Tarea-Práctica 6. Métodos numéricos básicos en física computacional

Diferenciación numérica

Fecha de entrega: **31 de octubre de 2024**

1. **Diferenciación numérica** (valor 2 puntos).

   Crea una función por el usuario `f(x)` que devuelva el valor $1 + \frac{1}{2}\tanh 2x$, luego usa una **diferencia central** para calcular la derivada de la función en el rango $-2 \leq x \leq 2$. Calcula la derivada analíticamente y haz una gráfica con tu resultado numérico y la respuesta analítica en el mismo gráfico. Puede resultar útil graficar la respuesta exacta como líneas y la numérica como puntos. (Hint: usa la función `tanh` del paquete `math`.)

2. **Campo eléctrico de una distribución de cargas** (valor 4 puntos).

   Supongamos que tenemos una distribución de cargas y queremos calcular el campo eléctrico resultante. Una forma de hacerlo es calcular primero el potencial eléctrico ϕ y luego tomar su gradiente. Para una carga puntual q en el origen, el potencial eléctrico a una distancia r del origen es $\phi = q/4\pi\epsilon_0 r$ y el campo eléctrico es $\vec{E} = -\nabla\phi$.

   (a) Suponiendo que tienes dos cargas, de $+1\,\mathrm{C}$ y $-1\,\mathrm{C}$ (respectivamente), separadas 10 cm. Calcula el potencial eléctrico resultante en un plano cuadrado de $1\,\mathrm{m} \times 1\,\mathrm{m}$ que rodea las cargas y pasa a través de ellas. Calcula el potencial en puntos espaciados a 1 cm en una cuadrícula y haz una visualización en la pantalla del potencial usando un gráfico de densidad.

   (b) Ahora calcula las derivadas parciales del potencial con respecto a x e y, para encontrar el campo eléctrico en el plano xy y realiza una visualización de dicho campo.

   Lo anterior es un poco más complicado que visualizar el potencial, porque el campo eléctrico tiene **magnitud y dirección**. Una forma de hacerlo podría ser hacer dos gráficos de densidad, uno para la magnitud y otro para la dirección, este último usando el esquema de color “`hsv`” en `pylab`, que es un esquema de arcoíris que pasa por todos los colores pero comienza y termina con el mismo tono de rojo, lo que lo hace adecuado para representar cosas como direcciones o ángulos que dan la vuelta al círculo completo y terminan donde comenzaron. Una visualización más sofisticada podría usar el objeto de flecha del paquete `visual`, dibujando una cuadrícula de flechas con la dirección y la longitud elegidas para representar el campo.

(c) Ahora supongamos que tenemos una distribución continua de carga sobre un cuadrado de $L \times L$. La densidad de carga en $\frac{C}{m^2}$ es:

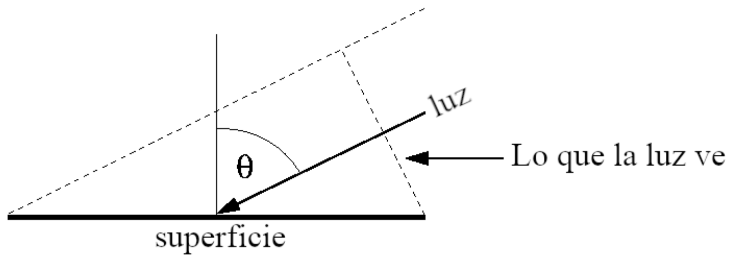
$$\sigma(x, y) = q_0 \sin \frac{2\pi x}{L} \sin \frac{2\pi y}{L}.$$

Calcula y visualiza el campo eléctrico resultante en puntos espaciados a 1 cm en 1 metro cuadrado del plano xy para el caso donde $L = 10\,\mathrm{cm}$. La distribución de carga está centrada en el medio del área visualizada y $q_0 = 100\,\frac{C}{m^2}$.

Tendrás que realizar una integral doble sobre x e y, luego diferenciar el potencial respecto a la posición para obtener el campo eléctrico. Elige cualquier método de integración que parezca apropiado para las integrales.

3. **Procesamiento de imágenes y *STM*** (valor 4 puntos).

Cuando la luz incide sobre una superficie, la cantidad que cae por unidad de área depende no sólo de la intensidad de la luz, sino también del ángulo de incidencia. Si la luz forma un ángulo θ con la normal, sólo "ve" una fracción $\cos\theta$ de área, por unidad de área real en la superficie:



Así, la intensidad de la iluminación es $a\cos\theta$, si a es la intensidad bruta de la luz. Esta simple ley física es un elemento central de los gráficos por computadora en 3D. Nos permite calcular cómo incide la luz sobre objetos tridimensionales y, por tanto, cómo se verán cuando se iluminen desde varios ángulos.

Supongamos, por ejemplo, que miramos la Tierra desde arriba y vemos sus montañas. Conocemos la altura de las montañas $w(x, y)$ en función de la posición en el plano, por lo que la ecuación para la superficie de la Tierra es simplemente $z = w(x, y)$, o equivalentemente $w(x, y) - z = 0$, y el vector normal $\vec{v}$ a la superficie está dado por el gradiente de $w(x, y) - z$ de la siguiente manera:

$$\vec{v} = \nabla[w(x,y) - z] = \begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} [w(x,y) - z] = \begin{pmatrix} \partial w/\partial x \\ \partial w/\partial y \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Ahora supongamos que tenemos luz entrante representada por un vector $\vec{a}$ con magnitud igual a la intensidad de la luz. Entonces el producto escalar de los vectores $\vec{a}$ y $\vec{v}$ es:

$$\vec{a} \cdot \vec{v} = |\vec{a}|\,|\vec{v}| \cos\theta,$$

donde θ es el ángulo entre los vectores.

Entonces, la intensidad de la iluminación de la superficie de las montañas es:

$$I = |\vec{a}| \cos\theta = \frac{\vec{a} \cdot \vec{v}}{|\vec{v}|} = \frac{a_x(\partial w/\partial x) + a_y(\partial w/\partial y) - a_z}{\sqrt{(\partial w/\partial x)^2 + (\partial w/\partial y)^2 + 1}}.$$

Tomemos un caso simple donde la luz brilla horizontalmente con intensidad unitaria, a lo largo de una línea en un ángulo ϕ en sentido contrario a las manecillas del reloj desde el eje este-oeste, de modo que $\vec{a} = (\cos\phi, \sin\phi, 0)$. Entonces nuestra intensidad de iluminación se simplifica a:

$$I = \frac{\cos\phi\,(\partial w/\partial x) + \sin\phi\,(\partial w/\partial y)}{\sqrt{(\partial w/\partial x)^2 + (\partial w/\partial y)^2 + 1}}.$$

Así, si podemos calcular las derivadas de la altura $w(x, y)$ y sabemos ϕ, entonces podemos calcular la intensidad en cualquier punto.

(a) El archivo adjunto `altitudes.txt`, contiene la altitud $w(x, y)$ en metros sobre el nivel del mar (o profundidad bajo el nivel del mar) de la superficie de la Tierra, medida en una cuadrícula de puntos (x, y). Escribe un programa que lea este archivo y almacene los datos en una matriz. Luego calcula las derivadas $\partial w/\partial x$ y $\partial w/\partial y$ en cada punto de la cuadrícula. Explica qué método utilizaste para calcularlos y por qué. (Hint: probablemente tendrás que usar más de un método para obtener cada punto de la cuadrícula porque suceden cosas incómodas en los bordes de la misma). Para calcular las derivadas, necesitarás saber el valor de h y la distancia en metros entre puntos de la cuadrícula, que es de aproximadamente $30{,}000\,\mathrm{m}$ en este caso[1].

[1] En realidad, no es precisamente constante porque estamos representando la Tierra de forma esférica en un mapa plano, pero $h = 30{,}000\,\mathrm{m}$ nos dará resultados razonables.

(b) Ahora, usando tus valores para las derivadas, calcula la intensidad para cada punto de la cuadrícula, con $\phi = 45^\circ$, y haz un gráfico de densidad de los valores resultantes en el que el brillo de cada punto depende de la correspondiente valor de intensidad. Si lo haces funcionar correctamente, la gráfica debería verse como un mapa en relieve del mundo; deberías poder ver los continentes y las cadenas montañosas en 3D. (Algunos de los problemas comunes al hacer esto, pueden ser: un mapa que está al revés o de lado, o un mapa en el que el relieve que está "de adentro hacia afuera", lo que significa que las regiones altas se ven bajas y *viceversa*. Trabaja con los detalles de tu programa hasta que obtiengas un mapa que te parezca adecuado.) Hint: Ten en cuenta que el valor de la intensidad I de la fórmula anterior puede ser positivo o negativo; oscila entre $+1$ y -1. ¿Qué significa una intensidad negativa? Significa que el área en cuestión está *en sombras* (es decir, que se encuentra en el lado equivocado de la montaña para recibir alguna luz). Podrías representar esto coloreando esas áreas del mapa completamente de negro, aunque en la práctica obtendrás una imagen más bonita (aunque tal vez menos realista) simplemente usando una gama continua de grises desde $+1$ hasta -1.

(c) El otro archivo adjunto llamado `stm.txt`, contiene una cuadrícula con valores de mediciones de un microscopio de efecto túnel (*scanning tunneling microscope* o ***STM***) de la superficie (111) del silicio. Un microscopio de efecto túnel (*STM*) es un dispositivo que mide la forma de superficies a nivel atómico siguiendo una punta afilada sobre la superficie y midiendo la *corriente de efecto túnel cuántico* en función de la posición. El resultado final es una cuadrícula de valores que representan la altura de la superficie en función de la posición y los datos del archivo `stm.txt` contienen precisamente esa rejilla de valores. Modifica tu programa anterior para visualizar los datos STM y así crear una imagen 3D de cómo se ve la superficie de silicio. El valor de h para las derivadas en este caso es de alrededor de $h = 2.5$ (en unidades arbitrarias).