

## Introducción a la computación científica con Python

### Clase 5 – parte 1: SciPy

#### Práctico

Enunciado general:

En la tabla 1 se recogen los valores de un ensayo de tracción de metales. **S** es la tensión que resiste el material (en Megapascals) y **e** es la deformación que sufre (adimensional). Los resultados están graficados en la figura 1.

e [–]	S [MPa]
0.0	0
7.388e-09	20
5.623e-07	40
7.088e-06	60
4.279e-05	80
1.726e-04	100
5.395e-04	120
1.413e-03	140
3.257e-03	160
6.801e-03	180
1.313e-02	200
2.383e-02	220
4.106e-02	240
6.771e-02	260
1.076e-01	280

Tabla 1.

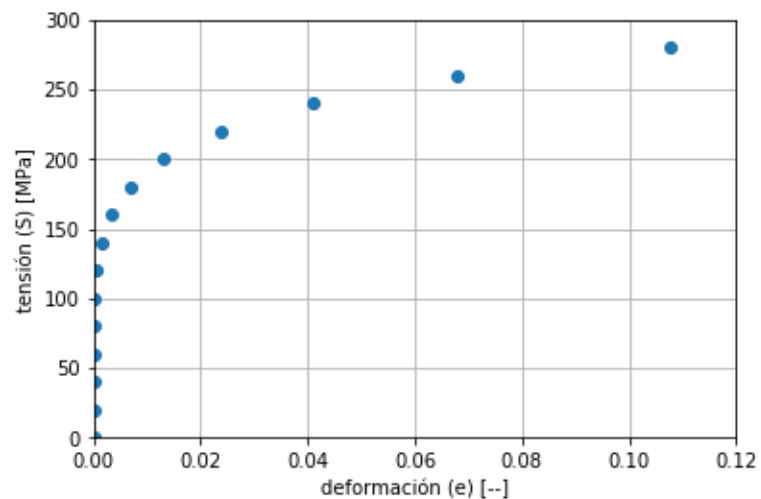


Figura 1.

Estos datos experimentales se pueden modelar por medio de una función potencial del tipo:

$$S = K e^n$$

donde K y n son constantes a determinar.

1) Obtenga las constantes K y n de los datos experimentales por medio de un ajuste lineal y obtenga el coeficiente  $R^2$  del ajuste (puede utilizar la librería scikit-learn o programar el cálculo de  $R^2$  usted mismo). Grafique la función de ajuste junto a los resultados experimentales.

2) Pruebe realizar la derivada de la función en todo el rango de **e** empleando la función `derivative` de SciPy. Reduzca el rango si lo considera conveniente.

Compare los valores de derivada obtenidos con `derivative` y aquellos obtenidos con la función `DeriCentrada` vista en clase.

3) De forma equivalente, realice la integral definida entre 0 y 1.076e-01 de la función de ajuste y de los datos experimentales, empleando las funciones `quad` y `sims`. Compare los resultados.