Taller 2

Interpolación, raíces y métodos de integración

2023-09-13

Para la solución de los siguientes ejercicios, cree una copia del repositorio del curso complementario utilizando **fork** con el título **MetCompCompl-202320_{APELLIDO1}_{APELLIDO1}**.En la carpeta **Taller_2**, guarde los archivos producidos en el taller como se describe en los enunciados a continuación.

1. Derivadas [20 pt]

Un bucle de cobre de 25 cm de diamétro y resistencia $R = 1{,}75$ kΩ se encuentra en una región de campo magnético alternante $\mathbf{B} = B_0 \cos(2\pi f t)(-\hat{\mathbf{z}})$ como se muestra en la figura. En $t = 0$, el bucle empieza a girar a una velocidad angular constante Ω.

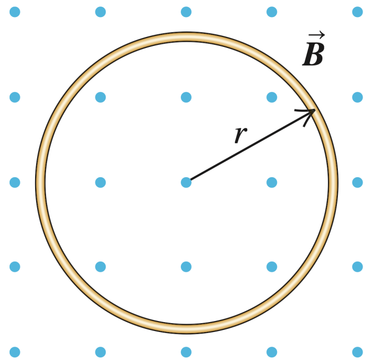

Figura 1: Bucle de cobre en un campo magnético no uniforme.

1. Utilizando $\Phi_B = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} = BA\cos\theta$ donde θ es el ángulo entre el campo magnético y el área, demuestre que el flujo magnético a través del bucle se puede escribir como

$$\Phi_B = \pi r^2 B_0 \sin(\Omega t) \cos(2\pi f t)$$

2. Grafique la corriente inducida sobre el bucle en función del tiempo para $B_0 = 0{,}05T, f = 1000Hz, \Omega = 3{,}5rad/s$. Recuerde que por la ley de Faraday-Lenz, $I = -\frac{1}{R}\frac{d\phi_B}{dt}$.
3. Encuentre los primeros tres instantes de tiempo en los que la corriente sobre el bucle es cero.

2. Fórmulas de Newton-Cotes [20 pt]

Las fórmulas de Newton-Cotes para la integración de una función $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ se construyen dividiendo este en subintervalos de m puntos igualemnte espaciados $\{x_i, x_{i+1}, \ldots, x_m\}$ e interpolar un polinomio de Lagrange de grado $m-1$ y hacer esta integral. Posteriormente, se suman los resultados de las integrales de todos los puntos y se obtendrá un resultado de la forma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} c_i f(x_i) \tag{1}$$

donde c_i se conocen como los pesos. A partir de esta notación, escoja **SOLAMENTE UNO** de los siguientes puntos para resolver.

2.1. Regla de Simpson de 3/8

La fórmula de Simpson de 3/8 consiste en dividir el intervalo en subintervalos de $m = 4$ puntos cada uno. Demuestre que la integral de cualquiera de estos subintervalos está dada por

$$\int_{x_i}^{x_{i+3}} f(x)dx \approx \frac{3h}{8}(f(x_i) + 3f(x_{i+1} + 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3}))$$

2.2. Regla de Boole

La fórmula de Boole consiste en dividir un intervalo $[a, b]$ en subintervalos de $m = 5$ puntos cada uno. Utilizando estos 5 puntos, se interpola un polinomio de Lagrange de grado cuatro y se integra desde x_i hasta x_{i+4} para obtener

$$\int_{x_i}^{x_{i+4}} f(x)dx = \frac{2h}{45}\left(7f(x_i) + 32f(x_{i+1}) + 12f(x_{i+2}) + 32f(x_{i+3}) + 7f(x_{i+4})\right)$$

Demuestre a partir de este resultado que para la regla de Boole, los pesos en la ecuación 1 estarán dados por

$$c_i = \begin{cases} 7 & i = 0, i = n-1 \\ 32 & i \in \{1, 3, 5, n-2\} \\ 12 & i \in \{2, 6, 10, n-3\} \\ 14 & i \in \{4, 8, 12, n-5\} \end{cases}$$

A partir de esto, ¿qué condición se debe cumplir para el número de subintervalos $n - 1$?

3. Cuadratura Gaussiana [30 pt]

La aproximación de Gauss-Legendre consiste en encontrar los k nodos y pesos tal que

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} c_k f(x_k)$$

Se puede demostrar que para n nodos, estos están dados por los ceros de los *Polinomios de Legendre*, definidos mediante la fórmula de Rodrigues como

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n$$

1. En Python, escriba una función `legendre` que reciba como parámetro n y x y calcule el valor del n-ésimo polinomio de Legendre, $P_n(x)$.
2. Utilizando el método de Newton-Rhapson, escriba una función que retorne un arreglo con **todos** los ceros del n-ésimo de Legendre. *(Pista: La aproximación inicial para el i-ésimo cero del n-ésimo polinomio de Legendre es $x^{(0)} = \cos\left(\frac{4i+3}{4n+2}\pi\right)$, por tanto el n-ésimo Polynomio tiene n ceros.).*
3. Los pesos de Gauss-Legendre están dados a su vez por

   $$c_k = \frac{2}{(1 - x_k^2)[P_n'(x_k)]^2}$$

   donde x_k es el k-ésimo cero del polinomio n-ésimo de Legendre. Escriba una función en Python que dado un n, retorne el arreglo de pesos de Gauss-Legendre.
4. Compare el resultado de sus funciones hasta ahora verificando que para $n = 2$ obtenga $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, c_0 = c_1 = 1$.
5. Transforme una integral arbitraria $\int_a^b g(t)dt$ para poder utilizar la cuadratura de Gauss-Legendre. Sea claro y conciso en su demostración.
6. Bajo condiciones de alta presión, la ecuación de estado que mejor modela el comportamiento de los solidos es la *ecuación de Murnaghan*,

   $$p(V) = \frac{B_0}{B_0'}\left[\left(\frac{V}{V_0}\right)^{-B_0'} - 1\right]$$

   donde B_0, B_0' son constantes asociadas al módulo de compresilibidad del material. Para un material como la calcita ($CaCO_3$) se tiene $V_0 = 285{,}92$ Å, $B_0 = 75{,}27$ GPa, $B_0' = 4{,}63$ [4]. Utilizando la cuadratura de Gauss-Legendre, calcule el trabajo requerido para comprimir el volumen de la calcita un 19 %.
7. Encuentre el trabajo requerido para comprimir la calcita,$W(V)$, de forma analítica.
8. Para la compresión de 19 %, grafique el error relativo de la integral de Gauss-Legendre para $1 \leq n \leq 5$.

Figura 2: La calcita es el mineral más estable del carbonato cálcico ($CaCO_3$).

4. Método de Monte Carlo [30 pt]

Figura 3: Representación del Laboratorio Nacional de los Álamos, donde se desarrolló el método Monte Carlo en la pelicula Oppenheimer (2023).

El método de Monte Carlo fue desarrollado de forma independiente por Enrico Fermi y por Stanisław Ulam (en conjunto al matemático John von Neumman) en el Laboratorio Nacional de Los Álamos al estudiar la difusión de neutrones para el desarrollo de la bomba de hidrógeno[2] [3]. La ecuación del transporte de neutrones requiere calcular la tasa de producción de neutrones [1] por medio de la integral

$$\int\int\int_{\Omega} \sin(x^2+y^2+z^2)e^{x^2+y^2+z^2}dV$$

donde Ω es la esfera de radio 1 centrada en el origen.

1. Utilizando el método de Monte Carlo para N puntos aleatorios, aproxime el valor de esta integral.
2. Encuentre la integral de forme analítica.
3. Construya la gráfica del error relativo de la integral en función de N. Muestre el eje x de forma logarítmica. ¿Cuál es la relación del error relativo con N?

Referencias

[1] Elmer Eugene Lewis y Warren F Miller. «Computational methods of neutron transport». En: (1984).

[2] Nicholas Metropolis y Stanislaw Ulam. «The monte carlo method». En: *Journal of the American statistical association* 44.247 (1949), págs. 335-341.

[3] Eckhardt Roger. «Stan Ulam, John Von Neumann, and the Monte Carlo Method». En: *Los Alamos Science* 15 (1987), págs. 131-137.

[4] B. Silvi y P. D'Arco. *Modelling of Minerals and Silicated Materials*. Topics in Molecular Organization and Engineering. Springer, 1997. ISBN: 9789401737982.