



# HW # 4

## Ge-Si Phase diagram

학번: 20130280

학과: 신소재공학과

이름: 장경현

## Problem

---

- 주어진 Gibbs energy 식을 이용하여 Ge-Si 2원계 상태도를 계산으로 완성하십시오.

### 고려할 점

- X값의 범위
  - 조성이므로 0과 1사이여야 한다.
- 초기값을 0.5 줬을 경우
  - 에러가 발생하므로, 다른 값으로 대체

$$1. \mu_{Si}^L - \mu_{Si}^S = {}^\circ G_{Si}^{dia \rightarrow liquid} + RT \ln X_{Si}^L - RT \ln X_{Si}^S = 0$$

$$\rightarrow f_1(x_{Si}^L, x_{Si}^S) = 50208.00 - 29.7617T + RT \ln \left( \frac{X_{Si}^L}{X_{Si}^S} \right) = 0$$

$$2. \mu_{Ge}^L - \mu_{Ge}^S = {}^\circ G_{Ge}^{dia \rightarrow liquid} + RT \ln X_{Ge}^L - RT \ln X_{Ge}^S = 0$$

$$\rightarrow f_2(x_{Si}^L, x_{Si}^S) = 36944.72 - 30.4975T + RT \ln \left( \frac{1 - X_{Si}^L}{1 - X_{Si}^S} \right) = 0$$

- For nonlinear equation system,  $F(\mathbf{X}) = 0$

Change in  $f_i$  due to the change in  $x_j$ :  $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$

Jacobian matrix  $J(\mathbf{X})$

$$J(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

$$J(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{RT}{X_{Si}^L} & -\frac{RT}{X_{Si}^S} \\ -\frac{RT}{1 - X_{Si}^L} & \frac{RT}{1 - X_{Si}^S} \end{bmatrix}$$

$$P_{(k)} = P_{(k-1)} - [J(P_{(k-1)})]^{-1} F(P_{(k-1)})$$

## Newton's method & Matrix inversion

## Code algorithm

```

for (T = T_low; T < T_high; T = T + 4)
{
  for (i = 1; i < iter; i++)
  {
    if (x1 == x2)
      x2 = x2 + 0.01;

    Jacobian(jaco, T, x1, x2);
    Inverse(jaco);
    Function(func, T, x1, x2);

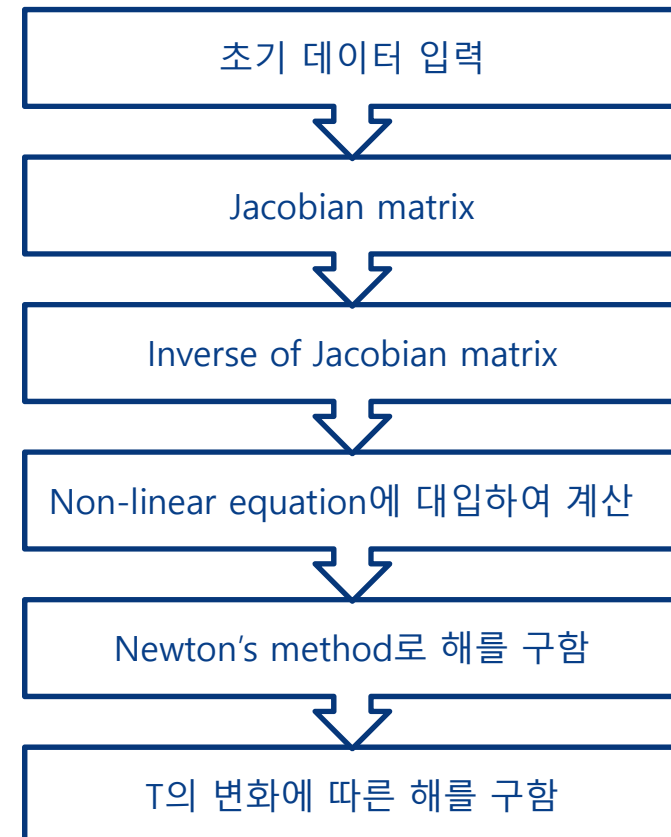
    x1_new = x1 - (jaco[0][2] * func[0] + jaco[0][3] * func[1]);
    x2_new = x2 - (jaco[1][2] * func[0] + jaco[1][3] * func[1]);

    if (fabs(x1_new - x1) < error && fabs(x2_new - x2) < error)
      break;

    //조성이 0과 1 사이가 아닐때
    if ((x1_new < 0) || (x1_new > 1))
      x1_new = 0.0001;
    if ((x2_new < 0) || (x2_new > 1))
      x2_new = 0.0001;

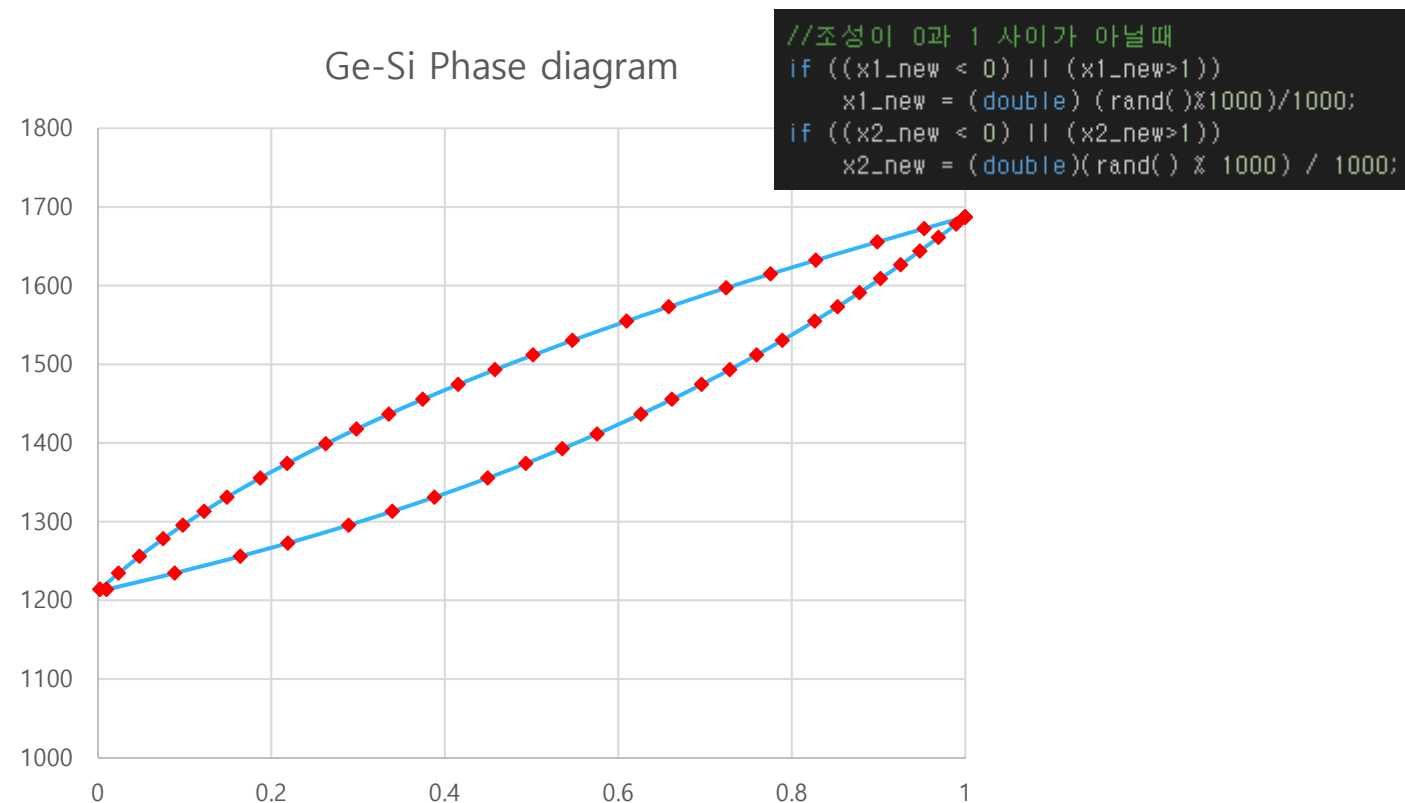
    x1 = x1_new;
    x2 = x2_new;
  }
  printf("%7.2f\t %d \t %7f \t %7f\n", T, i, x1_new, x2_new);
  fprintf(outfile, "%7.2f \t %d \t %7f \t %7f\n", T, i, x1_new, x2_new);
}

```



## Result

- Initial  $x_1=0.0001$ ,  $x_2=0.9999$ , average iteration = 3.08 times
- Initial  $x_1=0.0001$ ,  $x_2=0.0001$ , average iteration = 3.01 times
- Initial  $x_1=0.5$ ,  $x_2=0.5$ , average iteration = 3.01 times -> 순전히 운에 달림



## Conclusion

---

- Gibbs energy식으로 Jacobian과 newton's method를 이용하여 phase diagram 구함
- 실제 값과 계산 값이 거의 일치함을 알 수 있다.
- 초기값에 따라서 계산의 횟수가 달라진다. 특히 발산하는 부분에서는 랜덤하게 초기 값을 변화시켜 iteration 횟수가 운에 달려있다.
- 구하고자 하는 값이 조성이므로  $0 < \text{solution} < 1$ 을 만족해야한다.