

2021年度コンピュータ演習

第8回：11月26日

1. 授業計画
2. 材料組織学：自由エネルギーと相平衡
3. **復習**：方程式の解 ② ニュートン法
4. **小演習 6－1**： T_0 線の計算と作図 ①
5. **小演習 6－2**： T_0 線の計算と作図 ②
6. 課題の提出（**12/3 15:00 締切り**）

コンピュータ演習・本日の課題

1. 材料組織学：全率固溶型状態図

◆ 先週の「 T_0 点」から「 T_0 線」に.

① 温度 T を変えて T_0 組成を計算する.

② 組成 x を変えて T_0 温度を計算する.

2. 復習： T_0 点の計算（ニュートン法）

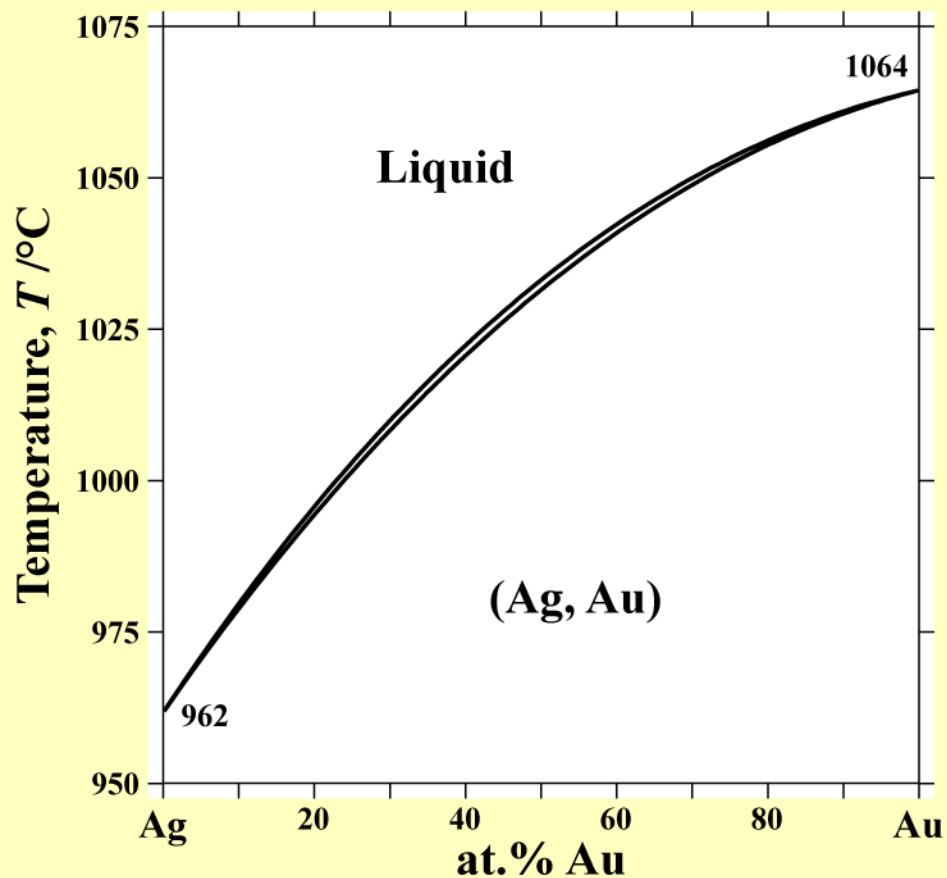
3. 小演習 6： T_0 線の計算と作図 ①&②

① PAD図 ⇒ プログラム作成

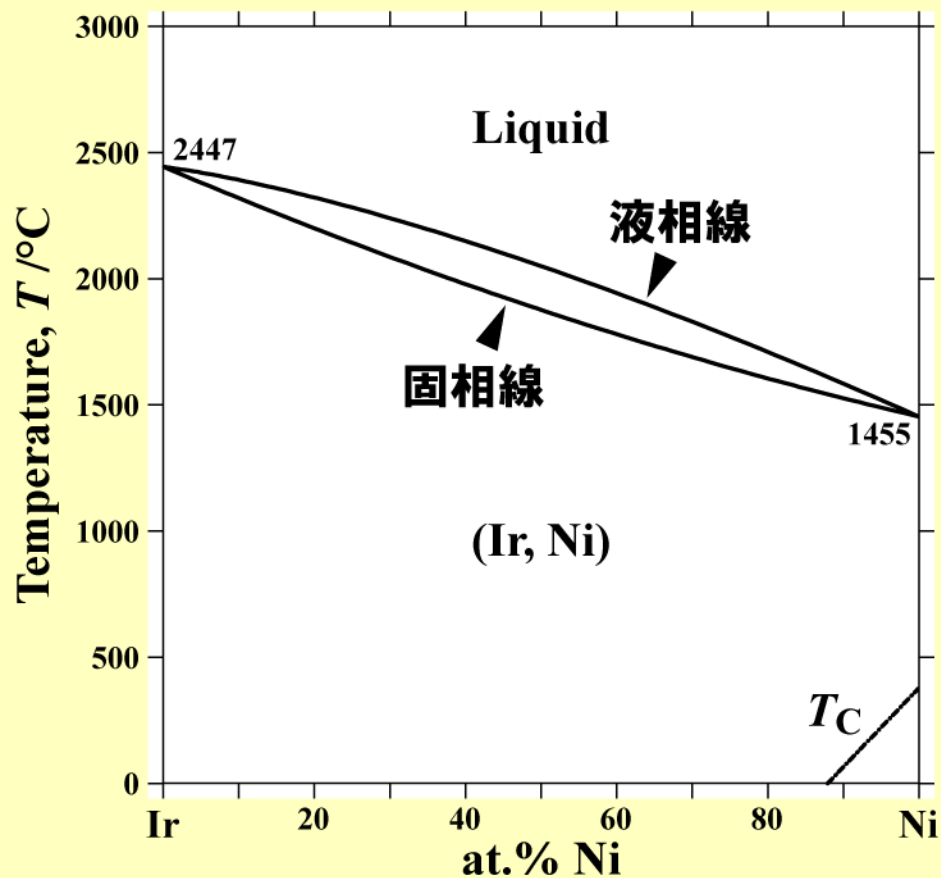
② 実は①より簡単. （PAD図無し）

1. 材料組織学：全率固溶型状態図

(a) 金-銀系状態図

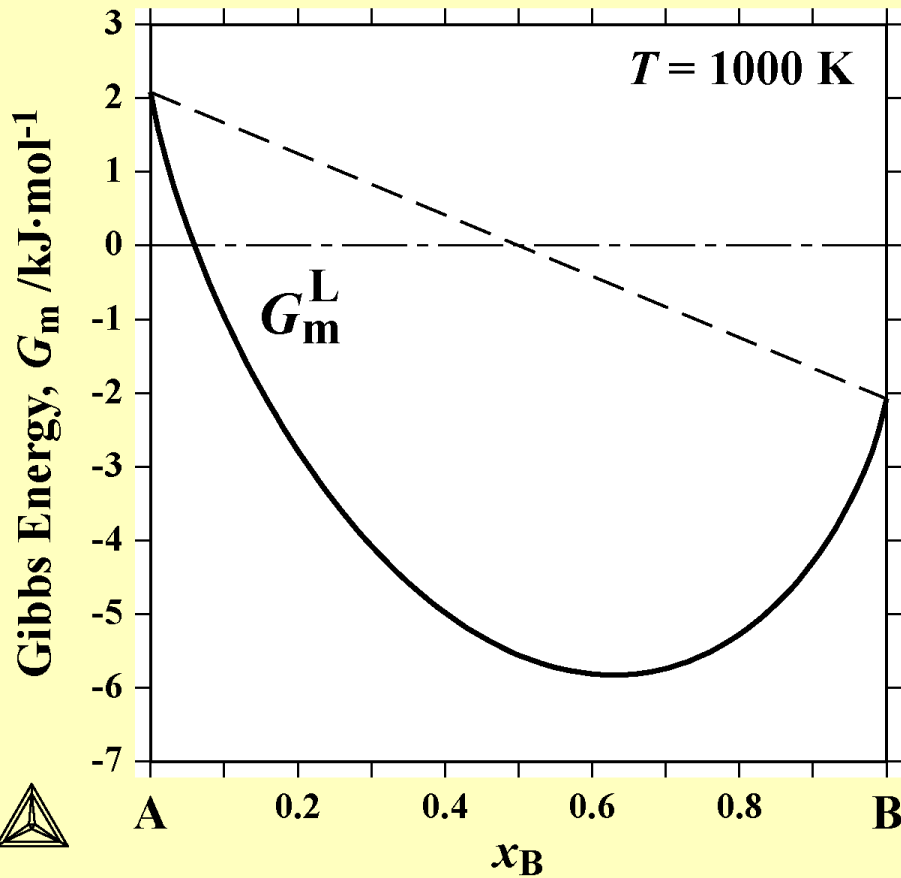


(b) ニッケル-イリジウム系状態図



1. 材料組織学：合金の自由エネルギー

(a) 液相の自由エネルギー組成図



(b) 液相の自由エネルギー関数

$$G_m^L(x, T) = G_A^L \cdot x_A^L + G_B^L \cdot x_B^L \\ + RT (x_A^L \ln x_A^L + x_B^L \ln x_B^L) \\ + \Omega_{AB}^L \cdot x_A^L \cdot x_B^L$$

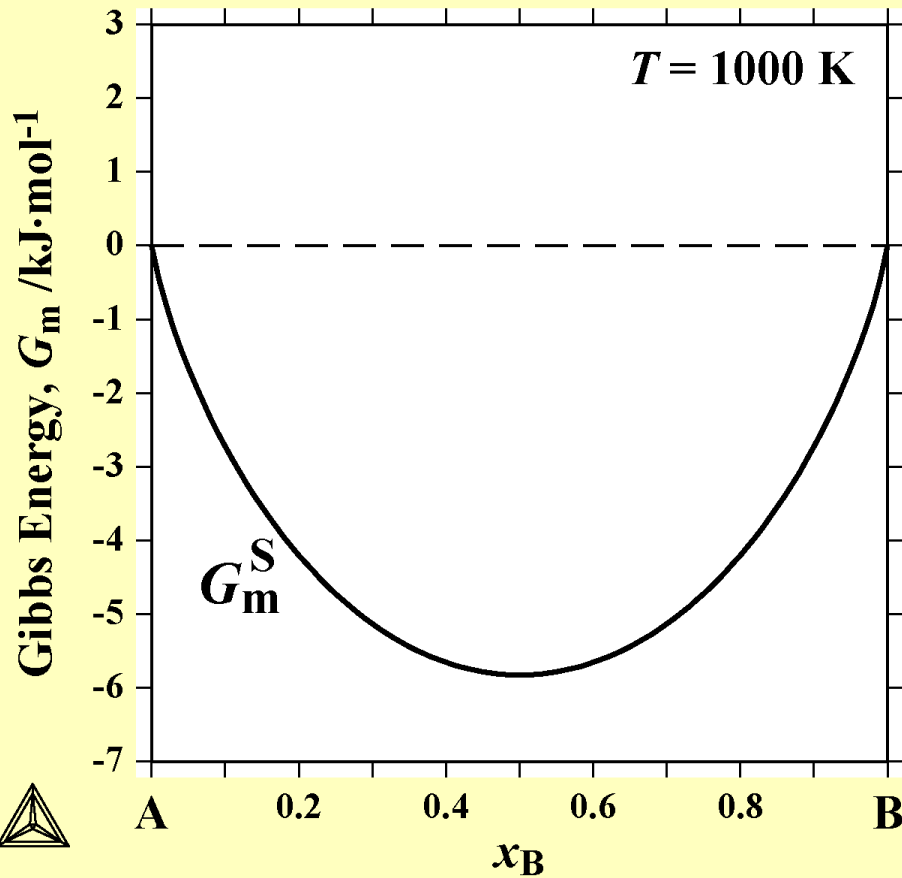
$$x_B^L = x \quad \text{とすると,}$$

$$x_A^L + x_B^L = 1 \quad \text{なので}$$

$$x_A^L = 1 - x_B^L = 1 - x \quad \text{となる.}$$

1. 材料組織学：合金の自由エネルギー

(a) 固相の自由エネルギー組成図



(b) 固相の自由エネルギー関数

$$G_m^S(x, T) = G_A^S \cdot x_A^S + G_B^S \cdot x_B^S \\ + RT (x_A^S \ln x_A^S + x_B^S \ln x_B^S) \\ + \Omega_{AB}^S \cdot x_A^S \cdot x_B^S$$

$$x_B^S = x \quad \text{とすると,}$$

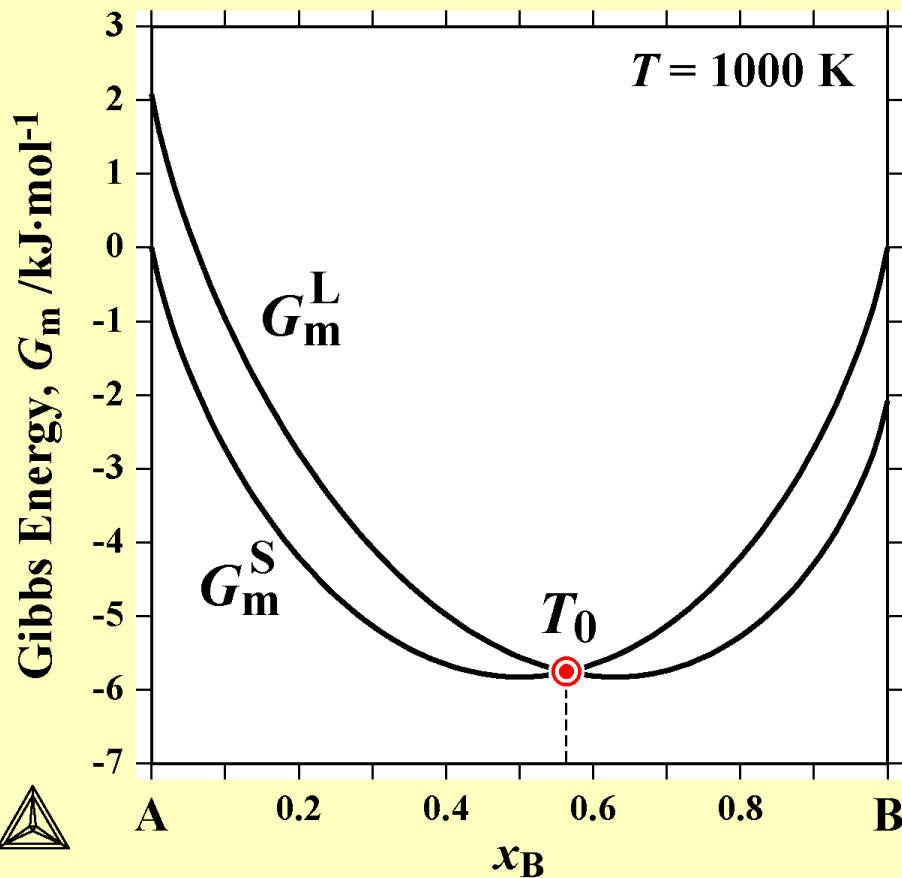
$$x_A^S + x_B^S = 1 \quad \text{なので}$$

$$x_A^S = 1 - x_B^S = 1 - x \quad \text{となる.}$$

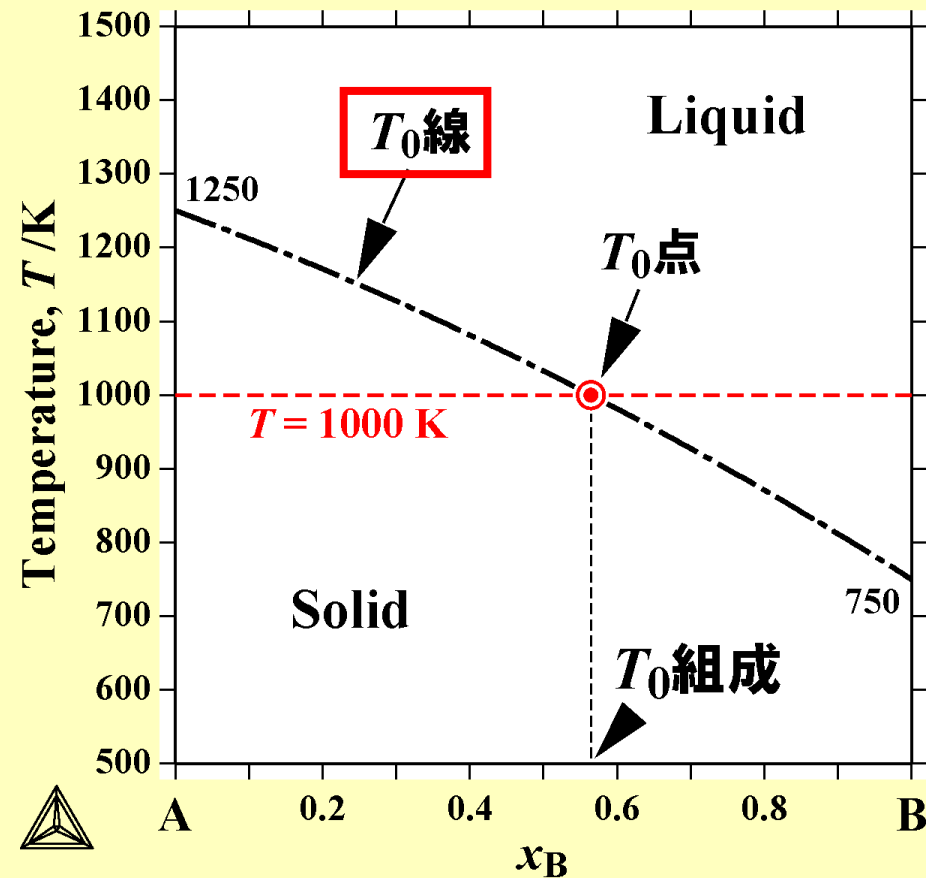
1. T_0 点：2相の自由エネルギーが等しい点

T_0 線： T_0 点の軌跡（温度 or 組成が変数）

(a) 自由エネルギー組成図



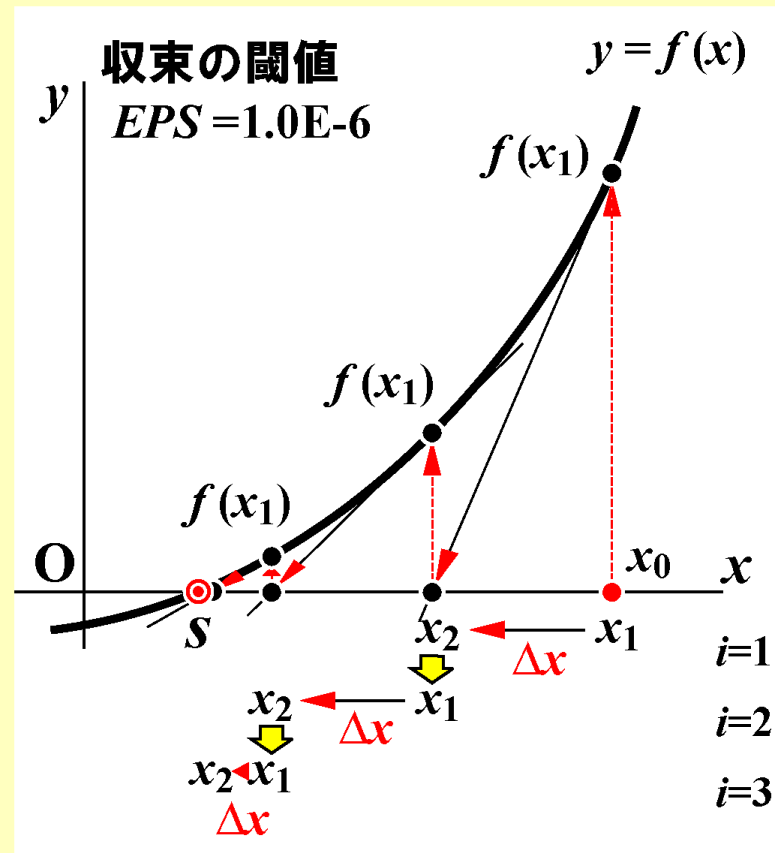
(b) 液相/固相の状態図



2. 復習：方程式の解法② ニュートン法

- 方程式 $f(x) = 0$ を満たす解 x を求める数値的な解法のひとつ。
- $f(x) = 0$ について、(1) $f(x)$ が単調な関数であり、(2) ある区間内に解があることが分かっている場合において、その解を以下のように見出す。

1. 初期値 x_0 を入力する。
 2. x_1 に x_0 を代入。
 3. $(x_1, f(x_1))$ における $y = f(x)$ の接線を引く。
 4. 接線と x 軸との交点を x_2 とする。
 5. x_2 と x_1 の差 $\text{fabs}(x_2 - x_1)$ が閾値 EPS より小さくなった時点で、収束とみなす。
 6. 収束していない場合、 x_1 に x_2 を代入。
 7. 上記 3～6 を繰返して解 S に収束させる。
- ※ $f(x)$ によっては収束しない場合もある。



図：ニュートン法の概要

2. 小演習 5（復習）： T_0 点の計算

変数

(i) i, n

(d) $x_0, x_1, x_2, dx, fx, dfx, t$

(i)はint, (d)はdoubleを表す.

n 入力

x_0 入力

t 入力

$0. < x_0 < 1.$

$750. < t < 1250.$

$x_2 \leftarrow x_0$

$i \leftarrow 0$

$(i < n) \ \&\& \ (|dx| > EPS)$
である間繰り返せ

繰返し

計算結果の出力

"初期値 : $x_0 =$ ", x_0

"計算回数 : $N =$ ", i

"解 : $x(B) =$ ", x_2

$i \leftarrow i + 1$

$x_1 \leftarrow x_2$

$fx \leftarrow f(x_1, t)$

$dfx \leftarrow df(x_1)$

$dx \leftarrow -fx/dfx$

$x_2 \leftarrow x_1 + dx$

$x_2 \leq 0.$

$x_2 \geq 1.$

$x_2 \leftarrow EPS$

$x_2 \leftarrow 1. - EPS$

$0 < x < 1$ とする
ための処理

R

8.31447

WL

$3.*R*(### - 90.)$

WS

$3.*R*(45. - ###)$

EPS

1.0E-6

$f(x, t)$

関数①

$df(x)$

関数②

- ### は学籍番号の下3桁
- 関数①と関数②はスライドを参照

3. 小演習 6 – 1 : T_0 線の計算と作図①

◆ スライド 10 ~ 12 の自由エネルギー関数を用いて,
750 < T < 1250 (K) の温度範囲 (10Kステップ) で各
温度の T_0 組成 x_B を求め, (x_B , T) のデータをファイル
出力して, 「 T_0 組成 x_B 」 vs 「温度 T 」の T_0 線を gnuplot
を用いて作図するプログラムを作成せよ.

※ 温度の下限を 750.1K, 上限を 1249.9K とせよ.

※ コンパイル時に -lm を使用すること.

提出ファイル:

- (1) プログラム (ファイル名: 学籍番号-6-1.c)
- (2) データファイル (ファイル名: 学籍番号-6-1.txt)
- (3) グラフ (ファイル名: 学籍番号-6-1.png)

3. 小演習 6 – 1 : T_0 線の計算と作図①

• ϕ 相の自由エネルギー（式①）

$$G_m^\phi = x_A \circ G_A^\phi + x_B \circ G_B^\phi + x_A x_B \Omega_{A,B}^\phi \quad (\text{エンタルピー項})$$

$$+ RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) \quad (\text{エントロピー項})$$

ϕ	$\circ G_A^\phi$		$\circ G_B^\phi$		Ω_{AB}^ϕ	
	変数名	値	変数名	値	変数名	値
L	<i>gla</i>	$+1250R$ $-RT$	<i>glb</i>	$+750R$ $-RT$	<i>WL</i>	※1
S	<i>gsa</i>	0	<i>gsb</i>	0	<i>WS</i>	※2

◆ R は気体定数（8.31447 J/mol）， T は絶対温度[K]

※1 $WL = 4 * R * \{ (\text{学籍番号の末尾 3 桁}) - 90. \}$

※2 $WS = 2 * R * \{ 45. - (\text{学籍番号の末尾 3 桁}) \}$

3. T_0 線の計算：自由エネルギー関数

$$\begin{aligned} G_m^L = & (1250R - RT) \times x_A + (750R - RT) \times x_B \\ & + WL \times x_A x_B \\ & + RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_m^S = & WS \times x_A x_B \\ & + RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B) \end{aligned}$$

$$x_B = x \quad (0 < x < 1)$$

$$x_A = 1 - x_B = 1 - x$$

$$f(x, T) = G_m^L - G_m^S, \quad df(x, T) = \frac{d}{dx} (G_m^L - G_m^S)$$

3. T_0 線の計算：自由エネルギー関数

$$\begin{aligned} f(x, T) &= G_m^L - G_m^S \\ &= (1250R - RT) \times (1 - x) + (750R - RT) \times x \\ &\quad + (WL - WS) \times (1 - x)x \end{aligned}$$

関数①

$$\begin{aligned} df(x) &= \frac{d}{dx} (G_m^L - G_m^S) \\ &= -(1250R - RT) + (750R - RT) \\ &\quad + (WL - WS)(1 - 2x) \\ &= -500R + (WL - WS)(1 - 2x) \end{aligned}$$

関数②

※ $f(x, T)$ は組成 x と温度 T , $df(x)$ は組成 x の関数.

3. 小演習 6 - 1 : T_0 線の計算と作図①

変数

(i) i, n, j

(d) $x_0, x_1, x_2, dx,$
 fx, dfx, t

(F) $*fp$

(i)はint, (d)はdouble,
(F)はFILEを表す.

※ 関数は前回と
同様のものを使用

$fp = fopen(...)$

ファイルを開く

n, x_0 入力

t の入力は不要

$j=0, x_2=x_0 ;$
 $j \leq 50 ; j++$

繰返し

$fclose(fp);$

ファイルを閉じる

$t \leftarrow 750. + 10.*j$

$t \leq 750.$

$t \leftarrow 750. + 0.1$

$t \geq 1250.$

$t \leftarrow 1250. - 0.1$

$i \leftarrow 0$

$(i < n) \ \&\& \ (|dx| > EPS)$
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
"解 : $x(B) =$ ", x_2

計算結果の出力 (ファイル)
 $x_2 \quad t$

$i \leftarrow i + 1$

$x_1 \leftarrow x_2$

$fx \leftarrow f(x_1, t)$

$dfx \leftarrow df(x_1)$

$dx \leftarrow -fx/dfx$

$x_2 \leftarrow x_1 + dx$

$x_2 \leq 0.$

$x_2 \leftarrow EPS$

$x_2 \geq 1.$

$x_2 \leftarrow 1. - EPS$

3. 小演習 6 - 1 : T_0 線の計算と作図①

【小演習 6 - 1】繰返し

$j=0, x2=x0 ;$
 $j \leq 50 ; j++$

繰返し

※① ※② ※③
`for (j=0 , x2=x0 ; j<=50 ; j++) {`
 ; (繰返す処理を {} 間に記述する)
`}`

※① : $j=0, x2=x0$: 最初だけ実行

※② : $j \leq 50$: 繰返しを継続する条件

※③ : $j++$: {} 間処理後に毎回実行

3. 小演習 6 – 1 : T_0 線の計算と作図①

出力

出力処理

(1) 画面（標準出力）に出力

```
printf( "フォーマット式", 変数);
```

(2) ファイルに出力 (*fp* : ファイル変数)

```
fp = fopen( "ファイル名", "w" ); // "w"は書出し用
```

```
fprintf( fp, "フォーマット式", 変数);
```

(3) gnuplot にコマンドを送る (*pipe* : パイプ変数)

```
pipe = popen( gnuplotのパス, "w" ); // "w"は書出し用
```

```
fprintf( pipe, "gnuplotコマンド\n" );
```

```
fflush(pipe);
```

例 : `fprintf(fp, "%6.4lf %6.11lf\n", x2, t);`

3. 小演習 6 – 2 : T_0 線の計算と作図②

◆スライド 10～12の自由エネルギー関数において,
 $WL = 5.*R*$ (学籍番号下3桁 – 90.),
 $WS = 5.*R*$ (45. – 学籍番号下3桁) として,
 $0 < x_B < 1$ の組成範囲 (x_B が0.01ステップ) で各組成の
 T_0 温度 T を求め, (x_B, T) のデータをファイル出力し,
「組成 x_B 」 vs 「 T_0 温度 T 」の状態図 (T_0 線) をgnuplot
を用いて作図するプログラムを作成せよ.

※ 組成の下限を $x_B = 0.001$, 上限を $x_B = 0.999$ とせよ.

提出ファイル:

- (1) プログラム (ファイル名: 学籍番号-6-2.c)
- (2) データファイル (ファイル名: 学籍番号-6-2.txt)
- (3) グラフ (ファイル名: 学籍番号-6-2.png)

注意

Cのプログラム中では、「コメント行」や「文字列の出力（printf文）」等以外に、2バイト文字（漢字、ひらがな等の全角文字）は利用できません。

特に、全角のスペース“ ”は要注意です。

解答例では、説明のコメントを日本語で入っていますが、全角文字は一切使わない方が賢明です。