Pràctica 4: Zeros de funcions i derivada (B2)

Qüestió 4: 0) Nom del programa **zerosP4.f**.

1) Considera el polinomi de grau 3 amb $V \in [1/3 + 0.1, 2]$,

$$\mathrm{POL}(V, T) = 4TV^3 - 9V^2 + 6V - 1 \tag{1.29}$$

que apareix al buscar els límits de metastabilitat de les isotermes descrites per l'equació de Van der Waals sota la temperatura crítica. Fes servir la funció **poli(n,po,v)** de la prepràctica per representar gràficament el polinomi. Genera una figura amb dues corbes, **poliP4.png**, per a dos valors de la temperatura, $T = 0.93$ i $T = 0.98$.

Nota 1: Els coeficients del polinomi en la variable V depenen de T.

Nota 2: **poli** es pot fer servir també per a la derivada del polinomi, que també és un polinomi.

2) Programa un algorisme de bisecció que trobi una arrel del polinomi (amb $V \in [1/3+0.1, 2]$ i $T = 0.91$), fent servir la informació visual de la representació gràfica, amb una precisió de **1.d-12**.

Escriu en un fitxer **bisecP4.dat** el resultat de cada iteracció de l'algorisme, 3 columnes: número de iteració, posició del zero (valor central), error (mida de l'interval).

3) A continuació, dins del mateix programa, estudia la convergència del mètode de Newton-Raphson per trobar les dues arrels del polinomi a $T = 0.91$ començant des dels 6 punts diferents, $V_0 = 0.45, 0.51, 0.9, 1, 1.01,$ i 1.34 amb una precisió semblant. Escriu un fitxer **nrP4.dat** amb 7 columnes que contingui el número de iteració k, i el valor corresponent de l'arrel, V. Genera una figura **nrP4.png** amb aquestes dades. Considera fer servir escales logaritmiques.

4) La estabilitat de les isotermes pot analitzar-se a partir de la primera derivada de $P(V)$ de la equació d'estat que, en unitats reduïdes, s'escriu,

$$P = \frac{8T}{3V - 1} - \frac{3}{V^2}\,. \tag{1.30}$$

Genera una taula amb 100 punts esquiespaiats de V, $V \in [1/3+0.1, 4]$, de les corresponents isotermes, (V, P) per a 5 valors de $T = 0.86, 0.88, 0.92, 0.94, 1.07$. Calcula numèricament la seva derivada $P'(V)$ amb la subroutina **derivada(ndat,x,funci,dfunci)** de la prepractica i escriu-la en un fitxer **derisotP4.dat**, 7 columnes, (V, P'1, P'2, P'3, P'4, P'5, P'6), una per a cada isoterma.

Fes una gráfica **estableP4.png** amb les isotermes anteriors que contingui només els punts (V, P) que siguin estables, $P'(V) > 0$,

- Extra: Dibuixa el diagrama de fases P, T. A l'apartat 3) has trobat dues arrels (dos valors de V: VGas i VLiquid) per cada valor de T. Amb l'equació d'estat de l'apartat 4) pots calcular les pressions PL i PG 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, PL i PG i escollir els valors de T discrecionalment per tenir-ne una diagrama de fases clar. Genera una figura **fasesP4.png** amb el diagrama de fases.

Entregable: 1 codi, 3 figures (4 amb l'extra), 3 fitxers de dades.