

演習1：相平衡・状態図計算のPAD図

変数：

```
(i) i,j,n,nx;
(d) t0,det,
    x,dx,x0,
    y0,y1,y2,dy,
    z0,z1,z2,dz,
    dgy,dgz,dhy,dhz;
(FILE) *ft0,*f1,*fs,
    *pipe;
```

```
ft0 = fopen( ... );
f1 = fopen( ... );
fs = fopen( ... );
```

```
n = 100;
dx = 0.01;
nx = (int) (1./dx);
```

```
j = 0 ~ nx
```

```
fclose(ft0);
fclose(f1);
fclose(fs);
```

```
pipe = popen(...);
"gnuplotで作図"
pclose(pipe);
```

```
exit(0);
```

・主な変数

n：繰返しの上限回数
x：合金のB濃度
dx：組成の刻み幅
t0：T0温度
y0：液相の初期B濃度
z0：固相の初期B濃度
y2：液相のB濃度
z2：固相のB濃度

・ファイルポインタ変数

ft0：T0線
f1：液相線
fs：固相線
pipe：gnuplotで利用

```
x = dx*(double)j;
```

```
x ≤ 0.
```

```
x = dx/10.;
```

```
x ≥ 1.
```

```
x = 1.-dx/10.;
```

```
t0 = ((WL-WS)*(1.-x)*x+1250.*R*(1.-x)+750.*R*x)/R
```

計算結果の出力（画面）

```
"組成：x = ",x
"T0温度：T = ",t0
```

計算結果の出力（ft0：ファイル）

```
x t0
```

繰返し

```
x < 0.5
```

```
x0 = x/5.;
```

```
x0 = (1.-x)/5.;
```

初期値の設定

```
(gl(x+EPS,t0)
-gs(x+EPS,t0))
< 0.
```

```
y0 = x+x0;
```

```
z0 = x-x0;
```

```
y0 = x-x0;
```

```
z0 = x+x0;
```

```
y2 = y0;
z2 = z0;
```

```
i = 0; //計算回数
```

```
(i<n) && ((fabs(dy)>EPS)
|| (fabs(dz)>EPS))
である間繰り返せ
```

繰返し

計算結果の出力（画面）

```
"計算回数：N = ",i
"温度：T = ",t0
"平衡組成 = ",y2,z2
```

計算結果の出力（f1：ファイル）

```
y2 t0
```

計算結果の出力（fs：ファイル）

```
z2 t0
```

```
R = 8.31447
```

```
WL = (4.*R*(###-90.))
```

```
WS = (2.*R*(45.-###))
```

```
EPS = 1.E-6
```

```
GNUPlot = "/usr/bin/gnuplot"
```

は学績番号の下3桁

※ 関数①～⑥と式①～③は
講義資料を参照して下さい。

※ 関数①～⑥はISTUより
ダウンロードできます。

```
i = i+1;
```

```
y1 = y2;
```

```
z1 = z2;
```

```
dgy = dgdy(y1,z1,t0); 関数③
```

```
dgz = dgdz(y1,z1,t0); 関数④
```

```
dhy = dhdy(y1,z1,t0); 関数⑤
```

```
dhz = dhdz(y1,z1,t0); 関数⑥
```

```
det = 式①;
```

```
dy = 式②; (関数①&関数②)
```

```
dz = 式③; (関数①&関数②)
```

```
y2 = y1+dy;
z2 = z1+dz;
```

```
y2 ≤ 0.
```

```
y2 = EPS;
```

```
y2 ≥ 1.
```

```
y2 = 1.-EPS;
```

```
z2 ≤ 0.
```

```
z2 = EPS;
```

```
z2 ≥ 1.
```

```
z2 = 1.-EPS;
```