Métodos de interpolación numéricos aplicados a una Ecuación de Estado

Sergio Fajardo - 2230661,
Deiner Duran - 2230673,
Sophia Uribe - 2230965,
Miguel Ascanio - 2231344

Orientador: PhD. Jose Rodriguez

Universidad Industrial de Santander

15 de septiembre 2025

Indice

Introdución

Las ecuaciones de estado desempeñan un papel fundamental en el estudio de sistemas termodinámicos, ya que permiten establecer relaciones entre variables de gran relevancia como la presión, el volumen y la temperatura. Sin embargo, en muchos casos los datos disponibles provienen de mediciones discretas o tablas numéricas, lo que hace necesario el empleo de técnicas de interpolación para obtener valores intermedios con precisión.

En este contexto, se evaluaron distintos métodos de interpolación: Lagrange, Cubic Spline, interp1d y PCHIP— con el objetivo de analizar su desempeño en términos de estabilidad y exactitud.

Ecuación de Estado

El archivo sly4.dat contiene una tabla de la ecuación de estado (EoS) del modelo nuclear SLy4, ampliamente usado en el estudio de estrellas de neutrones. Sus columnas muestran la densidad bariónica nB, la densidad de masa ρ y la presión P, de modo que para cada valor de densidad se asocia una presión correspondiente.

Esta relación $P(\rho)$ define precisamente una ecuación de estado: un vínculo fundamental entre variables termodinámicas que describe cómo responde la materia bajo condiciones extremas de densidad y presión, permitiendo modelar el equilibrio y estructura interna de objetos compactos como las estrellas de neutrones.

Interpolaciones

Métodos de Interpolación

- **Lagrange:** Método polinómico que construye un polinomio único de grado n que pasa exactamente por todos los puntos dados. Es simple, pero puede oscilar mucho con muchos puntos. (from scipy.interpolate import lagrange)
- **PCHIP (Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomial):** Usa polinomios cúbicos por tramos que preservan la forma de los datos y la monotonía, evitando oscilaciones no deseadas. (from scipy.interpolate import PchipInterpolator)
- **Cubic Spline:** Ajusta polinomios cúbicos en cada intervalo garantizando continuidad de la función, su primera y segunda derivada, logrando suavidad global. En este caso, se uso una condción de frontera natural. (from scipy.interpolate import CubicSpline)
- **Interp1d:** Función de `scipy` que permite interpolar datos en $1D$ con distintos métodos (lineal, cúbico, spline, etc.), dando flexibilidad en la elección del tipo de interpolación. Además, se uso la condición de frontera (not-a-knot) (from scipy.interpolate import interp1d)

Errores de Interpolación

- **Error Absoluto Relativo (RAE):** Mide el error relativo punto a punto.

$$RAE_i = \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i|}$$

- **Error Absoluto Relativo Medio (MRAE):** Promedio de los errores relativos.

$$MRAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} RAE_i$$

- **Error Cuadrático Relativo (RSE):** Penaliza más los errores grandes al elevarlos al cuadrado.

$$RSE_i = \left(\frac{|y_i - \hat{y}_i|}{|y_i|}\right)^2$$

- **Error Cuadrático Relativo Medio (MRSE):** Promedio de los errores cuadráticos relativos.

$$MRSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} RSE_i$$

Descripción de los datos

Extracción de los Datos

Para la descripción de los datos, con la función de *NumPy genfromtx* se importaron las columnas 1, 2 y 3, ignorando las primeras 6 filas ya que son comentarios y metadatos del archivo txt; cada una de estas columnas se anexan a una lista (nB, rho, P). Luego con pd.read_csv de Pandas se cargan las mismas columnas, también saltando las primeras seis filas, asignando nombres personalizados a las columnas (names=cols) y usando separación por espacios.

Densidad numérica Bariónica (nB)

1. Unidades de Medidad:
La densidad numérica bariónica está en unidades de fentometro cúbico inverso, es decir: $[\mathrm{fm}^{-3}]$.

2. Máximos y Mínimos:
Usando max y min de la biblioteca de NumPy, los extremos de la densidad numérica bariónica son:

Máximo $[fm^{-3}]$	Mínimo $[fm^{-3}]$
1.997	2.72×10^{-4}

3. Paso Constante:
Para conocerlo, se definió una función llamada paso(L) que calcula las diferencias entre elementos consecutivos (Df) y comprueba si la primera diferenciación es igual a las siguientes; si lo son, devuelve True, de lo contrario, devuelve False. Para la densidad numérica bariónica (nB), su resultado fue False, por lo que no tiene paso constante.

Densidad de masa (ρ)

1. Unidades de Medidad:
La densidad de masa está en gramos sobre centímetros cúbicos, o sea $[\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3]$.
2. Máximos y Mínimos:
Usando max y min de la biblioteca de NumPy, los extremos de la densidad de masa son:

Máximo $[g/cm^3]$	Mínimo $[g/cm^3]$
6.749×10^{15}	45.1

3. Paso Constante:
Haciendo uso de la misma función que el caso anterior, es decir paso(L), la densidad de masa arrojo False como resultado, lo que implica que no tiene paso constante, es decir, que sus puntos están distribuidos de forma irregular.

Presión (P)

1. Unidades de Medidad:
Sus unidades son dinas por centímetro cuadrado $[\mathrm{dyn/cm^2}]$, o en términos de Pascales $[0.1\mathrm{Pa}]$.

2. Máximos y Mínimos:
Usando max y min de la biblioteca de NumPy, los extremos de la presión son:

Máximo $[dyn/cm^2]$	Mínimo $[dyn/cm^2]$
5.344×10^{34}	1.7×10^{14}

3. Paso Constante:
Al evalúar la Presión en la función para la defininción de paso constante paso(L), su resultado nuevamente fue False, por lo que los datos están ubicados de manera irregular y no tiene paso constante.
En resumen, ninguna lista tuvo paso constante.

Análisis de Presión (P) vs Densidad de Masa (rho)

Selección grupos de Prueba y de Entrenamiento

1. **CubicSpline, interp1d y PchipInterpolator:**
Se eligieron 101 puntos igualmente espaciados para cada variables: X (rho) y Y(P). De ellos se eligieron:
   - Los de índices pares se usaron como entrenamiento (51 puntos).
   - Los de índices impares se usaron como prueba (50 puntos).
2. **Lagrange**
Se eligieron de forma independiente 6 puntos igualmente espaciados. De esos:
   - 6 puntos se usaron como entrenamiento.
   - Los mismos 50 puntos del anterior caso, se usaron como prueba.

*Nota:*Se usan pocos puntos en comparación con los anteriores, para que así el polinomio resultante sea de grado bajo y no se torne inestable (oscilaciones grandes).

Comparación de las Interpolaciones

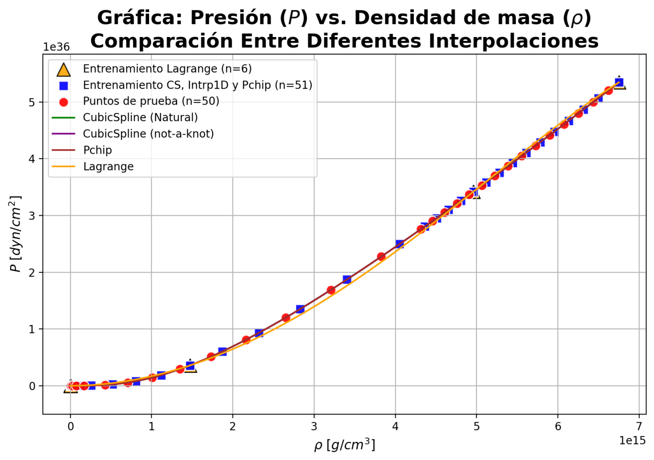

Figura 1 – Comparación grafica de las Interpolaciones para la relación de Presión (P) vs Densidad de Masa (rho).

Errores de Interpolación (RAE)

Error Absoluto Relativo (RAE)

Método	Mínimo	Máximo
Lagrange	1.525×10^{-3}	2.821×10^{4}
CS (Natural)	1.834×10^{-5}	2.082×10^{1}
CS (not-a-knot)	1.834×10^{-5}	1.092×10^{1}
PCHIP	1.413×10^{-5}	1.450×10^{1}

Media del Error Absoluto Relativo (MRAE)

Método	MRAE
Lagrange	5.770×10^{2}
Cubic Spline (Natural)	4.252×10^{-1}
interp1d (not-a-knot)	2.263×10^{-1}
PCHIP	3.005×10^{-1}

Análisis

- **Lagrange:** Mayor error y alta inestabilidad, especialmente en las fronteras.
- **interp1d (not-a-knot):** Errores medios más bajos, son las opciones más precisas.
- **PCHIP:** Error medio bajo, alternativa válida aunque ligeramente menos precisa.
- **Cubic Spline (Natural):** Errores medios más bajos que Lagrange pero significativamente mayores que en interp1d.

Gráficas de Errores de Interpolación (RAE)

Errores Absolutos Relativos

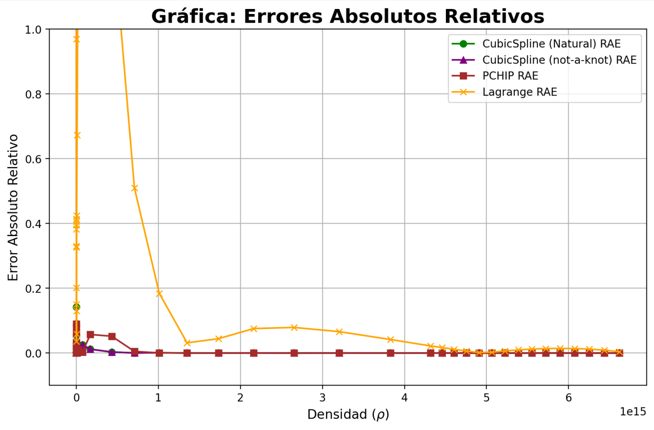

Figura 2 – Errores Absolutos Relativos para la relación Presión (P) vs Densidad de Masa (rho).

Comparación de Errores Absolutos Relativos Medios

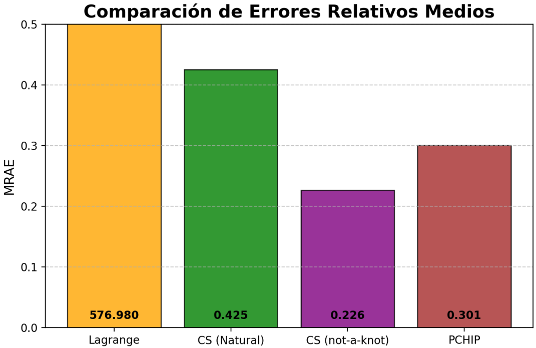

Figura 3 – Errores Absolutos Relativos Medios.

Análisis

Según los errores absolutos relativos mostrados en las Figuras (6) y (3), el método de Lagrange presenta los errores absolutos relativos más altos e inestables, especialmente en las fronteras, lo que lo hace poco recomendable. En contraste, interp1d muestra los errores medios más bajos y un comportamiento estable en todo el dominio, siendo la opcion más precisa. Por su parte, PCHIP mantiene errores bajos, aunque ligeramente superiores, constituyendo una alternativa válida cuando se desea preservar la forma de los datos. Por último, Cubic Spline con condiciones de frontera natural tiene mayor error que PHIP e interp1d, pero mucho menor que Lagrange.

Errores de Interpolación (RSE)

Error Cuadrático Relativo (RSE)

Método	Mínimo	Máximo
Lagrange	2.324×10^{-6}	7.958×10^{8}
CS (Natural)	3.363×10^{-10}	4.335×10^{2}
CS (not-a-knot)	3.363×10^{-10}	1.192×10^{2}
PCHIP	1.996×10^{-10}	2.103×10^{2}

Media del Error Cuadrático Relativo (MRSE)

Método	MRSE
Lagrange	1.592×10^{7}
CS (Natural)	8.670×10^{0}
CS (not-a-knot)	2.385×10^{0}
PCHIP	4.207×10^{0}

Análisis

- **Lagrange:** Mayor error y alta inestabilidad, especialmente en las fronteras.
- **interp1d (not-a-knot):** Errores medios más bajos, son las opciones más precisas.
- **PCHIP:** Error medio bajo, alternativa válida aunque ligeramente menos precisa.
- **Cubic Spline (Natural):** Errores medios más bajos que Lagrange pero significativamente mayores que en interp1d.

Gráficas de Errores de Interpolación (RSE)

Errores Cuadráticos Relativos

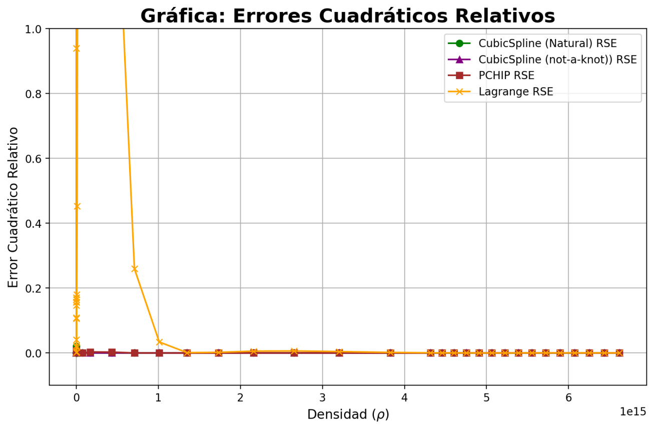

Figura 4 – Errores Cuadráticos Relativos para la relación Presión (P) vs Densidad de Masa (rho).

Comparación de Errores Cuadráticos Relativos Medios

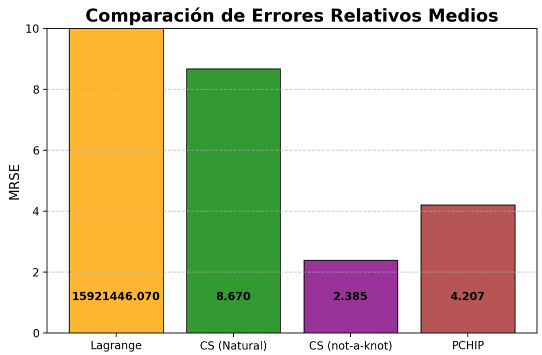

Figura 5 – Errores Cuadráticos Relativos Medios.

Análisis

En el caso de los errores cuadráticos relativos (4) y (5), el método de Lagrange vuelve a ser el menos adecuado, mostrando valores medios extremadamente altos, lo que confirma su inestabilidad ya observada en los errores absolutos relativos, pero ahora más penalizada debido a la naturaleza cuadrática. Por el contrario, Interp1d mantiene los errores más bajos, ratificando que es es método más preciso y estable. Finalmente, PCHIP presenta un error medio mayor que en el caso absoluto, lo que indica que este método, aunque válido, es más sensible a desviaciones grandes cuando se mide con error cuadrático.

Análisis de Presión (P) vs Densidad numérica bariónica (n_B)

Selección grupos de Prueba y de Entrenamiento

1. **CubicSpline, interp1d y PchipInterpolator:**
Se eligieron 101 puntos igualmente espaciados para cada variables: X (n_B) y Y(P). De ellos se eligieron:
    - Los índices pares se usaron como entrenamiento (51 puntos).
    - Los índices impares se usaron como prueba (50 puntos).
2. **Lagrange**
Se eligieron de forma independiente 6 puntos igualmente espaciados. De esos:
    - 6 puntos se usaron como entrenamiento.
    - Los mismos 50 puntos del anterior caso, se usaron como prueba.

*Nota:*Se usan pocos puntos en comparación con los anteriores, para que así el polinomio resultante sea de grado bajo y no se torne inestable (oscilaciones grandes).

Comparación de las Interpolaciones

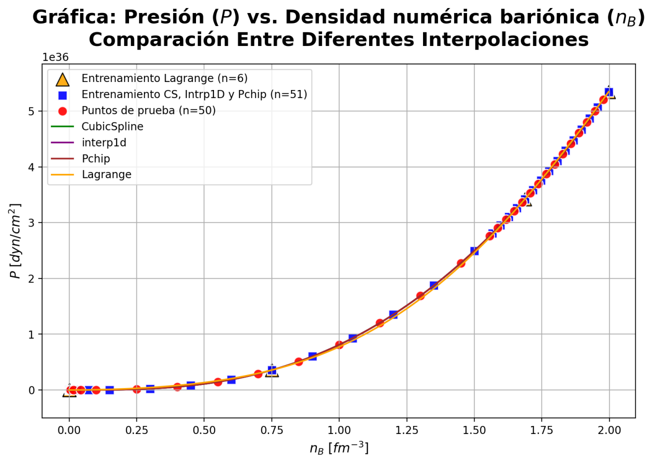

Figura 6 – Comparación gráfica de las Interpolaciones para Presión (P) vs Densidad numérica bariónica (n_B).

Errores de Interpolación (RAE)

Error Absoluto Relativo (RAE)

Método	Mínimo	Máximo
Lagrange	5.184×10^{-4}	2.807×10^{4}
CS (Natural)	1.132×10^{-6}	2.064×10^{1}
interp1d (nak)	1.132×10^{-6}	1.083×10^{1}
PCHIP	1.580×10^{-5}	1.438×10^{1}

Media del Error Absoluto Relativo (MRAE)

Método	MRAE
Lagrange	5.742×10^{2}
Cubic Spline (Natural)	4.217×10^{-1}
interp1d (not-a-knot)	2.245×10^{-1}
PCHIP	2.983×10^{-1}

Análisis

- **Lagrange:** Presenta un mayor margen de error y tiende a ser más inestable.
- **interp1d (not-a-knot):** Ofrece errores medios más bajos, destacándose como una de las opciones más precisas.
- **PCHIP:** Tiene un error medio bajo y se considera una alternativa válida, aunque con una precisión ligeramente inferior.
- **Cubic Spline (Natural):** Si bien presenta errores medios más bajos que el método de Lagrange, su precisión sigue siendo considerablemente inferior a la de `interp1d`.

Gráficas de Errores de Interpolación (RAE)

Errores Absolutos Relativos

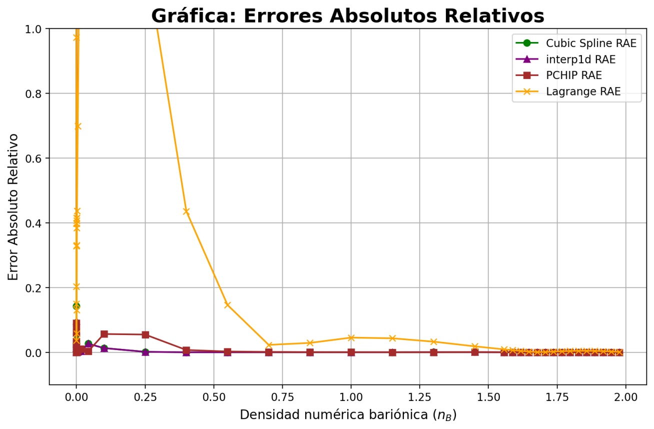

Figura 7 – Errores Absolutos Relativos para la relación Presión (P) vs Densidad numérica bariónica (n_B).

Comparación de Errores Absolutos Relativos Medios

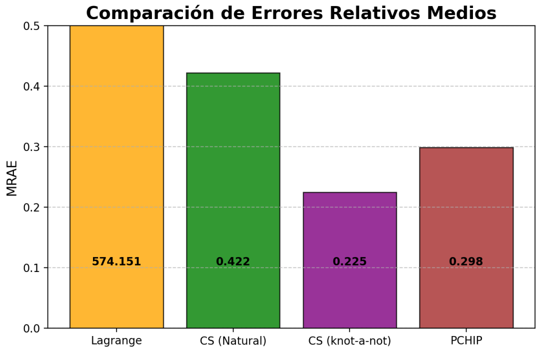

Figura 8 – Errores Absolutos Relativos Medios.

Análisis

El análisis comparativo de las figuras (7) y (8) muestra diferencias significativas entre los métodos de interpolación usados. Lagrange, aunque matemáticamente correcto, resulta poco eficiente debido a la magnitud y variabilidad de sus errores. Por el contrario, interp1d destaca no solo por su bajo error medio, sino también por la regularidad con la que aproximan los datos. PCHIP, aunque menos preciso en comparación con los métodos spline, puede ser preferible en situaciones en las que preservar la forma local de los datos.

Errores de Interpolación (RSE)

Error Cuadrático Relativo (RSE)

Método	Mínimo	Máximo
Lagrange	2.688×10^{-7}	7.877×10^{8}
CS (Natural)	1.281×10^{-12}	4.261×10^{2}
CS (not-a-knot)	1.281×10^{-12}	1.173×10^{2}
PCHIP	2.495×10^{-10}	2.068×10^{2}

Media del Error Cuadrático Relativo (MRSE)

Método	MRSE
Lagrange	1.576×10^{7}
Cubic Spline (Natural)	8.523
interp1d (not-a-knot)	2.346
PCHIP	4.136

Análisis

- **Lagrange:** Presenta un mayor margen de error y tiende a ser más inestable.
- **interp1d (not-a-knot):** Ofrece errores medios más bajos, destacándose como una de las opciones más precisas.
- **PCHIP:** Tiene un error medio bajo y se considera una alternativa válida, aunque con una precisión ligeramente inferior.
- **Cubic Spline (Natural):** Si bien presenta errores medios más bajos que el método de Lagrange, su precisión sigue siendo considerablemente inferior a la de `interp1d`.

Gráficas de Errores de Interpolación (RSE)

Errores Cuadráticos Relativos

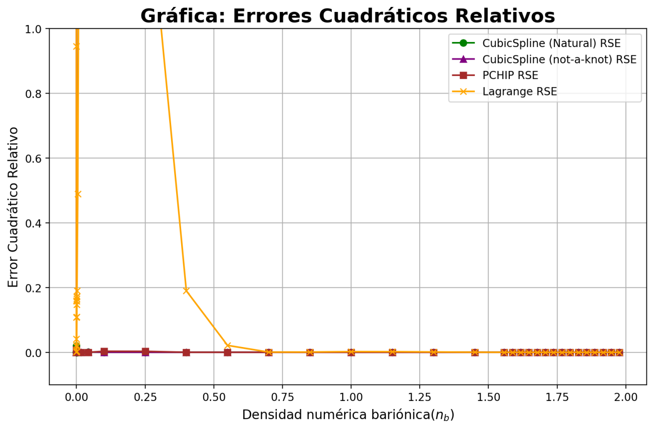

Figura 9 – Errores Cuadráticos Relativos para la relación Presión (P) vs Densidad numérica bariónica (n_B).

Comparación de Errores Cuadráticos Relativos Medios

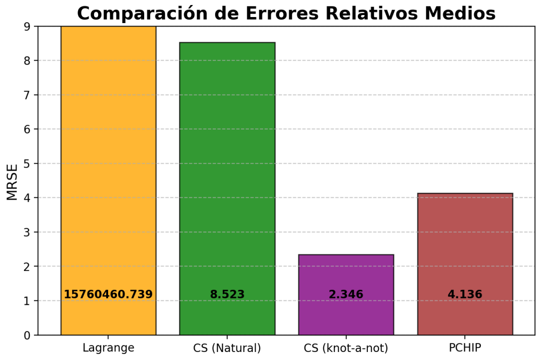

Figura 10 – Errores Cuadráticos Relativos Medios.

Análisis

A partir del análisis de las figuras 9 y 10 en el caso de los errores cuadráticos relativos se muestra que Lagrange alcanza los valores más elevados y un comportamiento inestable, en particular hacia los extremos del intervalo, lo que lo convierte en la opción menos recomendable. Interp1d mantiene los errores cuadráticos más reducidos, destacándose por su regularidad y precisión en todo el dominio. PCHIP obtiene errores bajos aunque ligeramente superiores al anterior, pero resulta ventajoso en escenarios donde se desea preservar la forma local y la monotonicidad de los datos originales. Y Cubic Spline con condicion de frontera natural es mucho mejor que Lagrange.

Consideraciones finales

- A partir de los análisis gráficos realizados con antelación, se puede decir que el método más preciso tanto en términos de MRAE como de MRSE fue interp1d con condicones de frontera not-a-knot. Ambos mantuvieron errores medios bajos y estables en todos los escenarios analizados.
- El método de Cubic Spline con condiciones de frontera natural tiene una peor aproximación que interp1d y PCHIP, pero mucho mejor que Lagrange.
- Las oscilaciones abruptas en los bordes, especialmente notorias en Lagrange implican pérdida de estabilidad al aproximar cerca de los extremos del intervalo, entiendo esto como un aumento desmedido de los errores. Al analizar esta tendencia en interp1d y PCHIP muestran un control mucho mayor en estas regiones, ofreciendo interpolaciones más suaves.