Pre-Pràctica 4: Zeros de funcions i derivada. 2018-2019

Objectius: derivades, Newton-Raphson, bisecció,external

— Nom del programa principal **P4-1819P.f**.
Precisió de reals: **double precision**.
Tots els outputs amb 12 xifres significatives, p.ex. format(e20.12)
Tots els resultats a: **P4-1819P.res.dat**, afegeix una línia descriptiva separant els diferents resultats. Deixa dues linies en blanc per separar els blocs i utilitza "index" a gnuplot.

La pràctica consistirà en estudiar aspectes de la transició líquid-gas amb l'equació de Van der Waals. El dia de la pràctica haureu de fer servir parts del codi que desenvolupeu a continuació.

1) Escriu dues subrutines, **NewtonRap(x0,eps,fun,niter,xarrel)** i **Bisection(A,B,eps,fun,niter,xarrel)** que trobin una arrel de la funció $f(x)$ que retorna la subroutina **fun(x,fu,dfu)**.

   Els inputs de les subroutines són:

   - **x0**, punt inicial de Newton Raphson.
   - **A**, **B** punts inicials de bisecció.
   - **eps**, precisió desitjada.
   - **fun(x,fu,dfu)**, subroutina que retorna el valor de $f(x)$ i $f'(x)$, respectivament. Definida com a external.

   Els outputs,

   - **niter**, nombre d'iteracions per aconseguir la precisió.
   - **xarrel**, valor de l'arrel

2) Per a testejar les subrutines Bisection i NewtonRap:

   a) Considera el polinomi de grau 3 amb $v \in [-1, 3]$.

   $$\mathrm{Po}(v) = \frac{35}{16} + \frac{1}{2}v - \frac{61}{20}v^2 + v^3 \tag{0.6}$$

   Representa gràficament la funció $P(v) = \sinh(v)\mathrm{Po}(v)$ i la seva derivada a l'interval considerat, **P4-1819P-fig1.png**.

   b) Mitjançant la subrutina de bisecció troba les tres arrels d'$P(v)$ (amb $v \in [-1, 3]$), fent servir la informació visual de la representació gràfica, amb una precisió de **1.d-12**.

   c) A continuació estudia la convergència del mètode de Newton-Raphson per trobar les arrels reals començant des de 10 punts diferents, $v_0 = -0.5, 0.1, 0.2, 0.67, 0.7, 1., 1.5, 1.6, 2.0$ i 2.4 amb una precisió **1d-12**. Escriu en un fitxer **P4-1819P-res.dat** el valor v_0 i el nombre d'iteracions necessàries per assolir la precisió. Fes una gràfica que il.lustri la convergència del mètode pels valors $v_0 = 0.2, 0.7, 1.5$, p.ex. mostra con varia el valor aproximat de l'arrel per a cada iteració del mètode, **P4-1819P-fig2.png**.

3) Considera la següent fórmula per a calcular la derivada primera d'una funció dins de l'interval $[a, b]$,

$$\begin{aligned} \text{si } x \in (a,b) \qquad & f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\ \text{si } x = a \qquad & f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\ \text{si } x = b \qquad & f'(b) = \frac{f(b) - f(b-h)}{h} \, . \end{aligned} \tag{0.7}$$

Construeix una subrutina **derfun(ndat,x,fu,dfu)** que rebi dos vectors, un amb els valors de la variable equiespaiats ($x_{k+1} - x_k = h$), x_k, **x(ndat)**, i l'altre amb els valors corresponents de la funció $f(x_k)$, **fu(ndat)**, i retorni un vector amb la derivada calculada numèricament $f'(x_k)$, **dfu(ndat)**.

4) Per a testejar la subrutina **derfun**.

Genera dues taules amb 34 i 420 punts de la funció $P(v)$ amb $v \in [-1, 3]$, calcula numèricament la seva derivada amb la subrutina de l'apartat anterior, escriu en dos fitxers: **P4-1819P-res3-n34.dat** i **P4-1819P-res3-n420.dat**: v, $P(v)$, $P'_{\text{approx}}(v)$, $P'(v)$. Fes una gràfica **P4-1819P-fig3.png** comparant les derivades aproximades amb 34 i 420 punts amb el resultat exacte.

Entregable: P4-1819P.f, P4-1819P-res.dat, P4-1819P-res3-n34.dat, P4-1819P-res3-n420.dat, P4-1819P-fig1.png, P4-1819P-fig2.png, P4-1819P-fig3.png+scripts gnuplot