

■■■■ 化学プロセス数学 (実践編その1) 2006年度版 ■■■■

K科 H.Takiyama

MACでC言語を動かす。→ cleos のプログラムはそのまま使えます。

「Xcode」を起動してプログラムを書く。

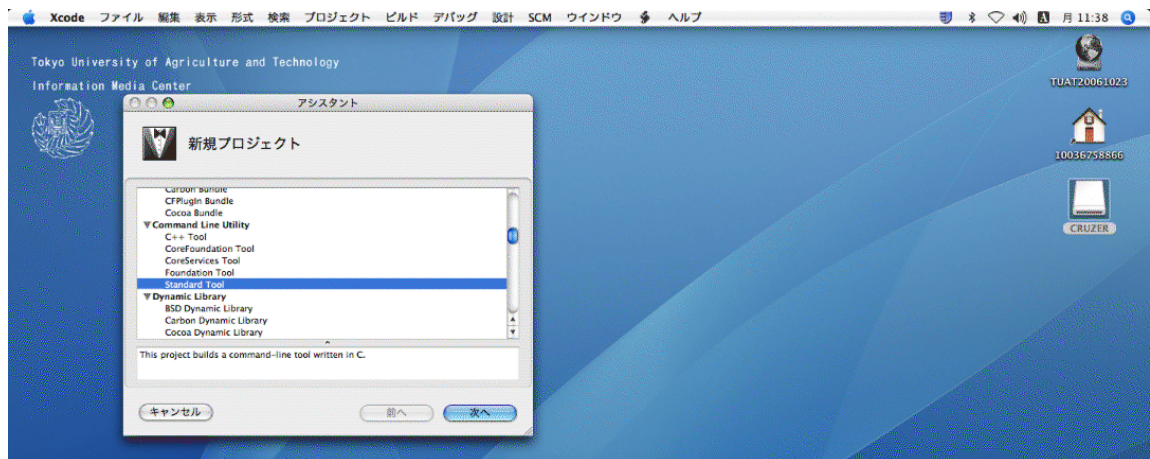
Step1 Xcode 起動

「MacintoshHD」→「Developer」→「Applications」→「Xcode」

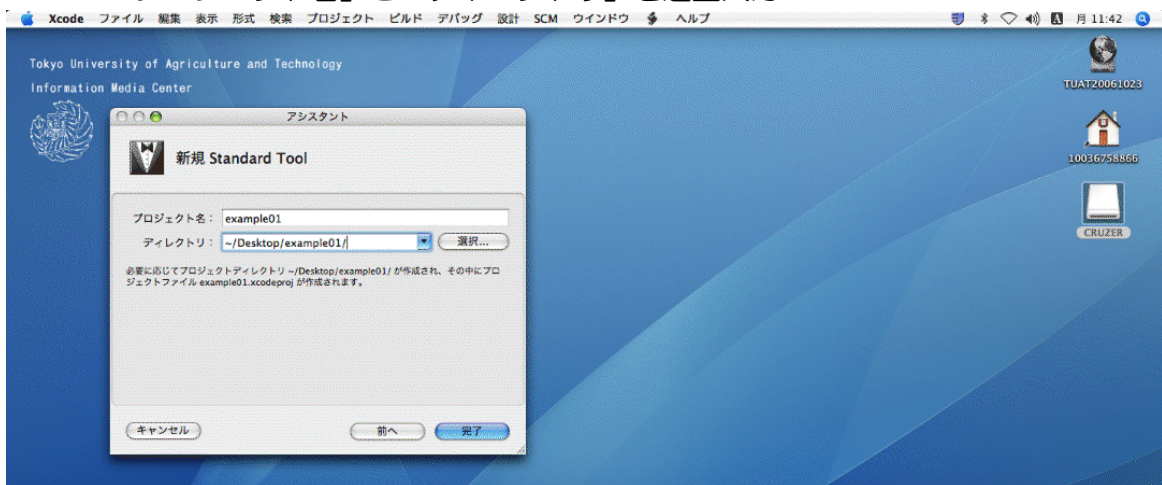
Step2 プロジェクト起動準備

「ファイル」→「新規プロジェクト」

「command Line Utility」から「Standard Tools」選択

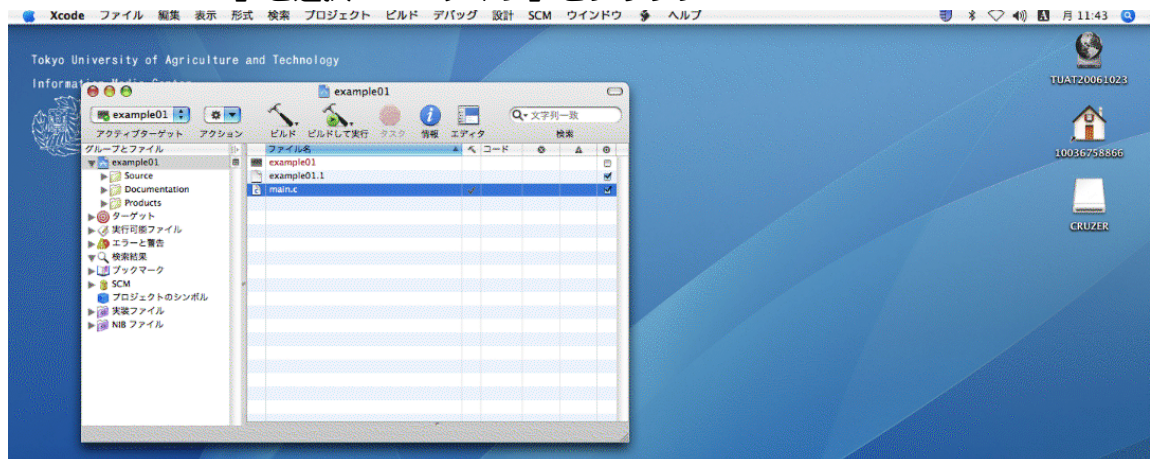


「プロジェクト名」と「ディレクトリ」を適宜入力

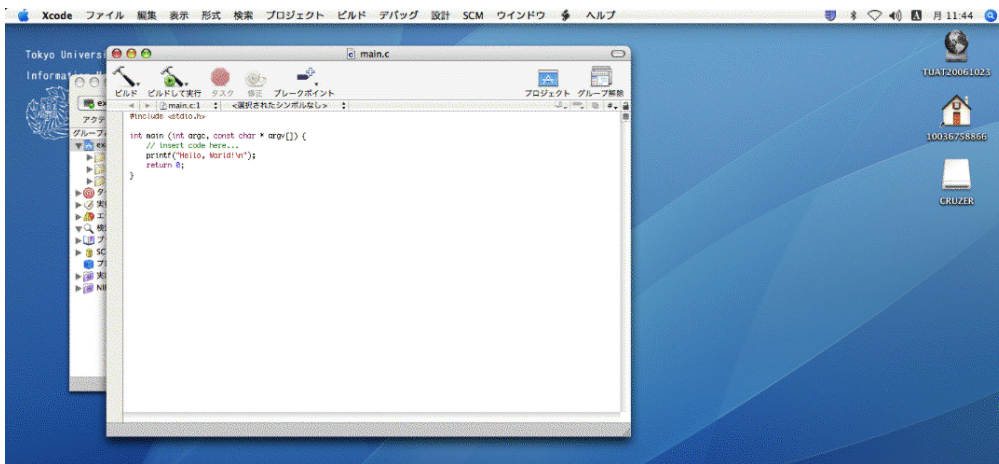


Step3 プロジェクト起動

「main.c」を選択→「エディタ」をクリック



Step4 プログラミング



あらかじめ次の文は挿入されている。

```
#include <stdio.h>  
  
int main (int argc, const char * argv){  
  
    return 0;  
}
```

今日のテーマ：C言語を思い出しましょう。1年生コンピュータ基礎+3年生実験Ⅲ

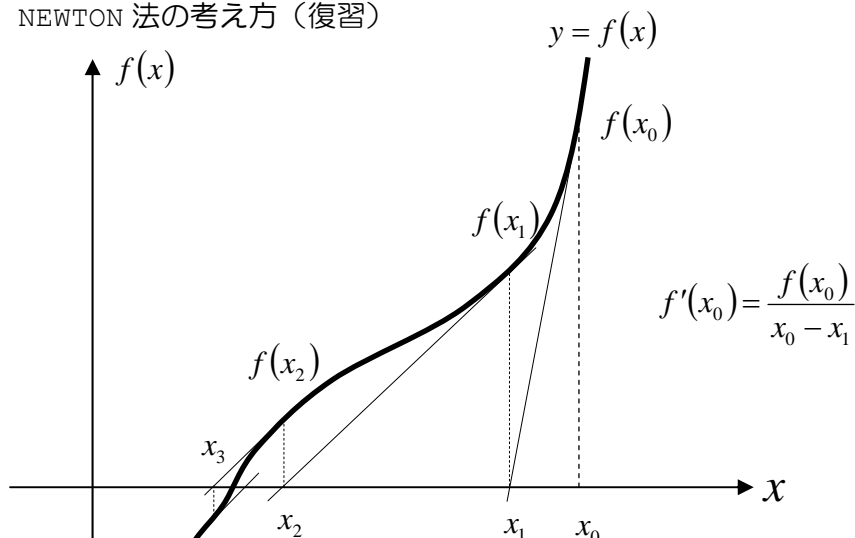
NEWTON法を用いて、 $f(x)=0$ の解を求めよ。

初期値 x_0 からどのように解が求まるのか、 $f(x_m)$ と x_m の途中経過も表示せよ。

ただし、しきい値 ε' は 0.0001 とする。

$$2.0 \cdot x^3 + 9.0 \cdot x^2 + 40.0 \cdot x - 80.0 = f(x)$$

NEWTON法の考え方（復習）



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

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

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

```
/*から*/まではコメント文、プログラムの実行には無関係。
```

```
2005.12.12 NEWTON Method
```

```
f(x)=2.0*x**3.0+9.0*x**2.0+40.0*x-80.0
```

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
```

```
int main(int argc, const char * argv[]){
```

```
double x, newx, f, df;
printf("Please Input Initial Value x0 =");
scanf("%lf", &x);
```

```
LABEL:
```

```
f=2.0*pow(x, 3.0)+9.0*pow(x, 2.0)+40.0*x-80.0;
df=6.0*pow(x, 2.0)+18.0*x+40.0;
```

```
printf(" x=%f f(x)= %f ¥n", x, f);
```

```
newx=x-(f/df);
```

```
if (pow(f,2.0) > 0.00001)
```

```
{
x=newx;
goto LABEL;
}
```

```
printf("** Final Answer **¥n");
printf(" x=%f¥n", x);
printf(" f(x)=%f¥n", f);
```

```
return(0);
```

```
}
```

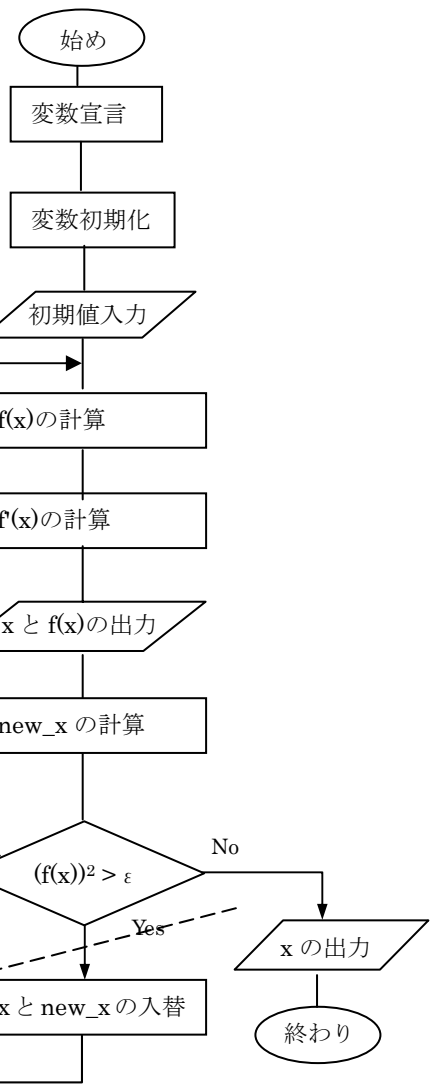
プログラムの基本は半角英数字
日本語は使用しない

C言語のおまじない

使用する変数の型
double は小数

初期値 x の入力

初期値 x を与えると
newx が算出できる。
 $newx = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$



実行開始

```
Please Input Initial Value x0 =20
x=20.000000 f(x)= 20320.000000
x=12.742857 f(x)= 6029.518647
x=7.894628 f(x)= 1780.779395
x=4.692100 f(x)= 512.426927
x=2.694744 f(x)= 132.281115
x=1.693185 f(x)= 23.237614
x=1.428154 f(x)= 1.308539
x=1.411366 f(x)= 0.004942
x=1.411302 f(x)= 0.000000
** Final Answer **
x=1.411302
f(x)=0.000000
```

f(x) の値が確実に減っている。
そして f(x)=0 を与える x が求まっている。

