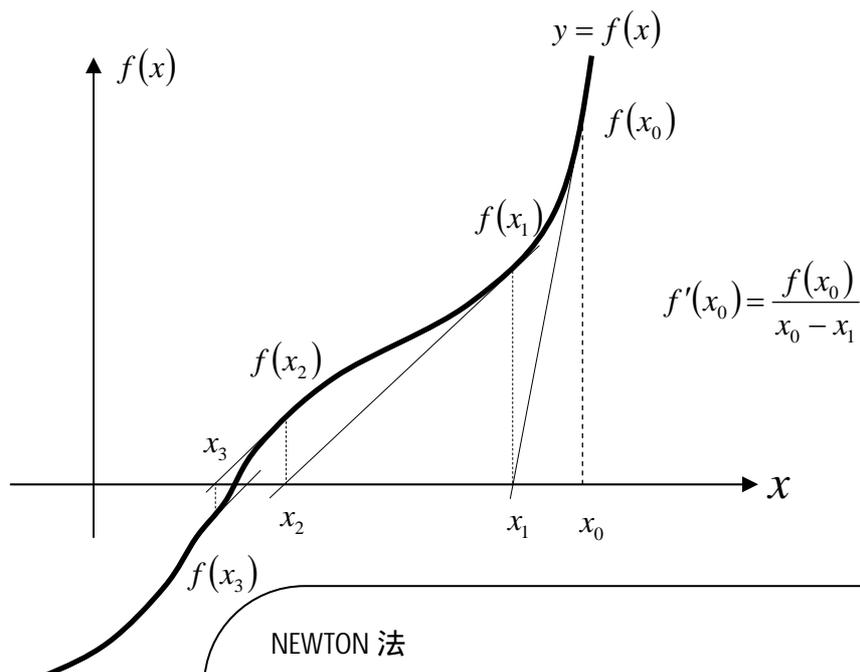


今日のテーマ : Fortran を思い出しましょう。

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。

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1}$$

$$x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0)$$
- (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。

$$(f(x_m))^2 < \epsilon$$

ϵ : しきい値

解答例

Fortran は
7カラム目から有効
1~6カラム目は別の意味あり

Cはコメント文
プログラムの実行には無関係。

```
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*****
```

基本は半角英数字
日本語は使用しない

使用する変数の型
を宣言する。REAL は実数
I, J, K, L, M, N のときは
自動的に整数型

```
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
```

出力文
文字を表示する時には' '
quotation mark で囲う。

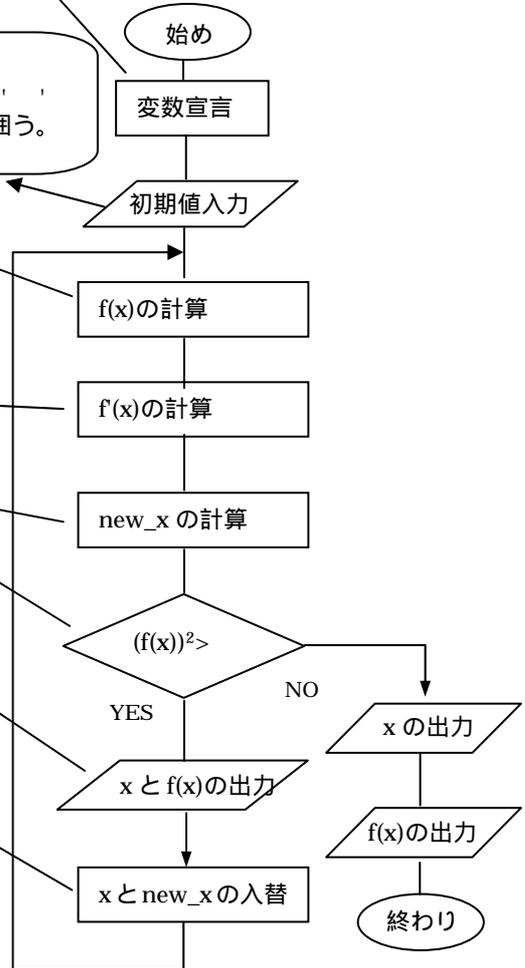
6カラム目に&等の記号が付くと行が続いて
いることをあらわす。

```
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
```

必須



気液平衡計算を通して Newton 法と気液平衡の基礎をバッチリ習得する。

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

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

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

平衡状態であれば、

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

p_A も p_B も組成が判っていれば温度のみの関数

よって

$$f(T) = P - p_A - p_B$$

なる式を考えれば、 $f(T)$ は温度 T のみの関数となり、 $f(T)=0$ となる T が判れば、それが平衡温度。

これは NEWTON 法による解法がそのまま利用できる。

すなわち、平衡温度の初期値を入力し、 $f(T)=0$ となる T を求める。

気相組成は

$$y_A = p_A/P$$

解答例

```
C23456*****
C
C   NEWTON 法の応用
C
C*****
```

```
REAL T, NEWT, F, DF, YA
```

使用する変数を宣言する
実数の場合は「REAL」

```
WRITE(*,*) 'Input Initial Value T0 = '
READ(*,*) T
```

10 CONTINUE

```
C   F=(全圧)-(Aの分圧)-(Bの分圧)で
C   Fが0になる温度Tを求める -> Newton法が使える。
```

```
F=101.3-exp(15.33-3785.0/T)*0.4-exp(15.68-4247.0/T)*0.6
```

```
C   6カラム目に&等の記号が付くと行が続いている
C   ことをあらわす。
```

```
DF=-0.4*exp(15.33-3785.0/T)*(3758.0/T**2.0)
&   -0.6*exp(15.68-4247.0/T)*(4247.0/T**2.0)
```

```
NEWT=T-(F/DF)
```

```
IF (F**2.0 .GT. 0.0001) then
  WRITE(*,*) 't=',T, ' ', 'f(t)=',F
  T=NEWT
  GOTO 10
ELSE
  YA=(exp(15.33-3785.0/T)*0.4)/101.3
  WRITE (*,*) 'f(t)=0'
  WRITE (*,*) T
  WRITE (*,*) 'yA= ',YA
END IF
```

```
STOP
END
```

条件式

意味	数学記号	FORTRAN
等しい	=	.EQ.
等しくない		.NE.
より大きい	>	.GT.
より小さい	<	.LT.
以上		.GE.
以下		.LE.

演習問題

次の代数方程式を Newton 法で求めよ。

$$\exp(x) + x - 2 = 0$$

プログラミングは日々の積み重ねが大切。今日わからないことは明日に延ばさない。