Pre-Pràctica 4: Zeros de funcions i derivada

Objectius: derivades, Newton-Raphson, bisecció,external

— Nom del programa principal **P4-2016.f**.
Precisió de reals: **double precision**.
Tots els outputs amb 12 xifres significatives, p.ex. format(e20.12)

La pràctica consistirà a 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, **newtonraphson(x0,eps,fun,dfun,niter,ierr,xarrel)** i **biseccio(A,B,eps,fun,niter,ierr,xarrel)** que trobin una arrel de la funció **fun(x)**.

   Els inputs són:

   - **x0**, punt inicial de Newton Raphson.
   - **A**, **B** punts inicials de bisecció.
   - **eps**, precisió desitjada.
   - **fun(x)** i **dfun(x)**, funció considerada i la seva derivada, respectivament.

   Els outputs,

   - **ierr**, la subrutina ha convergit bé (**ierr**=0), o no ha convergit o hi ha algun problema **ierr**=1.
   - **niter**, nombre d'iteracions per aconseguir la precisió.
   - **xarrel**, valor de l'arrel

2) Per a testejar les subrutines bisecció i newtonraphson:

   a) Considera el polinomi de grau 3 amb $v \in [0,4]$.

   $$\mathrm{Po}(v) = -\frac{21793}{1000} + \frac{2439}{100}v - \frac{87}{10}v^2 + v^3 \tag{0.15}$$

   Representa gràficament la funció $P(v) = \cosh(v)\mathrm{Po}(v)$ i la seva derivada a l'interval considerat, **P4-2016-fig1.png**.

   b) Mitjançant la subrutina de bisecció troba les tres arrels d'$P(v)$ (amb $v \in [0,4]$), 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 dels 10 punts diferents, $v_0 = 0.1, 1.0, 1.5, 2.5, 2.51, 2.52, 2.54, 2.55, 2.7$ i 3.0 amb una precisió **1d-12**. Escriu en un fitxer **P4-2016-res2.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 $v_0 = 2.54, 2.55, 2.7$, p.ex. mostra con varia el valor aproximat de l'arrel per a cada iteració del mètode, **P4-2016-fig2.png**.

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

$$\begin{aligned} \text{si } x \in (a,b) \qquad & f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\ \text{si } x = a \qquad & f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\ \text{si } x = b \qquad & f'(b) = \frac{f(b) - f(b-h)}{h} \,. \end{aligned} \tag{0.16}$$

Construeix una subrutina **derifun(ndat,fu,x,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 $\mathbf{fu}(x_k)$, **fu(ndat)**, i retorni un vector amb la derivada calculada numèricament $f'(x_k)$, **dfu(ndat)**.

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

Genera dues taules amb 10 i 200 punts de la funció $P(v)$ amb $v \in [0, 4]$, calcula numèricament la seva derivada amb la subrutina de l'apartat anterior, escriu en dos fitxers: **P4-2016-res3-n10.dat** i **P4-2016-res3-n200.dat**: v, $P(v)$, $P'_{\text{approx}}(v)$, $P'(v)$. Fes una gràfica **P4-2016-fig3.png** comparant les derivades aproximades amb 20 i 200 punts amb el resultat exacte.

Entregable: P4-2007.f, P4-2016-res1.dat, P4-2016-res2.dat, P4-2016-res3-n10.dat, P4-2016-res3-n200.dat, P4-2016-fig1.png, P4-2016-fig2.png, P4-2016-fig3.png