

■前回までの注意

まずは、頭をデジタル化（手続きにアナログ的な不明確さを残さない）して、『流れ図』書いてみる。『流れ図』が自分で書けなければプログラムも完成しない。

■前回の解答例

```

C23456*****
C
C   NEWTON 法   演習の解答例
C
C   初期値は外部から入力する。
C   しきい値はプログラム内に記述
C   関数 f(x) は 2.0*x**3.0+9.0*x**2.0
C                   +40.0*x-80.0
C*****

REAL X, NEWX, F, DF

WRITE(*,*) 'Input Initial Value x0 = '
READ(*,*) X

10  CONTINUE

F=2.0*X**3.0+9.0*X**2.0
& +40.0*X-80.0

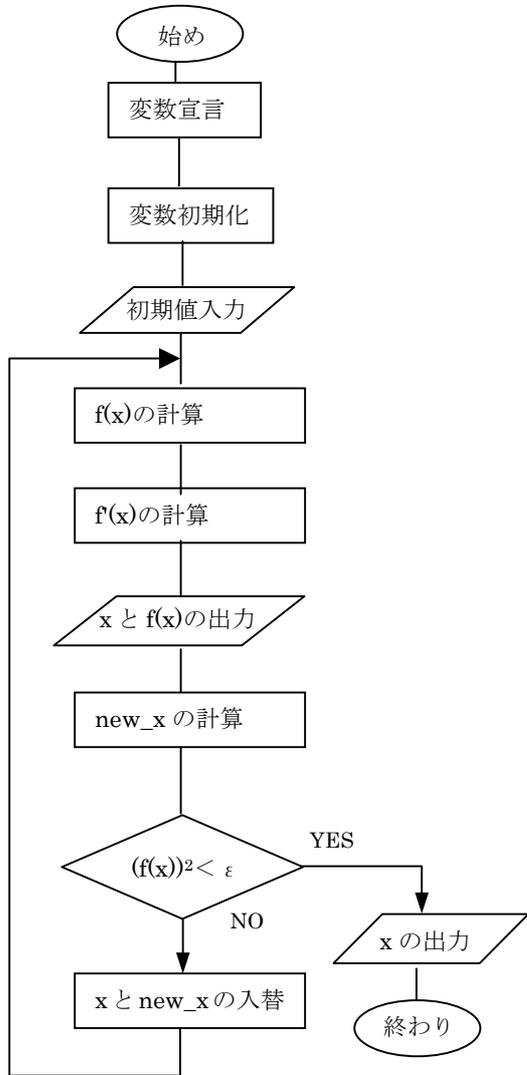
DF=6.0*X**2.0+18.0*X+40.0

NEWX=X- (F/DF)

IF (F**2.0 .GT. 0.0001) then
  WRITE(*,*) 'x=',X, ' ', ' ', 'f(x)=' ,F
  X=NEWX
  GOTO 10
ELSE
  WRITE (*,*) 'f(x)=0'
  WRITE (*,*) X
  WRITE (*,*) F
END IF

STOP
END
    
```

6カラム目に&等の記号が付くと行が続いていることをあらわす。



NEWTON 法

(1) f は x の関数。 $f=0$ を与える x を求める。

(2) 初期値 x_0 を与える。

(3) $f(x_0)$ と x_0 での微係数 $f'(x_0)$ を計算する。

$$f'(x_0) = f(x_0) / (x_0 - x_1)$$

$$x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$$

(4) 同様な計算を行うと

$$x_{m+1} = x_m - f(x_m) / f'(x_m)$$

(5) $f(x_m)$ が 0 に近くなれば計算終了。

$$(f(x_m))^2 < \varepsilon'$$

ε' : しきい値

課題

ベンゼン (A) - トルエン (B) 系の圧力 $P=101.3\text{kPa}$ で
液相組成 $x_A=0.4$ モル分率のときの平衡温度 T と気相組成を Newton 法で求めよ。
初期値やしきい値は任意に与えよ。

ただし、活量係数は 1 (理想系を仮定) する。

$$\ln P_A^0 = 15.33 - 3785/T$$

$$\ln P_B^0 = 15.68 - 4247/T$$

ヒント

$$(全圧 P) = (A 成分の分圧 p_A) + (B 成分の分圧 p_B)$$

Raoult の法則

$$p_A = \gamma_A \cdot P_A^0 \cdot x_A$$

$$p_B = \gamma_B \cdot P_B^0 \cdot x_B = \gamma_B \cdot P_B^0 \cdot (1 - x_A)$$