

Pràctica 4: Van der Waals

Objectius: [derivades](#), [Newton-Raphson](#), [bisecció](#), [external](#)

— Nom del programa **P4-18P.f**.

Precisió de reals: **double precision**. Utilitza les subroutines desenvolupades a la prepràctica. Tots els resultats a: **P4-18P.res.dat**, afegeix una línia descriptiva separant els diferents resultats. Deixa dues línies en blanc per separar els blocs i utilitza “index” a gnuplot.

L'equació de Van der Waals per descriure la transició líquid gas es pot escriure com (en unitats reduïdes T , P i V),

$$P = \frac{8T}{3V - 1} - \frac{3}{V^2},$$

on els valors físics del volum reduït son $V > 1/3$ (valors $V \leq 1/3 \Rightarrow$ pressions negatives).

- 1) L'estabilitat de les isoterms es pot analitzar a partir de la primera derivada de $P(V)$ de l'equació d'estat.

Genera una taula amb 80 punts equiespaiats de V , $V \in [1/3 + 0.1, 4]$, de la isoterma, (V, P) per a $T = 0.92$. Calcula numèricament la seva derivada $P'(V)$ amb la subrutina **defunT1(ndat,funci,x,dfunci)** de la prepràctica i escriu-la en el fitxer de resultats: $V, P'(V), P(V)$. Fes una gràfica **P4-18P-fig1.png** amb la isoterma anterior que contingui només els punts (V, P) que siguin estables, $P'(V) < 0$.

pista: `plot "fichero.dat" u 1:($2<0?$3: 1/0) w l t"P(V)"`

- 2) Considera el polinomi de grau 3,

$$\text{POL}(V, T) = 4TV^3 - 9V^2 + 6V - 1$$

que apareix al buscar els límits de metastabilitat de les isoterms descrites per l'equació de Van der Waals sota la temperatura crítica. Genera una figura amb una corba a $T = 0.92$, **P4-18P-fig2.png**, amb $V \in [1/3 + 0.1, 2]$.

pista: \Rightarrow **COMMON** per a passar T a la function que calculi el polinomi..

- 3) Programa un algorisme de bisecció que trobi les dues arrels del polinomi ($T = 0.92$), fent servir la informació visual de la representació gràfica, amb una precisió de **1.d-12**.

Escriu al fitxer de resultats els valors de les dues arrels.

- 4) A continuació, dins del mateix programa, estudia la convergència del mètode de Newton-Raphson per trobar les dues arrels físiques del polinomi a $T = 0.98$ començant des de 5 punts diferents, $V_0 = 0.36, 0.48, 0.99, 1.18$, i 1.56 amb una precisió semblant. Escriu al fitxer (només en els casos que trobi arrels físiques $V > 1/3$): els valors V_0 , el número d'iteracions necessàries i el valor de l'arrel aconseguida.

pista: \Rightarrow **COMMON** per a passar T a la function que calculi la derivada del polinomi.

- 5) (extra) Dibuixa el diagrama de fases P, T . A l'apartat 3) has trobat dues arrels (dos valors de V : V_G i V_L) per cada valor de T (G-gas, L-líquid). Amb l'equació d'estat pots calcular les pressions P_L i P_G corresponents a aquests dos volums. Aquesta informació permet dibuixar el diagrama P, T , amb dos valors de P per cada T . Això ho podeu fer a mà apuntant un arxiu amb 3 columnes T, P_L i P_G , **P4-18P-extra.dat** i escollir els valors de T discrecionalment per tenir-ne un diagrama de fases clar. Genera una figura **P4-18P-fig3.png** amb el diagrama de fases.

Entregable: **P4-18P.f**, **P4-18P-res.dat**, **P4-18P-extra.dat** **P4-18P-fig1.png**, **P4-18P-fig2.png**, **P4-18P-fig3.png**, **scripts gnuplot**