Métodos Numéricos

Segundo práctico. Tema 1.
Entrega: 8 de Junio de 2023

Nota sobre la programación FORTRAN:

- Los programas deben respetar las reglas básicas de buena programación.

  Se deben usar las sangrías adecuadamente. Las rutinas deben ser generales, sin hacer uso de las funciones específicas. Las rutinas deben estar dentro de sus respectivos módulos. Las funciones a emplear deben estar dentro de módulos. Los ciclos principales deben estar en el programa principal. Se aconseja definir la precisión global en un módulo específico. Hacer uso de los arreglos adecuados a la naturaleza del problema y cuando presentan un beneficio en el cálculo. Las rutinas deben tener los argumentos mínimos para su funcionamiento. Todo archivo de escritura debe ser cerrado adecuadamente.

- Los gráficos deben contener etiquetas en los ejes y en las leyendas de cada curva graficada, como así también poseer un título apropiado.

- Los gráficos deben hacerse en formato (*.pdf o *.png). Si esto le genera algún problema, por favor consulte con los profesores para ver otras opciones.

- Los archivos de datos preferentemente deben contener una primera línea descriptiva de los mismos.

PROBLEMA 1

Parte I

Escriba un programa en FORTRAN utilizando buenas prácticas de programación y en doble precisión que permita integrar una función utilizando el algoritmo del trapecio con paso variable.

El programa debe leer de un archivo de dos columnas los valores de las abscisas (x_i) y ordenadas (y_i) de cierta función cuya expresión desconocemos pero a la cual hemos podido medir en $N+1$ valores de la variable dependiente y_i para respectivos valores de la variable independiente x_i (con $i = 0, 1, 2, \ldots, N$).

Se considerará muy positivamente que el programa esté estructurado en un programa principal llamado `parcial2-p1.f90` y dos módulos, a saber:

- de precisión, llamado `mod-prec.f90` (utilizando ISO),
- de subrutinas, llamado `mod-metodos.f90`, en el cual habrá una subrutina para el método del trapecio con **puntos no equidistantes**.

El programa debe detectar automáticamente el número de filas del archivo de datos e imprimir en pantalla los valores de la estimación a la integración obtenida con el método solicitado.

Debe entregar

- el programa principal `parcial2-p1.f90`,
- el módulo de precisión `mod-prec.f90`,
- el módulo de métodos `mod-metodos.f90` y
- el script de compilación.

Parte II

Contexto físico

Los datos incluidos en el archivo adjunto `datos.dat` representan los tiempos de medición t_i (primera columna) y posición z_i (segunda columna) de una gota de agua en caída libre pero afectada por la resistencia impuesta por el aire. La posición se mide a lo largo de la perpendicular a la tierra (z), el origen de coordenadas se fija en el punto de partida de la gota, la cual tiene velocidad inicial nula.

Este experimento, ideado originalmente por el físico Philipp Lennard, ganador del Premio Nobel de Física en 1905 por sus investigaciones sobre los rayos catódicos y sus propiedades, consiste en medir durante la caída libre de la gota su posición para diferentes tiempos, los cuales, en este caso se escogieron equiespaciados.

A partir de suponer que la gota está sometida a la fuerza gravitacional que le ejerce la tierra y una fuerza restitutiva de rozamiento proporcional a su velocidad:

$$\vec{F} = \vec{F_g} + \vec{F_R} = -mg\hat{z} - cv\hat{z}$$

y usando las leyes de Newton, es posible deducir la posición z en función del tiempo, como veremos más adelante en este parcial. En este ejercicio no nos interesa que entiendan la física del experimento, pues lo verán más adeltante en la carrera, pero queremos que vean cómo se resuelven problemas físicos no triviales combinando variados métodos numéricos.

2.A) Lea los datos del archivo `datos.dat` y grafique las posiciones z_i en función del tiempo usando Gnuplot. Las unidades del tiempo y la posición son, respectivamente, segundos y metros. Llame `figura2a.pdf` al gráfico y `figura2a.gnu` al script. Describa cualitativamente el comportamiento de la gota en un apartado de un documento llamado `explicaciones.pdf` el cual debe ser confeccionado en LaTex, Word u otro editor de texto y fórmulas.

2B) Calcule, **numéricamente**, la velocidad de la gota para cada uno de los tiempos de medición. Use el método centrado de cinco puntos en los puntos centrales, el método centrado de tres puntos en el segundo y el anteúltimo y el de dos puntos en el primer y en el último punto. Para hacer esta parte, agregue al módulo `mod-metodos.f90` del programa de la primera parte de este ejercicio, una subrutina que calcule la derivada numérica con los métodos solicitados. La salida debe ser un archivo llamado `salida.dat` que tenga tres columnas, con una fila para cada tiempo de medición, las cuales serán:

- el tiempo de medición t_i,
- la posición z_i de la gota en t_i, y
- la velocidad v_i de la gota en t_i.

2C) Grafique, a partir del archivo `salida.dat` y usando GnuPlot, la velocidad v_i en función del tiempo t_i. Llame `figura2c.pdf` al gráfico y `figura2c.gnu` al script. Describa cualitativamente el comportamiento temporal de la velocidad de la gota en el archivo `explicaciones.pdf`.

2D) Grafique, a partir del archivo `salida.dat` y usando GnuPlot, la velocidad v_i en función de posición z_i. Llame `figura1d.pdf` al gráfico y `figura1d.gnu` al script.

2E) Sabiendo que la ecuación que describe la posición de la gota en función del tiempo es:

$$z(t) = -g\,\alpha\,t + g\,\alpha^2\,\left(1 - e^{-t/\alpha}\right)$$

realice un ajuste de mínimos cuadrados de la posición en función del tiempo **usando GnuPlot** a partir de los datos provistos en el archivo `datos.dat` y obtenga una estimación de los parámetros α y g. Explicite los resultados del ajuste en el archivo `explicaciones.pdf`.

Use que $\alpha = m/c$ y que la masa de la gota es $m = 0.001Kg$ para determinar el valor de c, que como vio, es la constante de proporcionalidad entre fuerza de rozamiento del aire y la velocidad de la gota. Explicite esta pequeña cuenta en al archivo `explicaciones.pdf` y no olvide por favor el tratamiento de las unidades. Envíe el archivo `.log` del ajuste.

2F) Grafique, usando GnuPlot en un mismo gráfico, la curva $z(t)$ ajustada con los puntos medidos superpuestos. Llame `figura1f.pdf` al gráfico y `figura1f.gnu` al script. Envíe también el archivo `figura1f.log`.

2G) Al descender la gota por efecto de la fuerza gravitatoria que ejerce la tierra sobre ella al tiempo que es frenada por una fuerza de rozamiento disipadora proporcional a menos su velocidad (debida a la viscocidad del aire), la gota del experimento recibe un trabajo.

Una forma de calcular el trabajo es usar la expresión:

$$W = \int_{t_i}^{t_f} \vec{F}.\vec{v}\,dt$$

donde F, la fuerza, está dada por:

$$\vec{F}(t) = -m\,g\hat{z}\ - c\,v(t)\hat{z}$$

A partir de la expresión de $z(t)$ obtenida por el ajuste de mínimos cuadrados del punto anterior, derive la expresión de $v(t)$ y calcule una aproximación $\hat{W}$ al trabajo usando la expresión anterior, integrando con el método de Simpson compuesto. Agregue la subrutina de Simpson al `mod-metodos.f90` y agregue lo necesario al programa principal para que lo muestre en pantalla. Al usar el método de Simpson compuesto divida el intervalo de tiempo en 100 subintervalos ($n = 100$). En el archivo `explicacion.pdf` discuta ambas aproximaciones numéricas al trabajo.

Agregue también un módulo más:

- el módulo de funciones `mod-func.f90`

e incluya allí las funciones posición y velocidad calculadas en base a los parámetros ajustados.

2H) Una forma alternativa de calcular el trabajo es utilizar la expresión:

$$W \quad = \quad \int_{z_i}^{z_f} F\, dz \tag{1}$$

donde

$$\vec{F}(z) = -m\, g\hat{z} \; - c\, v(z)\hat{z}$$

Recuerde que $m = 0.001kg$, en tanto el valor de c es el que obtuvo en el punto **2.E** a través del ajuste de α el cual es igual a m/c. Utilice también el valor de g obtenido por el ajuste.

Utilizando el programa `parcial2-p1.f90` que desarrolló en la Parte I de este problema, evalúe el trabajo W realizado sobre la gota entre la posición inicial y final utilizando el método de integración del trapecio para puntos no equiespaciados. Usted tiene las posiciones z (no equiespaciadas) y sus respectivas velocidades $v(z)$ en el archivo `salida.dat`. Adicione lo necesario al programa `parcial2-p1.dat` para que calcule W y lo imprima en pantalla.

2I) Para verificar si las integrales le dieron el resultado correcto, calcule también el trabajo como:
$W = E_{cinetica,fin}$
teniendo en cuenta que $E_{cinetica,ini} = 0$. Utilice para ello la velocidad final del ajuste. Imprima este valor también por pantalla.

2J) A partir del archivo `datos.dat`, interpole la posición como función del tiempo con el método del polinomio interpolante de Lagrange, utilizando los 17 puntos del archivo y dividiendo el intervalo de tiempo en 100 subintervalos ($npuntos = 100$) para evaluar el polinomio. Agregue la subrutina que realiza la interpolación de Lagrange al módulo `mod-metodos.f90`. Grafique, en un único gráfico, las siguientes curvas entre t_i y t_f:

- Los puntos medidos z_i vs t_i,
- el polinomio interpolante de Lagrange y
- la curva de la posición ajustada en el punto **(2E)**.

Llame `pol_lagrange.dat` al archivo de datos, `figura1j.pdf` al gráfico y `figura1j.gnu` al script.

2K) Explique en el archivo `explicaciones.pdf` los resultados obtenidos.