

Introducción al cómputo científico
Admisión al PCI 2016 en la línea de modelado matemático y computacional.
Instructor: Iván Guerrero, Instituto de Física de la UASLP.

Tarea 2: Implementación del método de mínimos cuadrados para un polinomio de tercer grado.

Un estudiante experimental estaba haciendo mediciones de la capacidad diferencial (C_d) como función del potencial de Galvani (V) en una interface líquida agua y aceite. Como tenía mucha hambre y el experimento tardaba mucho se fue a comer. Cuando regresó se dio cuenta de que no se registraron las mediciones en el intervalo comprendido entre 0.4 y 0.5 Volts. Para variar, su asesor le había pedido que registrara en particular la capacidad diferencial de la interface electrificada para un valor de 0.45 Volts. Como llevó un curso de métodos numéricos, el estudiante sabía que los datos experimentales podían ajustarse a una función arbitraria que minimizara el error de los puntos con respecto a la función usando el método de mínimos cuadrados que había visto en clase. Así que decidió hacer un ajuste a una función polinomial de tercer grado y usar ese polinomio para evaluar la capacidad diferencial en 0.45 Volts, resultado que le urgía a su asesor pues se iba de paseo a una conferencia.

Los datos experimentales del voltaje V (primera columna) y la capacidad diferencial como función del voltaje $C_d(V)$ (segunda columna) del estudiante están en el archivo `cd.txt`, en la página del curso:

<http://www.ifisica.uaslp.mx/givan/index.php/course-material>

Parte A

Sea la función $S2$ definida como:

$$S2(a_0, a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^m (C_d(V) - p(V))^2. \quad (1)$$

La función $S2$ es la suma de las diferencias al cuadrado de m valores experimentales a una función polinomial de grado 4 de la forma:

$$p(V) = a_0 + a_1V + a_2V^2 + a_3V^3. \quad (2)$$

1.- Minimice la función $S2(a_0, a_1, a_2, a_3)$ con respecto a los coeficientes a_0, a_1, a_2, a_3 y escriba las fórmulas analíticas que definen el sistema lineal de ecuaciones de 4×4 que resulta de la condición de igualar el gradiente de la función escalar $S2(a_0, a_1, a_2, a_3)$ a cero:

$$\nabla S2(a_0, a_1, a_2, a_3) = \vec{0} \quad (3)$$

Esta es una generalización del ejemplo que se vio en clase para un polinomio lineal.

2.- Escriba este sistema lineal de ecuaciones en forma matricial en la forma $M\vec{a} = \vec{b}$, donde $\vec{a} = (a_0, a_1, a_2, a_3)$ es un vector columna cuyas componentes son precisamente los valores óptimos del polinomio de grado 3 que minimizan el cuadrado del error de los datos con respecto a esta función.

Genere un archivo de texto donde se escriba de manera numérica la matriz M de 4×4 y en otro archivo donde se escriba de manera numérica el vector \vec{b} .

Parte B

1.- Resuelva el anterior sistema de ecuaciones y encuentre el vector solución \vec{a} .

2.- Grafique el polinomio $p(V)$ usando los coeficientes optimos a_0, a_1, a_2, a_3 junto con los datos experimentales e incluya la gráfica en un documento pdf.

3.- Incluya el valor de la capacidad diferencial $C_d(V)$ para $V = 0.45$ V.

Adjunte **de manera individual** los programas fuente con extensión .f90 (o la que corresponda al lenguaje que utilice) junto con los archivos que contengan la matriz numérica M , el vector \vec{b} , y un documento en pdf que incluya la gráfica de los los datos experimentales comparados con el polinomio $p(V)$, así como el valor de la capacidad diferencial $C_d(V)$ para $V = 0.45$ V, y envíelos con su nombre al correo electrónico que aparece abajo a más tardar el sábado 23 de julio de 2016, a las 20:00. Si la entrega se realiza después de esta hora y antes de las siguientes 24 horas habrá una penalización del 50%. Después de este tiempo no tendrá valor.

metnum2016@gmail.com

Se calificará:

1.- Claridad del código: las diferentes estructuras y variables deberán estar comentadas.

2.- Claridad de la documentación.

El plagio de programas no está permitido.