

EJEMPLO APLICACIÓN DE UN AJUSTE LÍNEAL MULTIFACTORIAL A LA ECUACIÓN DE DEFECTO DE MASA UTILIZANDO UNA PLANILLA DE CÁLCULO

EXAMPLE OF APPLYING A MULTIFACTORIAL LINEAR FIT TO THE MASS DEFECT EQUATION USING A SPREADSHEET

Miguel Bustamante S.*

Resumen

Se presenta un ejemplo de ajuste multivariados utilizando la función de estimación lineal de hoja de la planilla de cálculo. En esta oportunidad utilizamos 3179 datos de defecto de masa, que fueron los puntos usados para calcular los coeficientes (pendientes) de la ecuación, de la fórmula de Weizsäcker. En general, la correlación es muy cercana a 1. Se obtiene valores cercanos a los informados, y la predicción del máximo de la energía de ligazón difiere de los datos experimentales. Este es un ejemplo donde aplicamos regresión lineal multivariada, en un ambiente de docencia en Física

Palabras Clave: Defecto de masa, ajuste lineal, planilla.

Abstract

Multivariate adjustment exercise is presented using the worksheet linear estimation function of the spreadsheet. This time we used 3179 mass defect data, which were the points used to calculate the coefficients (slopes) of the equation, of the Weizsäcker formula. In general, the correlation is very close to 1. Values close to those reported are obtained, and the prediction of the maximum binding energy differs from the experimental data. This is an exercise, where we apply multivariate linear regression, in a Physics teaching environment.

Keywords: Mass defect, adjust lineal, spreadsheet.

* m.bustamantesepulved@uandresbello.edu

Introducción

En los ramos experimentales de Física una herramienta importante es el ajuste de lineal. Esto es típico en experimentos como en la obtención de la constante elástica de un resorte, como en la rectificación del periodo de un péndulo simple para obtener la aceleración de gravedad. Estos ejemplos tienen una variable independiente y otra dependiente, que se expresa con la relación analítica.

$$Y = mX + n \quad (1)$$

donde m es la pendiente y n es la intersección en el eje Y .

Sin embargo, pocas veces se estudia una relación con más de una variable independiente, que tienen la forma

$$y = b + a_1X_1 + a_2X_2 + \dots + a_nX_n \quad (2)$$

En esta ecuación, a_i son conocidos como las pendientes (o coeficientes) de los factores X_i y b es la constante (intersección con el eje Y). El tipo de la ecuación 2 es una ecuación lineal, ya que solo tiene coeficiente multiplicando las variables independientes. Sobre la base de la ecuación 2, se dice que, Y depende de varias variables X_i , es multivariable (Hayashi, 2000; Winkelmann, 2008)

En la docencia de Física experimental, pocas veces se enseña análisis multivariado, o incluso de herramientas de ajuste del tipo multivariado. En este trabajo se presenta un ejemplo, donde se aplica esta metodología

La fórmula de defecto de masa

Uno del aspecto importante en el estudio de la física nuclear es la relación que se obtiene de la teoría de relatividad espacial, la equivalencia entre masa y energía $E =$

mc^2 (Serway & Jewett, 2018; Tipler & Mosca, 2003). Esto resulta trascendente al estudiar la masa de los núcleos. La masa de cada núcleo difiere de las sumas de las masas de los protones y neutrones. Esta diferencia entre las masas de los núcleos con la suma de las masas de neutrones y protones que la componen es distinta de cero, y es conocido como defecto de masa, según expresa la ecuación 3.

$$E_B(N, Z) = Zm_p + Nm_n - M(Z, N) \quad (3)$$

En la ecuación 3, Z es el número de protones, N el número de neutrones, m_p es la masa del protón ($m_p=938,272013 \text{ Mev}$), m_n la masa del neutrón ($m_n=939,565560 \text{ Mev}$) y $M(Z, N)$ es la masa atómica de Z protones y N neutrones. Por ejemplo, la diferencia de masa del ^2H es $2,2243 \text{ Mev}$ (Das & Ferbel, 2003; Evans, 1982).

Al estudiar la estructura del núcleo como las fuerzas que actúan al interior, y el efecto cuántico de un pozo de potencial donde existen niveles y acoplamientos magnéticos de protones y neutrones, se ha propuesto una ecuación que describe esta diferencia de masa o llamada defecto de masa, representada por la ecuación 4

$$E_B = a_1A - a_2A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} - a_4 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - \delta(A, Z) \quad (4)$$

Con

$$\delta(A, Z) = \begin{pmatrix} a_5/\sqrt{A} & N\text{impar}, Z\text{impar} \\ -a_5/\sqrt{Z} & N\text{par}, Z\text{par} \\ 0 & \text{Otros casos} \end{pmatrix}$$

Donde A es el número de nucleones, es decir la cantidad total de protones y neutrones en el núcleo. Sin embargo, la ecuación 4 no es la única y tiene variantes, dependiendo de los investigadores, como muestra la ecuación 5.

$$E_B = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} - a_4 \frac{Z(Z - 1)}{A^{1/3}} - \delta(A, Z) \quad (5)$$

Y también, en la expresión de la paridad $\delta(N, A)$, que puede cambiar a

$$\delta(N, A) = \begin{pmatrix} a_5/A^{3/4} & N, \text{ impar, Zimpar} \\ -a_5/A^{3/4} & N, \text{ par, Zpar} \\ 0 & \text{Otro caso} \end{pmatrix}$$

El primer término de la ecuación 4 y 5 se relaciona con el volumen del núcleo, el segundo término con la energía superficial, el tercer término, es por el término de asimetría entre el número de protones y neutrones, el cuarto término es por la repulsión electrostática o repulsión

Colombiana, y el último término es conocido como el término de paridad, que captura el efecto de acoplamiento del spin.

Los valores a_i, δ se obtuvieron con un ajuste del tipo lineal multivariado de los datos de defecto de masa de los núcleos. En la Tabla 1 se presentan los valores de las “pendientes” asociados a los coeficientes por distintos autores Fermi, Wapstra (Das & Ferbel, 2003; Wapstra, 1958).

Tabla 1. Coeficientes (pendientes) ajustados en distintas referencias

Coeficientes (Mev)	Fermi	Wapstra	Das & Ferbel
a1	14	15,835	15,6
a2	13	18,33	16,8
a3	19,3	23,2	23,3
a4	0,589	0,714	0,72
a5/ (A ^{1/2})		11,2	
a5/ (A ^{3/4})	33,5		34

Para implementar el ajuste mencionado, se debe obtener las masas atómicas de cada elemento e isótopo. Para esto, usamos el programa Mathematica 12 (Wolfram, 2003), con acceso a los valores de las masas de los 3179 isótopos conocidos, hasta el elemento ²⁹³Uuo. Esta información es entregada en unidades de u (unidad unificada de masa) que tiene un equivalente energético de 931,494061 Mev (1 u = 931,464061 Mev).

Con la información de las masas, y la masa del protón y neutrón calculamos por cada isótopo, el defecto de masa (ecuación 3). Con esta información, tenemos los valores de Y de nuestro análisis. En la expresión 3

y 4 tenemos cinco variables independiente: $X1=A$; $X2=-A^{2/3}$, $X3=-(A-2Z)^2/A$, $X4=-Z^2/A^{1/2}$ ó $X4=-Z(Z-1)/A^{1/2}$ y $X5=-\delta$ y depende de la expresión a usar: cinco o siete.

Estimación lineal

Para los ajustes se utiliza la función de la planilla “Estimación.Lineal”. En esta función se debe ingresar los valores Y, como los valores de X1, X2, X3, X4, y X5. Los valores de Xi están columnas separadas. En la función de la estimación lineal, se debe forzar el cálculo para que la constante sea cero, y que despliegue toda la información del cálculo: Los

coeficientes (pendientes), los errores de los coeficientes, el valor de factor de correlación al cuadrado (R^2), como los grados de libertad del ajuste.

Como ilustración, el primer ajuste va a ser con la función de la ecuación 3, es decir

$X_4 = Z_2/A^{1/2}$, y δ viene dado por la expresión 5. Esto se observa en la Tabla 2, que corresponde a los 10 primeros isótopos. Los resultados del ajuste a esta tabla 2 se muestran a continuación. Tabla 2: Muestra de la hoja de cálculo para el ajuste.

Tabla 2. Muestra de la hoja de cálculo para el ajuste

Z	A	DeltaMasa	X1=A	X2=-A^(2/3)	X3=-(A-2Z)^2/A	X4=-Z^2/A^1/3	X5=-delta
1	1	-1,99723E-05	1	-1	-1	-1	0
1	2	2,224727658	2	-1,58740105197	0	-0,7937005259841	-0,707106781
1	3	8,482142067	3	-2,08008382305	-0,3333333333333333	-0,693361274350635	0
1	4	5,598598092	4	-2,51984209979	-1	-0,629960524947437	-0,5
1	5	6,683891634	5	-2,92401773821	-1,8	-0,584803547642573	0
1	6	5,785102827	6	-3,30192724889	-2,666666666666667	-0,550321208149104	-0,40824829
1	7	6,58163321	7	-3,65930571002	-3,57142857142857	-0,52275795857471	0
2	3	7,718185312	3	-2,08008382305	-0,3333333333333333	-2,77344509740254	0
2	4	28,29598408	4	-2,51984209979	0	-2,51984209978975	0,5
2	5	27,40954143	5	-2,92401773821	-0,2	-2,33921419057029	0
2	6	29,26881339	6	-3,30192724889	-0,666666666666667	-2,20128483259642	0,40824829

En la Tabla 3 se presenta el resultado de los coeficientes que acompañan los términos $X1$, $X2$, $X3$, $X4$ y $X5$. Los errores de los coeficientes se presentan en la fila inferior. El factor de correlación del ajuste está en la tercera fila, primera columna,

que está dando un valor muy cercano a 1. Como el ajuste está forzado a pasar por el origen, el valor de la constante es 0 (esquina superior derecha de la tabla) y no tiene error asociado. Este procedimiento se repite para cada ajuste que se quiera hacer.

Tabla 3. Resultados del ajuste para la expresión 1

	a5	a4	a3	a2	a1	
Pendientes	10,06027434	0,685308168	22,31004661	15,83904099	15,22071138	0
Errores	0,852523658	0,001353209	0,048279975	0,061291251	0,019520703	#N/D
R^2	0,999989726	3,887480048	#N/D	#N/D	#N/D	#N/D
	61749261,87	3172	#N/D	#N/D	#N/D	#N/D
	4665928947	47936,85356	#N/D	#N/D	#N/D	#N/D

Resultados de los ajustes

Se ajustará por estimación lineal con las siguientes ecuaciones:

Expresión 1:

$$E_{B1} = a_1A - a_2A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} \rightarrow -a_4 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - \delta(A, Z),$$

Expresión 2:

$$E_{B2} = a_1A - a_2A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} \rightarrow -a_4 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - \delta(A, Z),$$

con la función δ dado por la ecuación 4.

Expresión 3

$$E_{B3} = a_1A - a_2A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} \rightarrow -a_4 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - \delta(A, Z),$$

con δ dado por la ecuación 5.

Expresión 4:

$$E_{B2} = a_1A - a_2A^{2/3} - a_3 \frac{(A - 2Z)^2}{A} \rightarrow -a_4 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - \delta(A, Z)$$

con δ dado por la ecuación 5.

Los resultados del ajuste de cada expresión se presentan en la Tabla 4

Tabla 4: Valores de las pendientes (coeficientes) usando la función estimación lineal

Expresión	a1	$\Delta a1$	a2	$\Delta a2$	a3	$\Delta a3$	a4	$\Delta a4$	a5	$\Delta a5$	R2
1	15,22	0,02	15,84	0,06	22,31	0,05	0,685	0,001	10,1	0,9	0,99998973
2	15,25	0,02	16,24	0,06	22,17	0,05	0,687	0,001	10,1	0,9	0,99998966
3	15,22	0,02	15,84	0,06	22,31	0,05	0,685	0,001	19,5	2,0	0,99998959
4	15,25	0,02	16,24	0,06	22,17	0,05	0,687	0,001	19,6	2,0	0,99998952

Discusión

De los ajustes obtenidos (Tabla 4), los valores de los coeficientes de las Expresiones 1, 2, 3 y 4. El efecto del cambio de Z^2 a $Z(Z-1)$ no implica mayor cambio en los ajustes, así el coeficiente asociado a la acción coulombiana no es afectado por el cambio de expresión. Es claro que la forma analítica de los términos afecta en el valor de los coeficientes como lo es el factor a_5 . Sin embargo, al comparar con los coeficientes informados por distintos autores, hay discrepancia del resultado, hay diferencia entre los informados entre ellos mismos (Tabla 1). Si hay similitud en los primeros factores de a_1 a a_4 . Sin embargo, el valor de a_5 tiene fuertes discrepancia. En el ajuste de las expresiones 1 y 2 se obtiene $a_5 = 10,1 \pm 0,9$

Mev cercano a 11,2 informado, pero el ajuste de las expresiones 3 y 4 ($a_5 = 19,5 \pm 2 \text{Mev}$), en comparación de 34 *Mev*, es prácticamente un poco más de la mitad.

El gráfico de las expresiones de la energía por ligazón basado en la ecuación Wapstra, y considerando las expresiones 1 a la 4 en función del defecto de masa experimental, se muestra en Figura 1 y Figura 2

Como se observa en el gráfico (Figura 1) hay una convergencia para valores mayores, pero existe diferencias en los valores menores. Esto se observa mejor, al graficar la energía de ligazón por nucleón, basado en los datos experimentales, como los ajustes de Wapstra (Wapstra, 1958) y las expresiones 1 al 4 (Figura 2). La

diferencia se aprecia mayor en los núcleos más livianos que en los pesados.

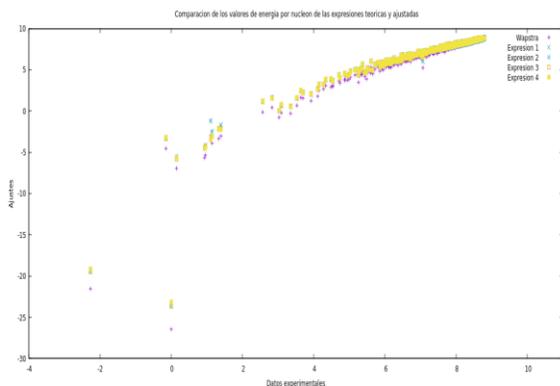


Figura 1. Comparación de la energía de ligazón experimental, comparado con las expresiones de Wapstra y las expresiones de 1 al 4

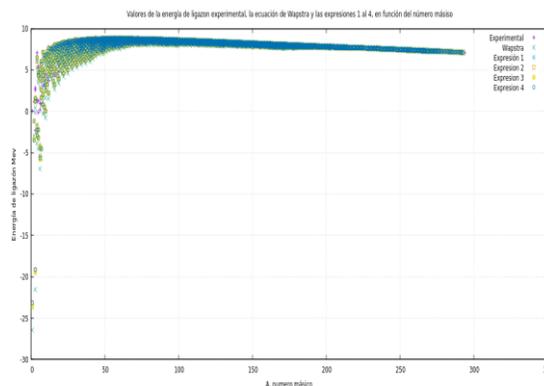


Figura 2. Energía de ligazón en función del número másico. Valor experimental, ajuste Wapstrap, y expresiones 1 al 4.

En la energía de ligazón nuclear, el valor máximo, según los datos calculados de los datos experimentales, corresponde al ^{62}Ni . Las predicciones de los ajustes y la comparación con Wapstra y las ecuaciones 1,2,3 y 4 se muestran en la Tabla 5.

Según la Tabla 5 coincide el valor de ^{62}Ni para el valor experimental, como el ajuste

de Wapstrap. Sin embargo, el valor de la energía de ligazón por nucleón para las expresiones del 1 al 4 es el ^{58}Fe . Esta diferencia en los resultados se debe al tipo de ajuste, como también, el número de datos a ajustar. Es claro Wapstrap pudo predecir mejor el máximo, pero no es claro que utilizara todos los datos disponibles actualmente

Tabla 5. Valor máximo de la energía por nucleón, real y por el ajuste

	Experimental	Wapstrap	Expresión 1	Expresión 2	Expresión 3	Expresión 4
Máximos	8.79464	8.72951	8.84943	8.84810	8.84273	8.84141
Elementos	^{62}Ni	^{62}Ni	^{58}Fe	^{58}Fe	^{58}Fe	^{58}Fe

Conclusiones

Se ha podido calcular los parámetros de la ecuación semiempírica del defecto de masa, por medio de una planilla de cálculo. Los valores obtenidos de los parámetros son cercanos a los informados, excepto cuando la dependencia en la paridad no va sobre la raíz de número másico A. En general, en los ajustes publicados, no informan del error asociado a los parámetros a_i de la ecuación. Tampoco

señalan claramente la cantidad de datos usados en el ajuste.

En este trabajo se utilizaron 3179 datos. Aunque las ecuaciones son válidas, son de la década de los 50 al 60. A pesar de esto, se puede calcular por una estimación lineal los parámetros de la ecuación de defecto de masa en una planilla de cálculo.

Bibliografía

Das, A., & Ferbel, T. (2003). *Introduction to Nuclear and Particle Physics: 2nd Edition* (2nd ed. edition). World Scientific Publishing Company.

Evans, R. D. (1982). *Atomic Nucleus*. Krieger Pub Co.

Hayashi, F. (2000). *Econometrics*. 2000. Princeton University Press. Section, 1, 60-69.

Serway, R. A., & Jewett, J. W. (2018). *Physics for Scientists and Engineers with Modern Physics* (10th edition). Cengage Learning.

Tipler, P. A., & Mosca, G. (2003). *Physics for Scientists and Engineers: Standard Version* (5th edition). W. H. Freeman.

Wapstra, A. H. (1958). *Atomic Masses of Nuclides* (pp. 1-37). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-45901-6_1

Winkelmann, R. (2008). *Econometric Analysis of Count Data*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-78389-3>

Wolfram, S. (2003). *The mathematica book* (Vol. 1). Wolfram Research, Inc.