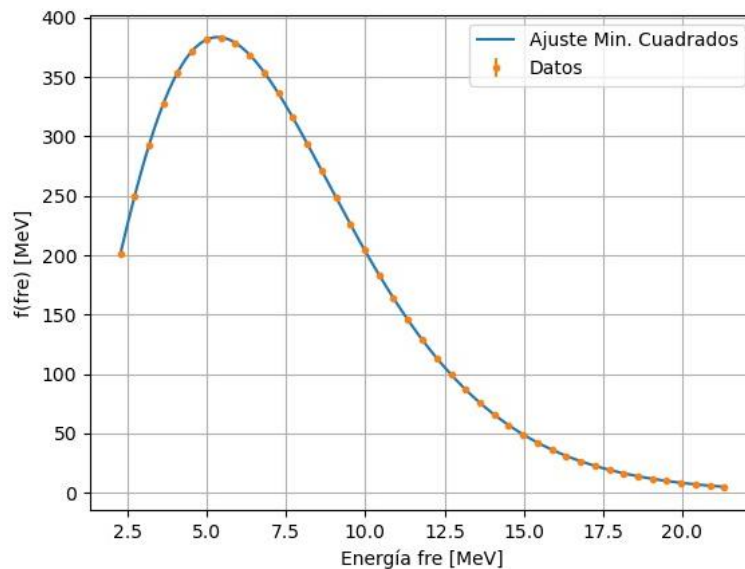


Figura 9. Datos de radiación cósmica en conjunto con el ajuste obtenido por el método de mínimos cuadrados en el que se empleó el método de Newton-Raphson multivariable.

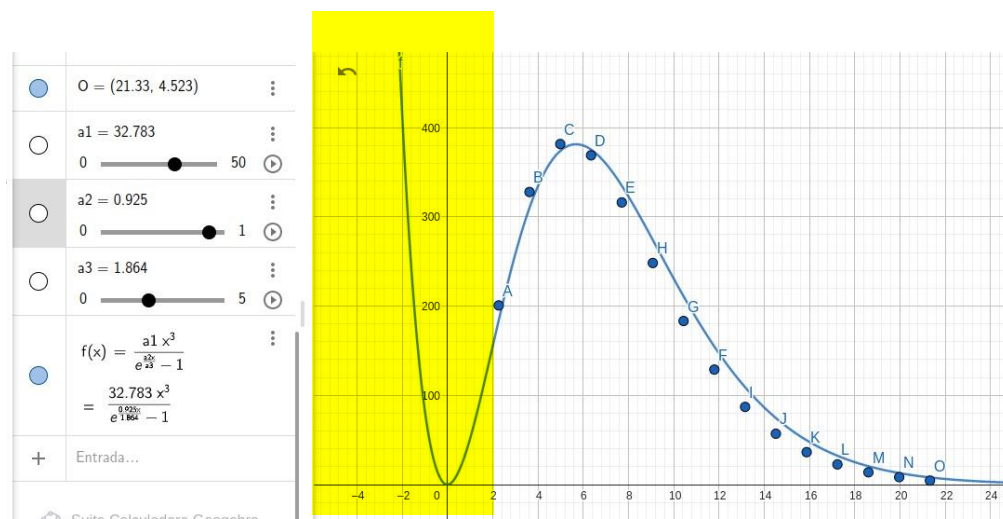


Figura 10. Utilización de Geogebra para escoger parámetros idóneos para proporcionar una semilla al método de Newton-Raphson multivariable para el ajuste por mínimos cuadrados de los datos de radiación cósmica.