



DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

UNIVERSIDAD DE CHILE

FI3104 - MÉTODOS NUMÉRICOS PARA LA CIENCIA E INGENIERÍA

Tarea 1

Profesor:

Valentino González

Auxiliares:

José Vines

Jou-Hui Ho

Nombre:

Franco Claverie

RUT:

19.687.559-k

Fecha:

27 de septiembre de 2018

Índice general

Índice general	1
Índice de figuras	2
1. Problema 1	3
1.1. Introducción	3
1.2. Procedimiento	3
1.3. Resultados	3
1.4. Conclusiones y Discusión	4
2. Problema 2	5
2.1. Introducción	5
2.2. Procedimiento	5
2.3. Resultados	7
2.4. Conclusiones y Discusión	8

Índice de figuras

1.1.	Valor de la diferencia de la derivada de $-\cos(x)$ en $x = 1,559$ con los métodos de error de orden 1 (gráfico de la izquierda) y de orden (gráfico de la derecha) y su valor real $\sin(x = 1,559)$, para números del tipo float32 y float64 con distintos valores de h. . . .	4
2.1.	Espectro de monopolo medido por la herramienta FIRAS del satélite COBE en función de la frecuencia cuyo error fue amplificado por 400 para ser apreciable en el gráfico. .	7
2.2.	Espectro de monopolo obtenido al evaluar la función de Planck en las frecuencias del archivo y en las temperaturas calculada y dada ($T = 2,725[K]$).	8

Capítulo 1

Problema 1

1.1. Introducción

Se desea comparar 2 métodos de derivación para la función $f(x) = -\cos(x)$ en el punto $x = 1.XXX.XXX$. XXX representan los 3 últimos dígitos del RUT antes del dígito verificador, siendo igual a 1.559 para este caso. Uno de los métodos es de error de orden 4, que es el presentado en la ecuación (1.1) y otro debe ser de error de orden 1.

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h) + 8f(x-h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h} \quad (1.1)$$

Se debe encontrar un rango de h tal que ambas ecuaciones se aproximen a su valor real $f'(x) = \sin(x)$. Esto usando números solo del tipo float32 y solo float64/float128 (si su consola lo soporta), comparando ambos casos.

1.2. Procedimiento

Se debe calcular el valor de la derivada de $f(x) = -\cos(x)$ en el punto $x=1.559$, esto utilizando 2 métodos de derivación, uno de error de orden 4 (ecuación 1.1) y otro de error de orden 1, visto en clases y dado por la ecuación (1.2).

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (1.2)$$

Para saber en qué h pequeño es conveniente utilizar el método, se prueba con distintos h en un espaciado de logaritmos, donde cada uno defiere del anterior por una potencia de 10, desde 10^{-1} hasta 10^{-18} . El rango elegido es arbitrario, dependiendo de la exactitud deseada (tolerancia). Se debe realizar 2 veces por cada método, una usando números de tipo float32 y otra usando números de tipo float 64 (si su consola soporta float128 usarlo).

Para saber qué tan exacto es el cálculo de las derivadas con ambos métodos respecto al valor real, se realiza la resta de ambos ($|\sin(1,559)_{calculado} - \sin(1,559)_{real}|$) para cada uno de los h . Mientras más cercano a 0 el resultado, más exacto el cálculo.

1.3. Resultados

Los resultados de las diferencias de los cálculos de las derivadas con su valor real (con ambos métodos) pueden observarse en la Figura 1.1.

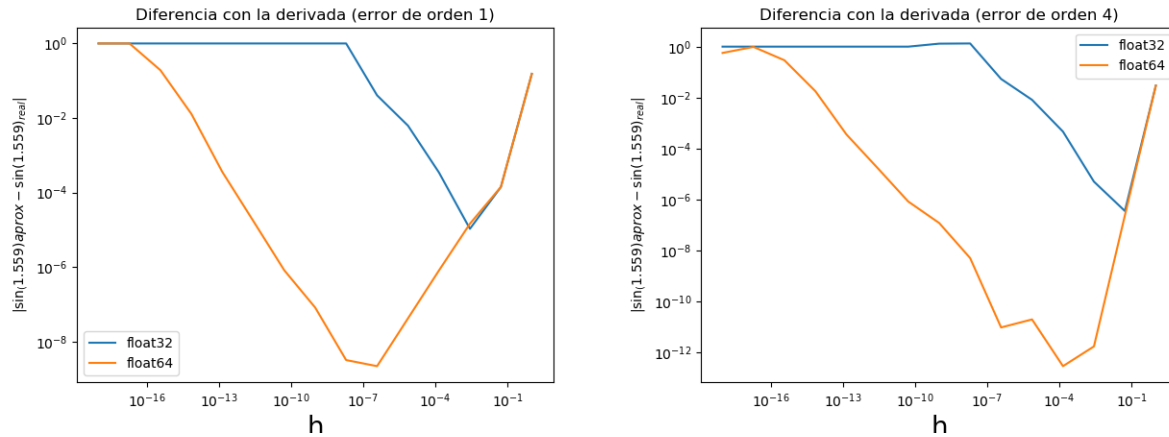


Figura 1.1: Valor de la diferencia de la derivada de $-\cos(x)$ en $x = 1,559$ con los métodos de error de orden 1 (gráfico de la izquierda) y de orden 4 (gráfico de la derecha) y su valor real $\sin(x = 1,559)$, para números del tipo float32 y float64 con distintos valores de h .

1.4. Conclusiones y Discusión

A partir de los resultados (Figura 1.1), puede observarse que para ambos métodos se obtienen gráficos similares, pero el método de la derivada de error de orden 4 se tiene una precisión hasta 10^{-4} veces mejor que el método de orden 1 (varían en el eje de las ordenadas).

Para el método de orden 4, el valor más preciso de h se alcanza antes que para el método de orden 1, siendo de un valor aproximado de 10^{-1} y 10^{-4} , con una diferencia de valores aproximados a 10^{-6} y 10^{-12} , para float32 y float64 respectivamente.

Para el método de orden 1, los valores de h en que se alcanza una mayor precisión son aproximadamente de 10^{-3} y 10^{-7} , con una diferencia de valores aproximados a 10^{-4} y 10^{-8} , para float32 y float64 respectivamente.

Se observa que con float64 los métodos alcanzan una mayor precisión que con float32, además de que funcionan hasta valores de h muy pequeños. Para float32, las diferencias tienden a 10^0 (valor aproximado de $\sin(1,559)$) cuando h tiende a 10^{-7} , es decir, la derivada tiende a 0 a partir de este h . En el caso de float64, esto ocurre a partir de 10^{-16} . Esto ocurre debido a que float32 tiene un eps del orden de 10^{-7} y float64 del orden de 10^{-16} , donde eps es el valor mínimo tal que $f(x) \neq f(x + \text{eps})$. Siendo h más pequeño que el eps correspondiente, ambos métodos se anulan en el denominador, dando como resultado 0 y dando la diferencia igual al valor real.

Se puede entonces concluir que el método de error de orden 4 es más preciso que el de orden 1, lográndose valores mucho más cercanos al deseado, pero se tienen que realizar más cálculos a cambio de dicha precisión (más términos en el denominador). También al usar float64 se logra una mayor precisión que con float32, debido a su capacidad de tener un eps mucho menor. Rangos apropiados para el h de los métodos pueden encontrarse en una vecindad de aquel h en que el valor de la derivada sea el más preciso, con una diferencia de una potencia de 10 hacia ambos lados.

Capítulo 2

Problema 2

2.1. Introducción

- Parte 1

Se pide graficar los datos obtenidos por la herramienta FIRAS del satélite COBE sobre el espectro de radiación de microondas con respecto a la frecuencia, junto con la incertidumbre de las medidas. Estos datos pueden encontrarse en el archivo adjunto.

- Parte 2

Se tiene que una forma de medir la temperatura de un cuerpo negro está dada por la ecuación (2.1), que corresponde a la función de Planck integrada en la frecuencia. Se debe de calcular la integral de esta ecuación numéricamente, siendo que se sabe que su valor analítico es $\pi^4/15$.

$$P = \frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (2.1)$$

- Parte 3

Usando los mismos datos que se graficaron en la parte 1, se debe calcular la integral numéricamente, igualarla a la ecuación (2.1) y despejar la temperatura T , para compararla con la temperatura de 2,725[K], la cual se consideró en las mediciones. Se debe cuidar las unidades de medida al realizar la integral, pues no corresponden a las del Sistema Internacional de Unidades.

- Parte 4

A partir de la función de Planck dada por la ecuación (2.2), se pide graficar esta función versus la frecuencia (la misma obtenida del archivo de las mediciones de FIRAS), para la temperatura medida en la parte 3 y para $T = 2,725[K]$.

$$B = \frac{2hv^3/c^2}{e^{hv/k_B T} - 1} \quad (2.2)$$

- Parte 5

Se busca realizar las integrales de las partes 2 y 3 de una forma más inmediata. El módulo `scipy` incluye las funciones `scipy.integrate.trapz` y `scipy.integrate.quad`. Se debe ver en cuál de las 2 es más adecuado usar cuál, comparando la precisión de ambos métodos (`scipy` y el usado en las partes anteriores) y sus velocidades de ejecución.

2.2. Procedimiento

- Parte 1

Para realizar el gráfico, se debe primero cargar el archivo adjunto. Para eso, se usa la función `load.txt()` del módulo `numpy` de Python. Una vez cargado el archivo, se debe de reconocer cada columna, para así saber cuáles son útiles. Las columnas son:

- Columna 1: Frecuencia [cm^{-1}]

- Columna 2: Espectro del monopolio medido por el instrumento FIRAS del satélite COBE [MJy/sr], donde $1 [MJy] = 10^{-20} [Wm^{-2}Hz^{-1}]$

- Columna 3: Espectro residual del monopolio [kJy/sr]
- Columna 4: Incertidumbre del espectro medido [kJy/sr]
- Columna 5: Modelo del espectro de la galaxia en los polos galácticos [kJy/sr]

De estas columnas nos interesan las columnas 1 (frecuencia), 2 (espectro medido) y 4 (incertidumbre/error) para la realización del gráfico. Para el error, se utilizará la función *errorbar* del sub-módulo *matplotlib.pyplot*.

- Parte 2

Para calcular la integral (I), se utilizará el cambio de variable $y = \arctan x$. Reemplazando en la ecuación (2.1), se tiene:

$$P = \frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = K(T) \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = K(T) \int_0^{\pi/2} \frac{\tan(y)^3 + \tan(y)^5}{e^{\tan(y)} - 1} dy$$

Aunque se tienen ahora límites de integración más agradables, sigue habiendo un problema de divergencia en los extremos. Cuando $y = 0$, la función dentro de la integral tiene denominador igual a 0, y cuando $y = \pi/2$ la integral diverge tanto en el denominador como en el numerador, tendiendo a 0 debido a que la exponencial domina en el crecimiento. Debido a esto, la integral se calculará de la siguiente forma: Se utilizará el método del valor medio en los extremos, para así no tener que evaluar la función en esos puntos, evitando dividir por 0 y el resto de la integral se hará con el método de Simpson 1/3. El algoritmo se detendrá una vez que se llegue a una tolerancia específica, siendo una buena del orden 10^{-7} .

- Parte 3

Primero que nada, se deben pasar las dimensiones a las del Sistema Internacional. El espectro (columna 2) tiene unidades de [MJy/sr]. La conversión a S.I. es $1[MJy] = 10^{-20}[Wm^{-2}Hz^{-1}]$. Para la frecuencia, esta se encuentra en unidades de [cm^{-1}], por lo que para transformarlo a [Hz] se debe multiplicar por 100 y por c (rapidez de la luz en el vacío).

Con las unidades ya convertidas, se realizará la integral numéricamente con el método del trapecio. Una vez usado el algoritmo, se debe igualar a este valor a la ecuación (2.1) y despejar T . Nombrando este valor I_3 y a la integral de la parte 2 como I_2 , se despeja de la siguiente manera:

$$\frac{2h}{c^2} \left(\frac{k_B T}{h} \right)^4 I_2 = I_3$$

$$\frac{k_B T}{h} = \sqrt[4]{\frac{I_3 c^2}{I_2 2h}}$$

$$T = \frac{h}{k_B} \sqrt[4]{\frac{I_3 c^2}{I_2 2h}}$$

- Parte 4

Para realizar los gráficos para ambos valores de temperatura, se crea un *ndarray* al evaluar la función de Planck (ecuación 2.2) en los valores de la frecuencia del archivo adjunto (ya transformados al S.I.) y en su temperatura respectiva.

- Parte 5

Se importa el sub-módulo *scipy.integrate* para poder realizar las integrales. La función *scipy.integrate.trapz(y,x)* corresponde al algoritmo del método del trapecio, por lo que se utilizará en los datos del archivo para la integral del espectro medido por FIRAS. La función *scipy.integrate.quad(func,a,b)* realiza la integral de la función *func* desde *a* hasta *b*, y se utilizará para la integral de la parte 2.

2.3. Resultados

El gráfico del espectro de monopolo medido por la herramienta FIRAS puede observarse en la Figura 2.1.

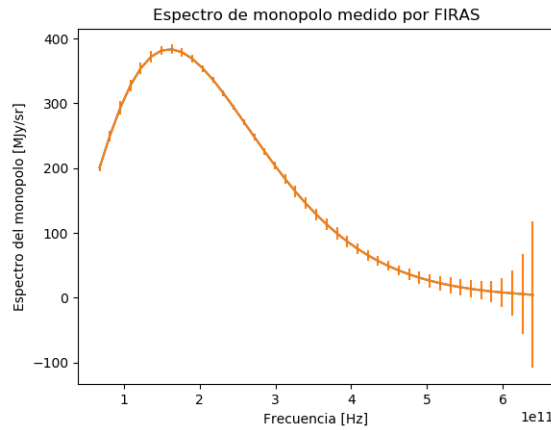


Figura 2.1: Espectro de monopolo medido por la herramienta FIRAS del satélite COBE en función de la frecuencia cuyo error fue amplificado por 400 para ser apreciable en el gráfico.

El valor de la integral de la parte numéricamente resuelta de la parte 2 fue de $I_2 = 6,493939441661168$, siendo la misma integral analíticamente resuelta igual a $\pi^4/15 \approx 6,493939402266828$.

El cálculo de T en la parte 3 tiene como resultado $T = 2,6837209586894626$

El gráfico de la función de Planck en la frecuencia para el T calculado y $T = 2,715[K]$ se muestra en la Figura (2.2)

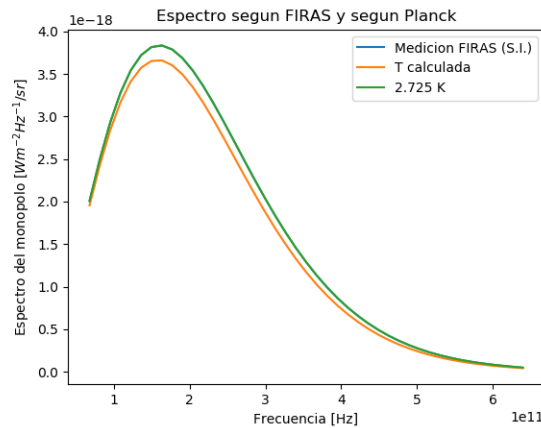


Figura 2.2: Espectro de monopolio obtenido al evaluar la función de Planck en las frecuencias del archivo y en las temperaturas calculada y dada ($T = 2,725[K]$).

En la parte 5, el valor de la integral de la parte 2 al utilizar `scipy.integrate.quad(func,a,b)` dio como resultado $6,49393940226683$ y el valor de la integral de la parte 3 al utilizar `scipy.integrate.trapz(y,x)` es $9,362907129272173 \cdot 10^{-7}$, siendo que los obtenidos fueron $6,493939441661168$ y $9,362907129272171 \cdot 10^{-7}$, respectivamente.

Los tiempos que se tardaron fueron:

- Algoritmos implementados:

Parte 2: $35,6 \pm 2,95[ns]$

Parte 3: $28,5 \pm 2,21[ns]$

-`Scipy.integrate`:

Parte 2: $31,2 \pm 0,865[ns]$

Parte 3: $27,5 \pm 1,58[ns]$

2.4. Conclusiones y Discusión

Se observa de los resultados que la integral resuelta con el método de Simpson y del valor medio (parte 2, función de Planck integrada en la frecuencia) dio valores muy similares al analítico, teniendo con esto que el método es muy preciso a la hora de ejecutarse, siendo que teóricamente posee un error de orden 5 (concuerda, es preciso). Este valor también se acerca mucho al obtenido en la parte 5, donde se usó el módulo `scipy.integrate`, pero este último tardó un poco menos de tiempo en ejecutarse, además de ser un poco más exacto que el algoritmo implementando. Esto se debe a que este se encuentra mejor optimizado que el algoritmo implementado. Similar al caso de la parte 3, la integral del espectro de los datos del archivo tiene valores muy cercanos para el método del trapecio implementado y el del módulo `scipy.integrate`, siendo el módulo un poco más rápido a la hora de operar. El valor de T obtenido a la parte 3, si bien es cercano a los $2,725[K]$ que debieron ser, no fue tan preciso como lo fue el método de Simpson al aproximarse al valor de la integral de la parte 2. Se puede explicar con el hecho

de que el método del trapecio tiene un orden de error 2, más bajo que el orden 5 que tiene Simpson 1/3.

De la Figura 2.2 se puede ver, primero, que las mediciones del FIRAS son lo bastante precisas como para parecer su gráfico de espectro superpuesto al calculado con la función de Planck para $T = 2,725[K]$. El gráfico para la temperatura calculada, $T \approx 2,684[K]$ resulta ser similar al del T real.

Se puede concluir entonces, que los métodos numéricos a la hora de aproximar integrales y derivadas son bastante precisos (si se usa un h correcto, dependiendo de la consola, tipo de número y método) y a la hora de aproximar valores reales en los modelos pueden resultar ser de gran utilidad, razón por la cual se desarrollaron y se siguen optimizando.