

## 塩化カリウム水溶液の熱力学的性質に関する計算プログラム

塩化カリウム水溶液の熱力学的性質を求める計算プログラムをテキスト形式で保存して本サイト内で示している。URL は次の通りである。http://www.hyogo-u.ac.jp/sci/yshibue/solution.html。計算プログラムは Pabalan and Pitzer (1988)が与えた式に基づいて澁江(2008a)が作成し、その後には訂正を行ったプログラム(澁江, 2008b, p. 115)に基づいている。ここでは、Bradley and Pitzer (1979)が与えた式で純水の誘電率を計算している。なお、アボガドロ定数、ボルツマン定数、素電荷の値は Cohen and Taylor (1973)が与えたものを使用している。澁江(2008a)中では水溶液 1 g 当たりの定圧熱容量を出力させていなかったもので、同様に塩化カリウムの標準状態での部分モル定圧熱容量を気体定数  $R$  で割った値、見かけの定圧モル熱容量を  $R$  で割った値、水溶液 1 g 当たりの定圧熱容量を計算して出力させている。

計算プログラム中で用いている気体定数と水のモル質量の値は、Pabalan and Pitzer (1988)が水の状態方程式として用いた Haar et al. (1984)の中で使用されている値である。それぞれ、 $8.31441 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  と  $18.0152 \text{ g mol}^{-1}$  である。本計算プログラムで使用している Haar et al. (1984)の式は、Haar et al. (1984)が示した FORTRAN のコードに手を加えたものであり、澁江(2005)とその後の修正・追加(澁江, 2008b, p. 114-115)に基づいている。

ここでは、計算プログラムへの入力と出力、プログラム中の変数について解説する。そして、最後にプログラムのリストを示す。文書の1行文字数の関係で、プログラムの1つのlineが文書では複数行にまたがっていることがある。プログラムでは行番号が先頭に付くので、行番号ごとにひとまとまりのlineになっていると理解してほしい。

### 1. サブルーチン

プログラム中では多くのサブルーチンが使用されている。各サブルーチンで行っている計算の内容やデータの内容について簡単に記す。サブルーチンの多くは、Haar et al. (1984)が与えた水の状態方程式(HGK式)に基づいて純水の性質を計算するものであり、本サイト内で示している純水の性質を計算するプログラムや他の電解質水溶液に関する計算プログラムと共通のものである。電解質水溶液の性質を計算するために使用するサブルーチンは、PARAMETERSとDEBYEHUCKELとKCLAQだけである。

\*DFINDDOUTTPDTPD では温度と圧力から密度や圧力の密度微分の値を計算する。温度と密度を入力して計算する場合には、このサブルーチンを用いない。

密度の初期推定値(ただし、 $10^{-8} \text{ g cm}^{-3}$  から  $1.9 \text{ g cm}^{-3}$  の範囲に入る初期推定値)を用いて圧力と圧力の密度微分(プログラム中のDPD)を計算する。プログラム中のDPDが0以下になる時には、密度の推定値を改めて圧力を再計算している。(1)まず、圧力の計算値(プログラム中のPP)と圧力の入力値(プログラム中のPPP)から $|1 - PP/PPP|$ を計算する。この値が $10^{-9}$ より小さくなっている時は密度の計算値を正しく求めることができたとしてサブルーチンの計算を終了する。さらに、密度の計算値が $0.3 \text{ g cm}^{-3}$ より大きくて $|1 - PP/PPP|$ の値が $10^{-8}$ より小さくなっている時、 $0.7 \text{ g cm}^{-3}$ より大きくて $|1 - PP/PPP|$ の値が $10^{-7}$ より小さくなっている時も、密度の計算値を正しく求めることができたとしてサブルーチンの計算を終了する。計算値の有効桁数(HGK式の正確さには対応しない有効桁数)は、この終了条件に依存する。Haar et al. (1984)は三つに分けて設定した終了条件のいずれについても一桁大きい値(上記終了条件の10倍の値)を設定している。本計算プログラムの場合、Haar et al. (1984)と同じ条件にすると計算値がHaar et al. (1984)の数表値と食い違うことがしばしば起きたので、上記条件に設定している。(2) $|1 - PP/PPP|$ が終了条件を満たしていない場合には、 $(PPP - PP)$ を密度の圧力微分値で割って得られる値を密度の推定値に加える。実際の計算では、プログラム中のDPD値を1.1倍した値(プログラム中のDPDX)を用い、DPDXの最小値を0.1にしている。

\*CORRTPDLVDDELG は入力した温度と圧力の計算値から気相と液相の密度とこれらのギブスエネルギーの差を計算する。温度が646.3 K以下の時と646.3 Kを超える時を分けて考える。

温度が646.3 K以下の時は、まず、サブルーチンDFINDDOUTTPDTPDを用いて液相の密度(プ

プログラム中の DL) を計算する。次に、サブルーチン THERMDT を用いて温度と密度の計算値から液相のギブスエネルギー (プログラム中の GL) を計算する。サブルーチン THERMDT を用いて求めた GL の値は、1 g 当たりのギブスエネルギーを  $RT$  で割った値である。同様に、サブルーチン DFINDDOUTTPDTPD を用いて気相の密度 (プログラム中の DV) を計算する。次に、サブルーチン THERMDT を用いて温度と密度の計算値から気相のギブスエネルギー (プログラム中の GV) を計算する。そして、 $GL - GV$  の値を求める (プログラム中の DELG)。DELG が 0 の時は気液二相平衡状態の時に相当する。Haar et al. (1984) は DELG の絶対値が  $10^{-4}$  より小さくなった時に気液二相が平衡状態になったと処理している。DELG の値に関する処理は、サブルーチン PCORRTPDLDV で行う。

温度が 646.3 K を超える時は、まず、気相と液相の密度を計算し、気相の密度を用いて圧力を計算する。ただし、液相の密度の値は圧力の計算に使用しない。

- \*BBT では HGK 式中の base 関数の計算に必要なパラメータ ( $b$  と  $\bar{B}$ ) の計算を行う。あわせて、 $db/dT$ ,  $d^2b/dT^2$ ,  $d\bar{B}/dT$ ,  $d^2\bar{B}/dT^2$  の計算も行う。
- \*BASEDT では密度と温度の値を base 関数に代入して、圧力を密度と気体定数と温度の積で割った値 (プログラム中の Z), Z を  $y (= bp/4)$  で偏微分して得られる値 (プログラム中の DZB) と温度で偏微分して得られる値 (プログラム中の DPDTB) を求める。さらに、密度と温度の値から、ヘルムホルツエネルギー (プログラム中の AB), ギブスエネルギー (プログラム中の GB), エントロピー (プログラム中の SB), 内部エネルギー (プログラム中の UB), エンタルピー (プログラム中の HB), 定容熱容量 (プログラム中の CVB) の値を求める。ただし、これらの計算値は気体定数あるいは気体定数と絶対温度の積で割って無次元化している。
- \*QQT D では温度と密度 (入力値あるいは計算値) を residual 関数に代入してサブルーチン BASEDT と同じ熱力学的性質を計算する。

このサブルーチンでは  $i$  が 1 から 36 の時と 37 から 40 の時に分けて計算を行う。 $i$  が 1 から 36 の時には、プログラム中の Q として圧力, AR としてヘルムホルツエネルギー, DPDTB として圧力の温度微分値, DADT としてヘルムホルツエネルギーの温度微分値, CVR として定容熱容量の値を求める。 $i$  が 37 から 40 の時には、プログラム中の QP として圧力, AR としてヘルムホルツエネルギー, DPDTB として圧力の温度微分値, DADT としてヘルムホルツエネルギーの温度微分値, CVR として定容熱容量の値を求める。そして、 $i$  が 1 から 40 の時の総和として、プログラム中の Q として圧力, AR としてヘルムホルツエネルギー, DPDTB として圧力の温度微分値, SR としてエンタルピー, UR として内部エネルギー, CVR として定容熱容量の値を求める。ただし、これらの計算値は気体定数あるいは気体定数と絶対温度の積で割って無次元化している。

Haar et al. (1984) は、純水の密度  $\rho$  と係数  $\rho_i$  ( $i$  は 37 から 40) の差の絶対値が  $10^{-10}$  未満の時は  $\rho/\rho_i - 1$  の値を  $10^{-10}$  に取っている。本計算プログラムでも同じようにしている。この演算は Haar 達の計算式通りになっていない箇所である。

- \*THERMDT ではサブルーチン IDEALT, サブルーチン BASEDT, サブルーチン QQT D を用いてヘルムホルツエネルギー (プログラム中の AD), ギブスエネルギー (プログラム中の GD), エントロピー (プログラム中の SD), 内部エネルギー (プログラム中の UD), エンタルピー (プログラム中の HD), 定容熱容量 (プログラム中の CVDX), 定圧熱容量 (プログラム中の CPD), 圧縮係数 (プログラム中の Z), 圧力の密度微分 (プログラム中の DPDD), 圧力の温度微分 (プログラム中の DPDT) の値を計算する。いずれの値もサブルーチン IDEALT, サブルーチン BASEDT, サブルーチン QQT D を用いて計算した値の和を取り、気体定数あるいは気体定数と絶対温度の積で割って無次元化した値として求めている。

三重点での液相のエネルギーを基準状態に取っているため、この時に内部エネルギーとエンタルピーの値が 0 になるようにしている。つまり、UD と SD の値が 0 になるようにする。Haar et al. (1984) は、基準状態での UD と SD の値が 0 になるように調節するための定数 UREF と定数 SREF を UD と SD の計算に使用している。Haar et al. (1984) が与えた UREF と SREF の値を使用した時、本計算プログラムで得られる三重点での液相の内部エネルギーの値は  $2.84217 \cdot 10^{-5} \text{ J g}^{-1}$  でありエンタルピーの値は  $-3.77677 \cdot 10^{-6} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$  になった。これらの値は 0 に十分に近いとも言えるが、0 にさらに近づけるために本計算プログラムでは UREF の値を Haar et al. (1984) が与えた値  $-4328.455039$  から

- 4328.454977 に改め、SREF の値を Haar et al. (1984) 中の 7.6180802 から 7.6180720 に改めている。この結果、三重点での液相の内部エネルギーの計算値は  $-1.91523 \cdot 10^{-7} \text{ J g}^{-1}$  になりエントロピーの値は  $7.71531 \cdot 10^{-9} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$  になった。
- \*SECDERIVP では HGK 式において圧力  $p$  の温度  $T$  あるいは密度  $\rho$  に関する 2 階の偏導関数値を求めている。さらに、圧力一定の条件下での密度の温度微分の値も計算している。つまり、 $(\partial^2 p / \partial \rho^2)_T$ ,  $(\partial^2 p / \partial T \partial \rho)$ ,  $(\partial^2 p / \partial T^2)_\rho$ ,  $(\partial^2 \rho / \partial T^2)_p$  を求めている。圧力の単位は MPa であり、密度の単位は  $\text{g cm}^{-3}$ , 温度の単位は K である。
  - \*PST では入力した温度から飽和蒸気圧の近似値を計算する。このサブルーチンは、温度と密度を入力して圧力を計算する場合には使用しない。臨界温度以下の温度条件で圧力を入力して密度を計算する場合、密度の初期推定値を考えるために圧力を入力値を飽和蒸気圧と比較しておく必要がある。液相と気相では密度の値が大きく違っているので、飽和蒸気圧を求めておく必要がある。このサブルーチンでは、314 K 以下と 314 K より高温の条件に分けて飽和蒸気圧の近似値を求めている。
  - \*IDEALT では温度から理想気体状態におけるヘルムホルツエネルギー (プログラム中の AI), ギブスエネルギー (プログラム中の GI), エントロピー (プログラム中の SI), 内部エネルギー (プログラム中の UI), エンタルピー (プログラム中の HI), 定容熱容量 (プログラム中の CVIX), 定圧熱容量 (プログラム中の CPI) の値を計算する。いずれの値も気体定数あるいは気体定数と絶対温度の積で割って無次元化した値として求めている。
  - \*PCORRTPDLVDV ではサブルーチン PST とサブルーチン CORRTPDLVDVDELG を用いて入力した温度における飽和蒸気圧と液相や気相の密度 (プログラム中の DLL と DVV) を計算する。サブルーチン PST で飽和蒸気圧の近似値を求めた後で、サブルーチン CORRTPDLVDVDELG で気相と液相の密度推定値 (プログラム中の DV と DL) とこれらのギブスエネルギーの差 (プログラム中の DELG) を計算する。これらの計算結果を用いて、飽和蒸気圧の近似値に補正值  $\delta p$  を加える。補正值の計算式は次の通りである。

$$\delta p = \text{DELG} \times RT / (1/DV - 1/DL)$$

DELG の絶対値が 0.00001 より小さくなっている時は補正值を加えた圧力条件で気液二相が平衡状態にあるとして、この時の圧力を飽和蒸気圧 (プログラム中の PPP であり P), 液相と気相の密度 (プログラム中の DLL と DVV) を気液二相の密度とする。DELG の絶対値が 0.00001 以上の時には、気液二相の密度の計算値と補正後圧力 (プログラム中の PPP) を用いて再びサブルーチン CORRTPDLVDVDELG で DELG を計算する。気液二相平衡状態に関する DELG の条件を Haar et al. (1984) は絶対値が  $10^{-4}$  より小さい時としたが、本計算プログラムで臨界点付近の計算を行おうとすると、もう一桁小さくする必要があるのである。

サブルーチン CORRTPDLVDVDELG の所で記したように、温度が 646.3 K を超える時には気相と液相の密度および飽和蒸気圧を、このサブルーチンで計算している。その際に、DELG を 0 とおいている。したがって、サブルーチン PCORRTPDLVDV では  $\delta p$  の値が 0 になっている。

- \*UNIT で温度、密度、圧力の単位を入力する。そして、入力値を計算プログラム中で用いる単位 (圧力は MPa, 密度は  $\text{g cm}^{-3}$ , エネルギーは  $\text{J g}^{-1}$ ) に換算する。
- \*TTTT では入力した温度を HGK 式中で用いる絶対温度に換算する。
- \*BLOCKDATA では HGK 式中で用いられている定数値や文字列を読み込む。プログラムで読み込む値は HGK 式の次の値に相当する。ATZ(I)は  $T_i$  に相当し、ADZ(I)は  $\rho_i$ , AAT(I)は  $\beta_i$ , AAD(I)は  $\alpha_i$  に相当する。これらの値は residual 関数を計算するサブルーチン QQTD で用いる。GASCON は気体定数の値を水のモル質量で割って得られる値で、水 1 g 当たりの気体定数に相当する (したがって単位は  $\text{J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$  である)。TZ は 647.073 で、サブルーチン BBT とサブルーチン QQTD で用いる。INC はサブルーチン QQTD で  $T_i, \rho_i, \alpha_i, \beta_i$  を含まない項の数を表す。UREF と SREF は、三重点を基準状態 (ヘルムホルツエネルギーとエントロピーの値が 0) になるようにするための値である。ALPHA, BETA, GAMMA は base 関数に使用する定数である。BP(I)と BQ(I)はサブルーチン BBT で使用する定数で、BP(I)は  $b$ , BQ(I)は  $\bar{B}$  を計算するための値である。HGKG(I)と II(I)と JJ(I)は residual 関数を計算するための定数で、サブルーチン QQTD で使用する。HGKG(I)は  $g_i$  に相当し、II(I)は  $k_i$  から 1

を引いた値あるいは  $k_i$ ,  $J(I)$  は  $I$  に 1 を加えた値あるいは  $I$  に相当する。 $A(I)$  は飽和水蒸気圧の近似値を求める式で用いる定数で、サブルーチン PST で用いる。 $C(I)$  は ideal gas 関数を計算するための定数で、サブルーチン IDEALT で使用する。 $FD(I)$  と  $FFP(I)$  と  $FFH(I)$  は、それぞれ、密度、圧力、エネルギーの単位を換算するための定数である。いずれもサブルーチン UNIT で使用する。 $NNTS(I)$ ,  $NNDS(I)$ ,  $NNPS(I)$ ,  $NNHS(I)$  は、それぞれ、温度、密度、圧力、エネルギーの単位一覧を表示するための文字列で、いずれもサブルーチン UNIT で用いる。

\*PARAMETERSではPabalan and Pitzer (1988)が与えた塩化カリウム水溶液に関するパラメータ、物理定数、水と塩化カリウムのモル質量の値を読み込む。そして、Bradley and Pitzer (1979)の式で用いるパラメータも読み込む。当時、Ananthaswamy and Atkinson (1984)がデバイーヒュッケルパラメータを計算しており、この報告の中で、Cohen and Taylor (1973)が与えた物理定数が使用されているので、ここでもそのようにした。

\*DEBYEHUCKELではデバイーヒュッケルのパラメータをBradley and Pitzer (1979)の誘電率に関する計算式を用いて求めている。圧力の単位はbarであり、密度の単位は $\text{g cm}^{-3}$ 、温度の単位はKである。

\*KCLAQでは塩化カリウム水溶液の熱力学的性質を計算する。計算する値は次の通りである。

- (1)標準状態における純水1モル当たりの体積と塩化カリウムの部分モル体積
- (2)標準状態における純水1モル当たりのギブスエネルギーと塩化カリウムの部分モルギブスエネルギーを気体定数と絶対温度の積で割った値
- (3)標準状態における純水1モル当たりのエンタルピーと塩化カリウムの部分モルエンタルピーを気体定数と絶対温度の積で割った値
- (4)標準状態における純水1モル当たりのエントロピーと塩化カリウムの部分モルエントロピーを気体定数で割った値
- (5)標準状態における純水1モル当たりの定圧モル熱容量と塩化カリウムの部分モル定圧熱容量を気体定数で割った値
- (6)水溶液の密度
- (7)浸透係数
- (8)見かけの相対モルエンタルピー (過剰モルエンタルピー) を気体定数と絶対温度の積で割った値
- (9)過剰モルエントロピーを気体定数で割った値
- (10)見かけの定圧モル熱容量を気体定数で割った値
- (11)水溶液1 g当たりのエンタルピー
- (12)水溶液1 g当たりのエントロピー
- (13)水溶液1 g当たりの定圧熱容量

## 2. 入力と出力

プログラムの入力例と出力例を表1と表2に示す。入力例にはプログラムからの問いかけについての説明を加えている。また、出力例を示す表2には、出力値についての説明を加えている。表2中で、温度、圧力、純水の密度の単位は入力したものをそのまま用いている。また、密度の単位を  $\text{kg m}^{-3}$  に選んでも、水溶液の密度は  $\text{g cm}^{-3}$  が単位である。入力した温度・圧力条件における純水の密度だけが  $\text{kg m}^{-3}$  を単位にして出力される。

本計算プログラムで使用する気体定数の値は、Haar et al. (1984)が用いた値とは異なっている。そこで、質量モル濃度として0を入力した時 (あるいは誤って負の値を入力した時) には質量モル濃度を再入力するようにしている。

表1 プログラムの入力例と入力値についての説明

---

```
run
*****
* Enter units      *
*****
TEMPERATURE
Choose from 1=deg K, 2=deg C←温度の単位を選ぶ
? 2←2 の摂氏温度を選んだ
DENSITY
Choose from 1=kg/m3, 2=g/cm3←密度の単位を選ぶ
? 2←2 の g/cm3 を選んだ
PRESSURE
Choose from 1=MPa, 2=bar←圧力の単位を選ぶ
? 2←2 の bar を選んだ
Pressure? If end, input 0? 1.01325←圧力を 1.01325 と入力した
Temperature? 25←温度を 25 と入力した
Molality? 1.0←塩化カリウムの質量モル濃度を 1.0 と入力した
Will you continue the calculation? Input Y(or y) or N(or n)? n←計算を続けないと入力した
OK←計算と印刷が終了したことを示すメッセージ
```

---

表2 表1で示した入力値に対する出力\*

---

T(deg C)=	+25.0000	P(bar)=	+1.01325D+000	D(water)=	+9.97062D-001 (g/cm <sup>3</sup> )	←温度, 圧力, 純水の密度とその単位を表示する。密度の有効桁数は6桁
APHI=	+0.3915	← $A_\phi$				
AH/RT=	+0.801	← $A_H$ を気体定数と絶対温度の積で割った値				
AJ/R=	+3.94	← $A_J$ を気体定数と絶対温度の積で割った値				
AV=	+1.875	← $A_V$				
V(water)=	+18.068	VKCl=	+26.98	←水と塩化カリウムの標準状態での部分モル体積(cm <sup>3</sup> /mol)		
G/RT=	-22.1689	GKCl/RT=	-18.996			
H/RT=	-13.7558	HKCl/RT=	-0.000			
S/R=	+8.4131	SKCl/R=	+18.996	←水と塩化カリウムの標準状態での部分モルエントロピーを気体定数で割った値		
Cp/R=	+9.064	CpKCl/R=	-13.71	←水と塩化カリウムの標準状態での部分モル定圧熱容量を気体定数で割った値		
m=1.00000	Density(g/cm <sup>3</sup> )=	+1.04150	←入力した質量モル濃度と密度の計算値 (単位はg/cm <sup>3</sup> )			
	Osmotic coeff=	+0.899	←水溶液中の水の浸透係数			
	Activity coeff=	+0.605	←イオンの平均活量係数			
	phiL/RT=	-0.025	←見かけの相対モルエンタルピーを気体定数と絶対温度の積で割った値			
	Ex entr/R=	+0.779	←過剰モルエンタルピーを気体定数で割った値			
	phiCp/R=	-9.14	←見かけの定圧モル熱容量を気体定数で割った値			
	Hspecific(J/g)=	-1.7616D+003	←水溶液1 g当たりのエンタルピー(J/g)			
	Sspecific(J/g K)=	+3.782	←水溶液1 g当たりのエンタルピー(J/g K)			
	Cpspecific(J/g K)=	+3.822	←水溶液1 g当たりの定圧熱容量(J/g K)			

---

\*G/RT 水の標準状態での部分モルギブスエネルギーを気体定数と絶対温度の積で割った値  
GKCl/RT 塩化カリウムの標準状態での部分モルギブスエネルギーを気体定数と絶対温度の積で割った値  
H/RT 水の標準状態での部分モルエンタルピーを気体定数と絶対温度の積で割った値  
HKCl/RT 塩化カリウムの標準状態での部分モルエンタルピーを気体定数と絶対温度の積で割った値

### 3. プログラム中の変数

プログラムで用いている変数（文字変数とFORループの制御変数を除く）の意味を表にして以下に示す。変数の中にはプログラム中で二通りの意味で用いられているものがある。そこで、このような変数については、変数名の後の括弧内に行番号を示している。なお、配列変数の添字に大文字のIを用いているが、その添字は係数に付けている下付き文字*i*と同義である。また、HGK式で用いられている変数やHGK式を用いて計算している変数は「変数の意味」欄に「(HGK式)」と記し、純水の性質の計算に関係する変数は「変数の意味」欄に「(純水)」と記している。

プログラム中の変数	変数の意味
A(I)	飽和水蒸気圧の近似式の係数 (HGK式)
AA	1 (HGK式)
AAD(I)	$\alpha_i$ (HGK式)
AAT(I)	$\beta_i$ (HGK式)
AB	$A_{\text{base}}/RT$ (HGK式)
AD	$A/RT$ (HGK式)
ADZ(I)	$\rho_i$ (HGK式)
AH	$A_H$ (純水)
AI	$A_{\text{ideal gas}}/RT$ (HGK式)
AJ	$A_J$ (純水)
ALPH	$\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$
ALPHA	$\alpha$ (HGK式)
APHI	$A_\phi$ (純水)
AR	$A_{\text{residual}}/RT$ (HGK式)
ATM	1.01325 bar
ATT	$\beta_i$ (HGK式)
ATZ(I)	$T_i$ (HGK式)
AV	$A_V$ (純水)
B0J	179 bar における $\beta^{(0)J}$
B0JKCL(I) (I = 1, ..., 7)	179 bar における $\beta^{(0)J}$ を計算するための係数
B0KCL(I) (I = 1, ..., 11)	179 bar における $\beta^{(0)}$ を計算するための係数
B0L	179 bar における $\beta^{(0)L}$
B0LKCL(I) (I = 1, ..., 9)	179 bar における $\beta^{(0)L}$ を計算するための係数
B1	$b$ (HGK式)
B1J	$\beta^{(1)J}$
B1JKCL(I) (I = 1, ..., 7)	$\beta^{(1)J}$ を計算するための係数
B1KCL(I) (I = 1, ..., 11)	$\beta^{(1)}$ を計算するための係数
B1L	$\beta^{(1)L}$
B1LKCL(I) (I = 1, ..., 9)	$\beta^{(1)L}$ を計算するための係数
B1T	$\frac{db}{dT}$ (HGK式)

---

B1TT	$\frac{d^2b}{dT^2}$ (HGK式)
B2	$\bar{B}$ (HGK式)
B2T	$\frac{d\bar{B}}{dT}$ (HGK式)
B2TT	$\frac{d^2\bar{B}}{dT^2}$ (HGK式)
BASEF	$p_{\text{base}}/\rho RT$ (HGK式)
BB2TT	$T^2 \left( \frac{d^2\bar{B}}{dT^2} \right)$ (HGK式)
BC	ボルツマン定数 ( $1.380662 \cdot 10^{-16}$ erg K <sup>-1</sup> )
BETA	$\beta$ (HGK式)
BITG	$\int_{179}^p \left( \frac{\partial \beta^{(0)}}{\partial p} \right)_T dp$
BITGT	$\int_{179}^p \left( \frac{\partial \beta^{(0)V}}{\partial T} \right)_p dp$
BJ	179 barにおける $B^J$
BL	179 barにおける $B^L$
BM	$B$
BM0	179 barにおける $\beta^{(0)}$
BM1	$\beta^{(1)}$
BP(1)	$b_0$ (HGK式)
BP(2)	$b_1$ (HGK式)
BP(3)	$b_2$ (HGK式)
BP(4)	0 (HGK式)
BP(5)	$b_3$ (HGK式)
BP(6)	$b_4$ (HGK式)
BP(7)	$b_5$ (HGK式)
BP(8)	0 (HGK式)
BP(9)	0 (HGK式)
BP(10)	0 (HGK式)
BPST	飽和水蒸気圧の近似式で用いる変数 (HGK式)
BQ(1)	$B_0$ (HGK式)
BQ(2)	0 (HGK式)
BQ(3)	$B_1$ (HGK式)
BQ(4)	$B_2$ (HGK式)
BQ(5)	$B_3$ (HGK式)
BQ(6)	$B_4$ (HGK式)
BQ(7)	$B_5$ (HGK式)
BQ(8)	0 (HGK式)
BQ(9)	0 (HGK式)
BQ(10)	0 (HGK式)

---



---

BV(I)	$\left(\frac{T_0}{T}\right)^{i-1}$ (HGK式)
BVKCL	$\left(\frac{\partial\beta^{(0)}}{\partial p}\right)_T$
C(I)	$C_i$ (HGK式)
CJ	$C^J$
CJKCL(I)	$C^J$ を計算するための係数
(I = 1, ..., 7)	
CKCL(I)	$C$ を計算するための係数
(I = 1, ..., 11)	
CL	$C^L$
CLKCL(I)	$C^L$ を計算するための係数
(I = 1, ..., 9)	
CM	$C$
CP0	$\bar{C}_{p, \text{KCl}}^\circ(T, 179\text{bar})$
CPD	$C_p/R$ (HGK式)
CPI	$C_{V \text{ ideal gas}}$ の計算式で用いる変数 (HGK式)
CPK	$\bar{C}_{p, \text{KCl}}^\circ(T, p)$
CPKCL(I)	179 barにおいて標準状態における塩化カリウムの部分モル定圧熱容量を
(I = 1, ..., 7)	計算するための係数
CPSPEC	水溶液1 g当たりの定圧熱容量
CPW	$C_{p, \text{water}}^\circ$
CPX	$C_p^E$
CVB	$C_{V \text{ base}}/R$ (HGK式)
CVDX	$C_V/R$ (HGK式)
CVIX	$C_{V \text{ ideal gas}}/R$ (HGK式)
CVR	$C_{V \text{ residual}}/R$ (HGK式)
D	計算過程で用いる密度の値 (HGK式)
D2DDT2	$\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2}\right)_p$ (HGK式)
D2DDT2A	$\left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2}\right)_p$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2EPS	$\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial T^2}\right)_p$ (純水)
D2EPSX	$\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial T^2}\right)_p$ を計算するための式で用いる変数 (純水)
D2F	$\frac{-l_i(l_i+1)}{k_i}(1-e^{-\rho})^{k_i}\left(\frac{T_0}{T}\right)^{l_i+1}\frac{1}{T_0}$ (HGK式)
D2PDD2	$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2}\right)_T$ (HGK式)

---

---

D2PDDDD1	$\frac{1}{RT} \left( \frac{\partial^2 p_{\text{base}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ (HGK式)
D2PDT2	$\left( \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_\rho$ (HGK式)
D2PDTDD	$\left( \frac{\partial^2 p}{\partial T \partial \rho} \right)$ (HGK式)
D2PDTDT1	$\frac{1}{\rho R} \left( \frac{\partial^2 p_{\text{base}}}{\partial T^2} \right)_\rho$ (HGK式)
D2PRESIDDD2	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ (HGK式)
D2PRESIDDD2A	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2PRESIDDD2B	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2PRESIDDD2C	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2PRESIDDDDD1	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial \rho^2} \right)_T$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2PRESIDDDDT	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial T \partial \rho} \right)$ (HGK式)
D2PRESIDDDDTTC	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial T \partial \rho} \right)$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
D2PRESIDDT2	$\left( \frac{\partial^2 p_{\text{residual}}}{\partial T^2} \right)_\rho$ (HGK式)
DADT	$\left( \frac{\partial A_{\text{residual}}}{\partial T} \right)_\rho$ (HGK式)
DBDP(I)	$\left( \frac{\partial \beta^{(0)}}{\partial p} \right)_T$ を計算するための係数
DBLDTITG	$\int_p^{179} \left[ \left( \frac{\partial^2 \beta^{(0)V}}{\partial T^2} \right)_p + \frac{2}{T} \left( \frac{\partial \beta^{(0)V}}{\partial T} \right)_p \right] dp$
DD	密度の計算値 (HGK式)
DDDT	$\left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$ (HGK式)
DDZ	$\rho_i$ (HGK式)
DE	$\varepsilon$ の温度微分を求めるための式で用いる変数(純水)
DEL	$\delta_i$ (HGK式)

---

---

DELG	液相と気相のギブスエネルギーの差 (計算値) を無次元化した値 (HGK式)
DEPS	$\frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_p$ (純水)
DEPSDP	$\left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right)_T$ (純水)
DET	$\varepsilon$ の圧力微分を求めるための式で用いる変数 (純水)
DEX	$\delta_i^{k_i} \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i})$ (HGK式)
DFDT	$\frac{-l_i}{k_i} (1 - e^{-\rho})^{k_i} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{l_i+1} \frac{1}{T_0}$ (HGK式)
DGSS	温度と圧力の値から密度を計算するための初期推定値 (HGK式)
DHDPP	$\int_0^p \left( \frac{\partial \bar{H}_{KCl}}{\partial p} \right)_T dp$
DL	計算過程で用いる液相の密度の値 (HGK式)
DLIQ	計算過程で用いる液相の密度の値 (HGK式)
DLL	計算過程で用いる液相の密度の値 (HGK式)
DOUT	サブルーチンの*DFINDDOUTPDTDPDから計算した密度の値 (HGK式)
DP (line 15650)	密度の推定値から計算した圧力と入力圧力あるいは飽和水蒸気圧の計算値との違い (HGK式)
DP (line 28950)	飽和水蒸気圧の近似値に対する補正項 (HGK式)
DPD	$\left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$ (HGK式)
DPDD	$\left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$ (HGK式)
DPDT	$\left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho$ (HGK式)
DPDTB	$\frac{1}{\rho RT} \left( \frac{\partial p_{\text{base}}}{\partial T} \right)_\rho$ (HGK式)
DPDTBASE	$\left( \frac{\partial p_{\text{base}}}{\partial T} \right)_\rho$ (HGK式)
DPDTR	$\left( \frac{\partial p_{\text{residual}}}{\partial T} \right)_\rho$ (HGK式)
DPDX	温度と密度の推定値から計算した $(\partial p / \partial \rho)_T$ の値に関するもので、密度の推定値を改良するために用いる。(HGK式)
DPT	$\frac{-l_i}{T} \left( \frac{T_0}{T} \right)^{l_i} \rho^2 e^{-\rho} (1 - e^{-\rho})^{k_i-1}$ (HGK式)
DQ	$\left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T$ (HGK式)
DRHODPDD	$\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T$ (HGK式)

---

---

DS0KCl	$\int_{1.0}^{1.01325} \left( \frac{\partial \bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}}{\partial p} \right)_T dp$
DSKCL	$\int_{179}^p \left( \frac{\partial \bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}}{\partial p} \right)_T dp$
DSKCLTRPR	$\int_{1.01325}^{179} \left( \frac{\partial \bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}}{\partial p} \right)_T dp$
DSOLN	$d_{\text{aq}}$
DU(I)	$\varepsilon$ を計算するための係数 (純水)
DV	計算過程で用いる気相の密度の値 (HGK式)
DVAP	計算過程で用いる気相の密度の値 (HGK式)
DVV	計算過程で用いる気相の密度の値 (HGK式)
DWD2DDT2	$\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial T^2} \right)_p$ (HGK式)
DWDDDT	$\frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p$ (HGK式)
DZ0	$\frac{d}{dy} \left[ \frac{1 + \alpha y + \beta y^2}{(1-y)^3} \right]$ (HGK式)
DZB	$\frac{1}{\rho RT} \left( \frac{\partial p_{\text{base}}}{\partial y} \right)_T$ (HGK式)
E (line 20100)	$e^{-p}$ (HGK式)
E (line 36400)	$\varepsilon$ を計算するための式で用いる変数 (純水)
EAI	$\exp(-2I^{1/2})$
EE	素電荷 ( $4.803242 \cdot 10^{-10}$ esu)
EPS	$\varepsilon$ (純水)
EX1	$-\alpha_i \delta_i^{k_i}$ (HGK式)
EX2	$-\beta_i \tau_i^2$ (HGK式)
FCT	$\frac{\delta_i^{l_i}}{\rho_i} (l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}) \rho^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (HGK式)
FD	密度の単位を換算するための係数。計算は $\text{g cm}^{-3}$ を単位にして行っている。(HGK式)
FFD(I)	密度の単位を換算するための係数。計算は $\text{g cm}^{-3}$ を単位にして行っている。(HGK式)
FFP(I)	圧力の単位を換算するための係数。計算はMPaを単位にして行っている。(HGK式)
FP	圧力の単位を換算するための係数。
G	$G$ (HGK式)
GAMMA	$\gamma$ (HGK式)
GASCON	気体定数を水のモル質量で割った値( $0.461522 \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$ )

---

---

GD	$G/RT$ (HGK式)
GEX	$G^E$
GI	$A_{\text{ideal gas}}$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
GKCL	$\overline{G}_{\text{KCl}}^\circ$
GL	液相のギブスエネルギーの計算値を無次元化した値 (HGK式)
GM	$\gamma_{\pm}$
GM1	$\gamma_{\pm}$ を計算するための式で用いる変数
GV	気相のギブスエネルギーの計算値を無次元化した値 (HGK式)
H	$H$ (HGK式)
HD	$H/RT$ (HGK式)
HF	$\frac{\ln(1+1.2I^{1/2})}{2.4}$
HGKG(I)	$g_i$ (HGK式)
HI	$U_{\text{ideal gas}}$ を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
HKCL	$\overline{H}_{\text{KCl}}^\circ(T, p)$
HKCLPR	$\overline{H}_{\text{KCl}}^\circ(T, 179\text{bar})$
HKCLTRPR	$\overline{H}_{\text{KCl}}^\circ(298.15\text{K}, 179\text{bar})$
HSPEC	水溶液1 g当たりのエンタルピー
ID	密度の単位を選択するための変数
II(I)	$k_i - 1$ ( $i = 1, \dots, 36$ )あるいは $k_i$ ( $i = 37, \dots, 40$ ) (HGK式)
INC	36 (HGK式)
IP	圧力の単位を選択するための変数
IT	温度の単位を選択するための変数
JJ(I)	$l_i + 1$ ( $i = 1, \dots, 36$ )あるいは $l_i$ ( $i = 37, \dots, 40$ ) (HGK式)
K	$k_i$ (HGK式)
KCL	塩化カリウムのモル質量( $74.551 \text{ g mol}^{-1}$ )
KM	$l_i$ (HGK式)
L	$l_i + 1$ (HGK式)
MI	イオン強度
MOL	質量モル濃度
MW	水のモル質量( $18.0152 \text{ g mol}^{-1}$ )
OSC	浸透係数
P	計算過程で用いる圧力 (HGK式)
PHICP	${}^\phi C_{p, \text{KCl}}$
PHIL	${}^\phi L$
PINPUT	入力した圧力値をMPaで表した値 (HGK式)
PL	飽和水蒸気圧の近似値を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
PP	計算過程で用いる圧力の値 (HGK式)
PPP	圧力の入力値あるいは気液二相平衡条件下ならば飽和水蒸気圧 (HGK式)
PR	179 bar
PRES	$p$ (HGK式)
PS	飽和水蒸気圧の近似値 (HGK式)
Q	$p_{\text{residual}}$ (HGK式)
Q0	$p_{\text{residual}}$ (HGK式)
Q2A	$T \sum_{i=37}^{40} \frac{g_i}{T_i^2} (2\beta_i - 4\beta_i^2 \tau_i^2) \delta_i^{l_i} \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (HGK式)

---

---

Q5	$\left(\frac{\partial p_{\text{residual}}}{\partial \rho}\right)_T$ (HGK式)
Q5T	$\frac{1}{\rho_i} \left[ \frac{2}{\rho} + \frac{1}{\rho_i} (l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}) \right] (l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}) \delta_i^{l_i} \rho^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ $- [l_i \delta_i^{-2} + \alpha_i k_i (k_i - 1) \delta_i^{k_i-2}] \delta_i^{l_i} \left(\frac{\rho}{\rho_i}\right)^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (HGK式)
Q10 (line 20150)	$\rho^2 e^{-\rho}$ (HGK式)
Q10 (line 22350)	$\delta_i^{l_i} \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (HGK式)
Q20	$1 - e^{-\rho}$ (HGK式)
QDPQ	$\left(\frac{\partial p_{\text{residual}}}{\partial \rho}\right)_T$ (HGK式)
QK	$k_i$ (HGK式)
QKM	$l_i$ (HGK式)
QL	$l_i + 1$ (HGK式)
QM	$l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}$ (HGK式)
QP(line 20900)	$g_i \rho^2 e^{-\rho} (1 - e^{-\rho})^{k_i-1} \left(\frac{T_0}{T}\right)^{l_i}$ (HGK式)
QP(line 22600)	$\sum_{i=37}^{40} \left[ \frac{g_i}{\rho_i} (l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}) \delta_i^{l_i} \rho^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2) \right]$ (HGK式)
QPQ	$p_{\text{residual}}$ (HGK式)
QPST	飽和水蒸気圧の近似値を計算するための式で用いる変数 (HGK式)
QR(I)	$\rho^2 e^{-\rho} (1 - e^{-\rho})^{i-2}$ (HGK式)
QT(I)	$\left(\frac{T_0}{T}\right)^{i-2}$ (HGK式)
QV	$T_0/T$ (HGK式)
QZR(I)	$\rho^2 e^{-\rho} (1 - e^{-\rho})^i$ (HGK式)
QZT(I)	$\left(\frac{T_0}{T}\right)^{i-1}$ (HGK式)
RGAS	$R$ (8.31441 J mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
RT	$RT$ (HGK式)
RVGAS	$R$ (83.1441 cm <sup>3</sup> bar mol <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> )
S	$S$ (HGK式)
SOKCL	298.15 K で 1.01325 bar での $\bar{S}_{\text{KCl}}^\circ$
SB	$S_{\text{base}}/R$ (HGK式)
SD	$S/R$ (HGK式)
SI	$S_{\text{ideal gas}}/R$ (HGK式)
SKCL	$\bar{S}_{\text{KCl}}^\circ(T, p)$

---

---

SKCLPR	$\bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}(T, 179\text{bar})$
SKCLPRX	$\bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}(T, 179\text{bar})$ を計算するための式で用いる変数
SKCLTRPR	$\bar{S}_{\text{KCl}}^{\circ}(298.15\text{K}, 179\text{bar})$
SR	$S_{\text{residual}}/R$ (HGK式)
SREF	HGK式では基準状態を三重点での液相にしている。この時にエントロピーの計算値が0になるようにしている。Haar et al. (1984)はサブルーチンTHERMDTで無次元化したエントロピー(SD)の計算値からSREFの値を引いている。三重点でのエントロピーの計算値が0になるようにするためにHaar et al. (1984)はSREFの値を7.6180802とおいた。本計算プログラムでは、SREFの値を7.6180720にして基準状態の計算値を0に近い値にした。
SSPEC	水溶液1 g当たりのエントロピー
SX	$S^E/m$
T	絶対温度で表示した入力温度 (HGK式)
TAU	$\tau_i$ (HGK式)
TAUC	臨界点付近における気相と液相の密度の計算に必要な値 (HGK式)
TD2VDT2	$\int_{179}^p T \left( \frac{\partial^2 \bar{V}_{\text{KCl}}^{\circ}}{\partial T^2} \right)_p dp$
TEX	$\exp(-\beta_i \tau_i^2)$ (HGK式)
TH	$680 - T$
TIDEAL	$T/100$ (HGK式)
TL (line 28000)	$\log(T/100)$ (HGK式)
TL (line 38400)	$T - 227$
TR	$T/647.25$ (HGK式)
TT	温度の入力値 (HGK式)
TTR	298.15
TTT	絶対温度で表示した入力温度 (HGK式)
TX	$T_i$ (HGK式)
TZ	647.073 (HGK式)
UB	$U_{\text{base}}/RT$ (HGK式)
UD	$U/RT$ (HGK式)
UI	$U_{\text{ideal gas}}/RT$ (HGK式)
UR	$U_{\text{residual}}/RT$ (HGK式)
UREF	HGK式では基準状態を三重点での液相にしている。この時に内部エネルギーの計算値が0になるようにしている。Haar et al. (1984)はサブルーチンTHERMDTで無次元化した内部エネルギー(UD)の計算値からUREFの値を絶対温度で割った値を引いている。三重点での内部エネルギーの計算値が0になるようにするためにHaar et al. (1984)はUREFの値を-4328.455039とおいた。本計算プログラムでは、UREFの値を-4328.454977にして基準状態の計算値を0に近い値にした。
V0KCL(I)	$\bar{V}_{\text{KCl}}^{\circ}$ を計算するための係数
VKCL	$\bar{V}_{\text{KCl}}^{\circ}$
VPHI	${}^{\phi}V_{\text{KCl}}$
VSOLN	$V^{\text{total}}$

---

---

W	$\left 1 - \frac{T}{647.25}\right $ (HGK式)
X	圧力の値 (HGK式)
XP	密度の近似値に対する補正項 (HGK式)
XX	$1 - y$ (HGK式)
Y	$b\rho/4$ (HGK式)
Z (line 19050)	$p_{\text{base}}/\rho RT$ (HGK式)
Z (line 23400)	$p/\rho RT$ (HGK式)
Z0	$\frac{1 + \alpha y + \beta y^2}{(1 - y)^3}$ (HGK式)
ZX	$6 + 3\alpha + \beta + 3\alpha y + 4\beta y + \beta y^2$ (HGK式)

---



#### 4. Program list

```
10000 REM HGK + Pabalan & Pitzer for KCl(aq)
10050 DEFDBL A-H, M-Z
10100 DIM HGKG(40), II(40), JJ(40), BP(10), BQ(10)
10150 DIM ATZ(4), ADZ(4), AAT(4), AAD(4)
10200 DIM BV(10), A(8), C(18)
10250 DIM QR(11), QT(10), QZR(9), QZT(9)
10300 DIM FFD(2), FFP(5), NNT$(2), NND$(2), NNP$(5)
10350 DIM DU(10), BOKCL(15), B1KCL(15), CKCL(15), CPKCL(10), VOKCL(20)
10400 DIM DBDP(20), B0LKCL(15), B1LKCL(15), CLKCL(15), B0JKCL(15), B1JKCL(15), CJKCL(15)
10450 GOSUB *BLOCKDATA
10500 GOSUB *UNIT
10850 GOSUB *PARAMETERS
10900 LPRINT
10950 INPUT "Pressure? If end, input 0";X
11000 IF X=0 THEN GOTO 14600
11050 INPUT "Temperature";TT
11100 T=TT
11150 GOSUB *TTTT
11200 T=TTT
11300 RT=GASCON*T
11350 GOSUB *BBT
11400 INPUT "Molality";MOL
11410 IF MOL=<0 THEN GOTO 11400
12250 PRES=X
12300 PINPUT=PRES/FP
12350 DGSS=PINPUT/(T*.4#)
12360 IF T>=647.126# THEN GOTO 12700
12400 DLL=0 : DVV=0
12450 DL=DLL : DLIQ=0
12500 GOSUB *PCORRTPDLDV
12550 IF ABS((PINPUT-P)/P)<=5D-005 THEN PPP=PINPUT : GOTO 13550
12600 IF PINPUT>P THEN DGSS=DL:GOTO 12700
12650 IF PINPUT<P THEN PRINT "Input pressure<vap-sat. pressure" : GOTO 10950
12700 D=DGSS : PPP=PINPUT
12750 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
12800 D=DOUT
12850 GOSUB *THERMDT
12900 DD=DOUT/FD
12950 H=HD*RT
13000 S=SD*GASCON
13050 G=GD*RT
13100 LPRINT USING "T(&      &)=+####.####      P(&  &)=  +#.#####^ ^ ^ ^ ^      D(water)=+#.#####^ ^ ^ ^ ^ (&
&)" : NT$, TT, NP$, PRES, DD, ND$
13150 GOSUB *SECDERIVP
13200 GOSUB *DEBYEHUCKEL
13250 LPRINT USING "APHI=  +#.####";APHI
13300 LPRINT USING "AH/RT=  +##.###";AH/(RGAS*T)
13350 LPRINT USING "AJ/R=  +###.##";AJ/RGAS
13400 LPRINT USING "AV=  +##.###";AV
13450 GOSUB *KCLAQ
13500 GOTO 14500
13550 D=DL
13600 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
13650 D=DOUT
13700 GOSUB *THERMDT
13750 DD=DOUT/FD
13800 H=HD*RT
```

```
13850 S=SD*GASCON
13950 PRES=PPP*FP
14000 G=GD*RT
14050 LPRINT"Liquid phase at the vapor-saturated pressure"
14100 LPRINT USING"T(&      &)=+####.####      P(&      &)= +#.#####^ ^ ^ ^ ^      D(water)=+#.#####^ ^ ^ ^ ^(&
&):NT$, TT, NP$, PRES, DD, ND$
14150 GOSUB *SECDERIVP
14200 GOSUB *DEBYEHUCKEL
14250 LPRINT USING"APHI= +#.####";APHI
14300 LPRINT USING"AH/RT= +##.###";AH/(RGAS*T)
14350 LPRINT USING"AJ/R= +###.###";AJ/RGAS
14400 LPRINT USING"AV= +###.###";AV
14450 GOSUB *KCLAQ
14500 INPUT"Will you continue the calculation? Input Y(or y) or N(or n)";CAL$
14550 IF CAL$="Y" OR CAL$="y" THEN LPRINT : LPRINT : PRINT : GOTO 10950
14600 END
14650 *DFINDDOUTPDTDPD
14700 DD=D
14850 LL=0
14900 LL=LL+1
14950 IF DD<1D-008 THEN DD=1D-008
15000 IF DD>1.9# THEN DD=1.9#
15050 D=DD
15100 GOSUB *QQTd
15150 Q0=Q
15200 GOSUB *BASEDT
15250 PP=RT*DD*BASEF+Q0
15300 DPD=RT*(Z+Y*DZB)+Q5 : DQ=DPD
15350 IF DPD>0 THEN GOTO 15550
15400 IF D>=.2967# THEN DD=DD*1.02
15450 IF D<.2967# THEN DD=DD*.98#
15500 IF LL<10 GOTO 14900
15550 DPDX=DPD*1.1#
15600 IF DPDX<.1# THEN DPDX=.1#
15650 DP=ABS(1#-PP/PPP)
15700 IF DP<1D-009 THEN GOTO 16100
15750 IF D>.3# AND DP<1D-008 THEN GOTO 16100
15800 IF D>.7# AND DP<1D-007 THEN GOTO 16100
15850 XP=(PPP-PP)/DPDX
15900 IF ABS(XP)>.1# THEN XP=XP*.1#/ABS(XP)
15950 DD=DD+XP
16000 IF DD=<0 THEN DD=1D-008
16050 IF LL<30 THEN GOTO 14900
16100 DOUT=DD
16150 RETURN
16200 *CORRTPDLdVDELG
16250 IF T>646.3# THEN GOTO 17150
16300 DLIQ=DLL
16350 IF DLL=<0 THEN DLIQ=1.11#-.0004*T
16400 DLL=DLIQ:D=DLIQ
16450 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
16500 D=DOUT:DL=DOUT
16550 GOSUB *THERMDT
16600 GL=GD
16650 DVAP=DVV
16700 IF DVV=<0 THEN DVAP=PPP/RT
16750 D=DVAP:DVV=DVAP
16800 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
16850 IF DOUT<5D-007 THEN DOUT=5D-007
```

```
16900 D=DOUT:DV=DOUT
16950 GOSUB *THERMDT
17000 GV=GD
17050 DELG=GL-GV
17100 RETURN
17150 PPP=0
17200 IF T>647.126# THEN RETURN
17250 DELG=0
17300 TAUC=.657128#*(1#-T/647.126#)^.325#
17350 DL=.322#+TAUC
17400 DV=.322#-TAUC
17450 D=DV
17500 GOSUB *BASEDT
17550 GOSUB *QQTd
17650 PPP=RT*DV*BASEF+Q
17700 RETURN
17750 *BBT
17800 BV(1)=1#
17850 FOR I=2 TO 10
17900 BV(I)=BV(I-1)*TZ/T
17950 NEXT I
18000 B1=BP(1)+BP(2)*LOG(1#/BV(2))
18050 B2=BQ(1)
18100 B1T=BP(2)*BV(2)/TZ
18150 B2T=0
18200 B1TT=0
18250 B2TT=0
18300 FOR I=3 TO 10
18350 B1=B1+BP(I)*BV(I-1)
18400 B2=B2+BQ(I)*BV(I-1)
18450 B1T=B1T-CDBL((I-2))*BP(I)*BV(I-1)/T
18500 B2T=B2T-CDBL((I-2))*BQ(I)*BV(I-1)/T
18550 B1TT=B1TT+BP(I)*CDBL((I-2))*CDBL((I-2))*BV(I-1)/(T*T)
18600 B2TT=B2TT+BQ(I)*CDBL((I-2))*CDBL((I-2))*BV(I-1)/(T*T)
18650 NEXT I
18700 B1TT=B1TT-B1T/T
18750 B2TT=B2TT-B2T/T
18800 RETURN
18850 *BASEDT
18900 Y=.25#*B1*D
18950 XX=1#-Y
19000 Z0=(1#+ALPHA*Y+BETA*Y*Y)/(XX*XX*XX)
19050 Z=Z0+4#*Y*(B2/B1-GAMMA)
19100 DZ0=(ALPHA+2#*BETA*Y)/(XX*XX*XX)+3#*(1#+ALPHA*Y+BETA*Y*Y)/(XX*XX*XX*XX)
19150 DZB=DZ0+4#*(B2/B1-GAMMA)
19200 AB=(-1#)*LOG(XX)-(BETA-1#)/XX+28.16666667#/(XX*XX)+4#*Y*(B2/B1-GAMMA)+15.16666667#+LOG(D*RT/.101325)
19300 BASEF=Z
19350 BB2TT=T*T*B2TT
19400 UB=(-1#)*T*B1T*(Z-1#-D*B2)/B1-D*T*B2T
19500
CVB=2#*UB+(Z0-1#)*((T*B1T/B1)*(T*B1T/B1)-T*T*B1TT/B1)-D*(BB2TT-GAMMA*B1TT*T*T)-(T*B1T/B1)*(T*B1T/B1)*Y*DZ0
19550 DPDTB=BASEF/T+BASEF*D/Z*(DZB*B1T/4#+B2T-B2/B1*B1T)
19600 SB=UB-AB
19650 RETURN
19700 *QQTd
19750 QR(1)=0
19800 Q5=0
19850 Q=0
19900 AR=0
```

```
19950 DADT=0
20000 CVR=0
20050 DPDTR=0
20100 E=EXP((-1#)*AA*D)
20150 Q10=D*D*E
20200 Q20=1#-E
20250 QR(2)=Q10
20300 QV=TZ/T
20350 QT(1)=T/TZ
20400 FOR I=2 TO 10
20450 QR(I+1)=QR(I)*Q20
20500 QT(I)=QT(I-1)*QV
20550 NEXT I
20600 FOR I=1 TO INC
20650 K=II(I)+1
20700 L=JJ(I)
20750 QK=CDBL(K) : QL=CDBL(L)
20850 QZR(K-1)=QR(K+1) : QZT(L)=QT(L+1) : QZR(K)=QR(K+2) : QZT(L+1)=QT(L+2)
20900 QP=HGKG(I)*AA*QZR(K-1)*QZT(L)
20950 Q=Q+QP
21000 Q5=Q5+AA*(2#/D-AA*(1#-E*(QK-1#)/Q20))*QP
21050 AR=AR+HGKG(I)*QZR(K)*QZT(L)/(Q10*QK*RT)
21100 DFDT=Q20^QK*(1#-QL)*QZT(L+1)/(TZ*QK)
21150 D2F=QL*DFDT
21200 DPT=DFDT*Q10*AA*QK/Q20
21250 DADT=DADT+HGKG(I)*DFDT
21300 DPDTR=DPDTR+HGKG(I)*DPT
21350 CVR=CVR+HGKG(I)*D2F/GASCON
21400 NEXT I
21450 QP=0
21500 Q2A=0
21550 FOR J=37 TO 40
21600 IF HGKG(J)=0 THEN GOTO 22850
21650 K=II(J)
21700 KM=JJ(J)
21750 QK=CDBL(K) : QKM=CDBL(KM)
21800 DDZ=ADZ(J-36)
21850 DEL=D/DDZ-1#
21900 IF ABS(DEL)<1D-010 THEN DEL=1D-010
22000 EX1=(-1#)*AAD(J-36)*DEL^QK
22050 DEX=EXP(EX1)*DEL^QKM
22100 ATT=AAT(J-36)
22150 TX=ATZ(J-36)
22200 TAU=T/TX-1#
22250 EX2=(-1#)*ATT*TAU*TAU
22300 TEX=EXP(EX2)
22350 Q10=DEX*TEX
22400 QM=QKM/DEL-QK*AAD(J-36)*DEL^(QK-1#)
22450 FCT=QM*D*Q10/DDZ
22500 Q5T=FCT*(2#/D+QM/DDZ)-(D/DDZ)*(D/DDZ)*Q10*(QKM/(DEL*DEL)+QK*(QK-1#)*AAD(J-36)*DEL^(QK-2#))
22550 Q5=Q5+Q5T*HGKG(J)
22600 QP=QP+HGKG(J)*FCT
22650 DADT=DADT-2#*HGKG(J)*ATT*TAU*Q10/TX
22700 DPDTR=DPDTR-2#*HGKG(J)*ATT*TAU*FCT/TX
22750 Q2A=Q2A+T*HGKG(J)*(4#*ATT*EX2+2#*ATT)*Q10/(TX*TX)
22800 AR=AR+Q10*HGKG(J)/RT
22850 NEXT J
22900 SR=(-1#)*DADT/GASCON
22950 UR=AR+SR
```

```

23000 CVR=CVR+Q2A/GASCON
23050 Q=Q+QP
23100 RETURN
23150 *THERMDT
23200 GOSUB *IDEALT
23250 GOSUB *BASEDT
23300 GOSUB *QQT
23350 QPQ=Q:QDPQ=Q5
23400 Z=BASEF+QPQ/(RT*D)
23450 DPDD=RT*(BASEF+Y*DZB)+QDPQ
23500 AD=AB+AR+AI-UREF/T+SREF
23550 GD=AD+Z
23600 UD=UB+UR+UI-UREF/T
23650 DPDT=RT*D*DPDTB+DPDTR
23700 CVDX=CVB+CVR+CVIX
23750 CPD=CVDX+T*DPDT*DPDT/(D*D*DPDD*GASCON)
23800 HD=UD+Z
23850 SD=SB+SR+SI-SREF
23900 RETURN
23950 *SECDERIVP
24100 D2PDDDD1=0 : D2PDD2=0 : D2PDTDD=0 : D2PDTDT1=0 : D2PDT2=0 : ZX=0
24150 D2PRESIDDDDD1=0 : D2PRESIDDDDT=0 : D2PRESIDDT2=0 : D2PRESIDDD2=0
24160 D2DDT2A=0 : D2DDT2=0 : DDDT=0
24250 D2PDDDD1=3#+ALPHA+3#*Y+4#*ALPHA*Y+3#*BETA*Y+ALPHA*Y*Y+3#*BETA*Y*Y
24300 D2PDDDD1=D2PDDDD1*B1/(2#*XX*XX*XX*XX*XX)+2#*B1*(B2/B1-GAMMA)
24350 D2PDD2=D2PDDDD1*RT
24400 D2PDTDD=Z0+8#*Y*(B2/B1-GAMMA)+(Y+B1T*D*T/2#)*((ALPHA+2#*BETA*Y)/(XX*XX*XX)+3#*Z0/XX)
24450 ZX=6#+3#*ALPHA+BETA+3#*ALPHA*Y+4#*BETA*Y+BETA*Y*Y
24500 D2PDTDD=D2PDTDD+B1T*D*T*Y*ZX/(2#*XX*XX*XX*XX*XX)
24550 D2PDTDD=D2PDTDD+2#*B2T*D*T-2#*B1T*D*T*GAMMA
24600 D2PDTDD=D2PDTDD*GASCON
24650 D2PDTDT1=(ALPHA+2#*BETA*Y)/(XX*XX*XX)+3#*Z0/XX
24700 D2PDTDT1=D2PDTDT1*(2#*B1T*D+B1TT*D*T)/4#
24750 D2PDTDT1=D2PDTDT1+B1T*B1T*D*T*ZX/(8#*XX*XX*XX*XX*XX)+2#*B2T*D
24800 D2PDTDT1=D2PDTDT1-2#*B1T*D*GAMMA+B2TT*D*T-B1TT*D*T*GAMMA
24850 D2PDT2=D2PDTDT1*GASCON*D
24900 FOR I=1 TO INC
24950 K=II(I)+1
25000 L=JJ(I)
25050 QK=CDBL(K) : QL=CDBL(L)
25100 D2PRESIDDDDD1=2#/(D*D)-4#/D+4#*(QK-1#)*E/(D*Q20)+1#-3#*(QK-1#)*E/Q20+(QK-1#)*(QK-2#)*E*E/(Q20*Q20)
25150 D2PRESIDDD2=D2PRESIDDD2+D2PRESIDDDDD1*HGKG(I)*QT(L+1)*QR(K+1)
25200 D2PRESIDDDDT=D2PRESIDDDDT-(QL-1#)*HGKG(I)*QT(L+1)*QR(K+1)*(2#/D-1#+(QK-1#)*E/Q20)/T
25250 D2PRESIDDT2=D2PRESIDDT2+(QL-1#)*QL*HGKG(I)*QR(K+1)*QT(L+1)/(T*T)
25300 NEXT I
25350 D2PRESIDDD2A=0 : D2PRESIDDDDT=0
25400 FOR J=37 TO 40
25410 IF HGKG(J)=0 THEN GOTO 26750
25450 K=II(J)
25500 KM=JJ(J)
25550 QK=CDBL(K) : QKM=CDBL(KM)
25600 DDZ=ADZ(J-36)
25650 DEL=D/DDZ-1#
25700 IF ABS(DEL)<1D-010 THEN DEL=1D-010
25750 EX1=(-1#)*AAD(J-36)*DEL^QK
25800 DEX=EXP(EX1)*DEL^QKM
25850 ATT=AAT(J-36)
25900 TX=ATZ(J-36)
25950 TAU=T/TX-1#

```

```

26000 EX2=(-1#)*ATT*TAU*TAU
26050 TEX=EXP(EX2)
26100 Q10=DEX*TEX
26150 QM=QKM/DEL-QK*AAD(J-36)*DEL^(QK-1#)
26200 D2PRESIDDD2A=QM*(2#/(D*D)+4#*QKM/(D*DDZ*DEL)+4#*QK*EX1/(D*DDZ*DEL))
26250 D2PRESIDDD2B=QM*(QKM*(QK-1#)+2#*QK*QKM*EX1+QK*(QK-1#)*EX1+QK*QK*EX1*EX1)
26300 D2PRESIDDD2A=D2PRESIDDD2A/DDZ+D2PRESIDDD2B/(DDZ*DDZ*DDZ*DEL*DEL)
26350 D2PRESIDDD2C=(QKM-QK*(QK-1#)*EX1)*(4#/(D+2*QKM/(DDZ*DEL))+2#*QK*EX1/(DDZ*DEL))/(DDZ*DDZ*DEL*DEL)
26400 D2PRESIDDD2A=D2PRESIDDD2A-D2PRESIDDD2C
26450 D2PRESIDDD2A=D2PRESIDDD2A+(2#*QKM+QK*(QK-1#)*(QK-2#)*EX1)/(DDZ*DDZ*DDZ*DEL*DEL*DEL)
26500 D2PRESIDDD2=D2PRESIDDD2+HGKG(J)*Q10*D2PRESIDDD2A*D*D
26550 D2PRESIDDD2C=2#*QM+D*QKM*QM/(DDZ*DEL)+D*QK*EX1*QM/(DDZ*DEL)
26600 D2PRESIDDD2C=D2PRESIDDD2C+D*(QK*(QK-1#)*EX1/(DEL*DEL)-QKM/(DEL*DEL))/DDZ
26650 D2PRESIDDD2=D2PRESIDDD2-2#*D*HGKG(J)*ATT*TAU*Q10*D2PRESIDDD2C/(TX*DDZ)
26700 D2PRESIDDD2=D2PRESIDDD2-2#*D*HGKG(J)*ATT*(1#+2#*EX2)*Q10*QM/(DDZ*TX*TX)
26750 NEXT J
26800 D2PDD2=D2PDD2+D2PRESIDDD2
26850 D2PDTDD=D2PDTDD+D2PRESIDDD2
26900 D2PDT2=D2PDT2+D2PRESIDDD2
26950 D2DDT2A=DPDD*DPDD*D2PDT2-2#*DPDT*DPDD*D2PDTDD+DPDT*DPDT*D2PDD2
27000 D2DDT2=(-1#)*D2DDT2A/(DPDD*DPDD*DPDD)
27050 DDDT=(-1#)*DPDT/DPDD
27100 RETURN
27150 *PST
27200 IF T>314# THEN GOTO 27400
27250 PL=6.3573118#-8858.843#/T+607.56335*T^(-.6#)
27300 PS=.1#*EXP(PL)
27350 RETURN
27400 TR=T/647.25#
27450 W=ABS(1#-TR)
27500 BPST=0
27550 FOR I=1 TO 8
27600 ZPST=CDBL(I)
27650 BPST=BPST+A(I)*W^((ZPST+1#)/2#)
27700 NEXT I
27750 QPST=BPST/TR
27800 PS=22.093*EXP(QPST)
27850 RETURN
27900 *IDEALT
27950 TIDEAL=T/100
28000 TL=LOG(TIDEAL)
28050 GI=(-1#)*(C(1)/TIDEAL+C(2))*TL
28100 HI=(C(2)+C(1)*(1#-TL)/TIDEAL)
28150 CPI=C(2)-C(1)/TIDEAL
28200 FOR I=3 TO 18
28250 GI=GI-C(I)*TIDEAL^CDBL(I-6)
28300 HI=HI+C(I)*CDBL(I-6)*TIDEAL^CDBL(I-6)
28350 CPI=CPI+C(I)*CDBL(I-6)*CDBL(I-5)*TIDEAL^CDBL(I-6)
28400 NEXT I
28450 AI=GI-1#
28500 UI=HI-1#
28550 CVIX=CPI-1#
28600 SI=UI-AI
28650 RETURN
28700 *PCORRTPDLDV
28750 GOSUB *PST
28800 PPP=PS
28850 GOSUB *CORRTPDLVDVDELG
28900 DP=0

```

```
28950 DP=DELG*RT/(1#/DV-1#/DL)
29000 PPP=PPP+DP
29050 IF ABS(DELG)<1D-005 THEN GOTO 29150
29100 DLL=DL:DVV=DV:GOTO 28850
29150 P=PPP
29200 RETURN
29250 *UNIT
29300 PRINT"*****"
29350 PRINT"* Enter units      *"
29400 PRINT"*****"
29450 PRINT A1$
29500 PRINT"Choose from 1=deg K, 2=deg C"
29550 INPUT IT
29600 IF IT<1 OR IT>2 THEN GOTO 29500
29650 NT$=NNT$(IT)
29700 PRINT A2$
29750 PRINT"Choose from 1=kg/m3, 2=g/cm3"
29800 INPUT ID
29850 IF ID>2 OR ID<1 THEN GOTO 29750
29900 ND$=NND$(ID)
29950 FD=FFD(ID)
30000 PRINT A3$
30050 PRINT"Choose from 1=MPa, 2=bar "
30100 INPUT IP
30150 IF IP>2 OR IP<1 THEN GOTO 30050
30200 NP$=NNP$(IP)
30250 FP=FFP(IP)
30600 RETURN
30650 *TTTT
30700 ON IT GOTO 30750, 30900
30750 TTT=T
30850 GOTO 31000
30900 TTT=T+273.15#
31000 RETURN
31050 *BLOCKDATA
31100 FOR I=1 TO 4:READ ATZ(I):NEXT I
31150 DATA 640#, 640#, 641.6#, 270#
31200 FOR I=1 TO 4:READ ADZ(I):NEXT I
31250 DATA 0.319#, 0.319#, 0.319#, 1.55#
31300 FOR I=1 TO 4:READ AAT(I):NEXT I
31350 DATA 2.0D+004, 2.0D+004, 4.0D+004, 25.0#
31400 FOR I=1 TO 4:READ AAD(I):NEXT I
31450 DATA 34.0#, 40.0#, 30.0#, 1.05D+003
31500 GASCON=-.461522# : TZ=647.073 : AA=1# : INC=36
31550 UREF=-4328.454977# : SREF=7.618072#
31600 ALPHA=11#:BETA=44.333333333333#:GAMMA=3.5#
31650 FOR I=1 TO 10:READ BP(I):NEXT I
31700 DATA 0.7478629#, -0.3540782#, 0.0#, 0.0#, 0.007159876#, 0.0#, -0.003528426#, 0.0#, 0.0#, 0.0#
31750 FOR I=1 TO 10:READ BQ(I):NEXT I
31800 DATA 1.1278334#, 0.0#, -0.5944001#, -5.010996#, 0.0#, 0.63684256#, 0.0#, 0.0#, 0.0#, 0.0#
31850 FOR I=1 TO 40:READ HGKG(I):NEXT I
31900 DATA -5.3062968529023D+002, 2.2744901424408D+003, 7.8779333020687D+002
31950 DATA -6.9830527374994D+001, 1.7863832875422D+004, -3.9514731563338D+004
32000 DATA 3.3803884280753D+004, -1.3855050202703D+004, -2.5637436613260D+005
32050 DATA 4.8212575981415D+005, -3.4183016969660D+005, 1.2223156417448D+005
32100 DATA 1.1797433655832D+006, -2.1734810110373D+006, 1.0829952168620D+006
32150 DATA -2.5441998064049D+005, -3.137774947767D+006, 5.2911910757704D+006
32200 DATA -1.3802577177877D+006, -2.5109914369001D+005, 4.6561826115608D+006
32250 DATA -7.2752773275387D+006, 4.1774246148294D+005, 1.4016358244614D+006
```

```
32300 DATA -3.1555231392127D+006, 4.7929666384584D+006, 4.0912664781209D+005
32350 DATA -1.3626369388386D+006, 6.9625220862664D+005, -1.0834900096447D+006
32400 DATA -2.2722827401688D+005, 3.8365486000660D+005, 6.8833257944332D+003
32450 DATA 2.1757245522644D+004, -2.6627944829770D+003, -7.0730418082074D+004
32500 DATA -0.225#, -1.68#, 0.055#, -93.0#
32550 FOR I=1 TO 40:READ II(I):NEXT I
32600 DATA 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4, 5, 5, 5, 5, 6, 6, 6, 6, 8, 8, 8, 8, 2, 2, 0, 4, 2, 2, 2, 4
32650 FOR I=1 TO 40:READ JJ(I):NEXT I
32700 DATA 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 2, 3, 5, 7, 1, 4, 4, 4, 0, 2, 0, 0
32750 FOR I=1 TO 8:READ A(I):NEXT I
32800 DATA -7.8889166#, 2.5514255#, -6.716169#, 33.239495#
32850 DATA -105.38479#, 174.35319#, -148.39348#, 48.631602#
32900 FOR I=1 TO 18:READ C(I):NEXT I
32950 DATA 1.9730271018D+001, 2.09662681977D+001, -4.83429455355D-001, 6.05743189245D+000
33000 DATA 2.256023885D+001, -9.87532442D+000, -4.3135538513D+000, 4.58155781D-001
33050 DATA -4.7754901883D-002, 4.1238460633D-003, -2.7929052852D-004
33100 DATA 1.4481695261D-005, -5.6473658748D-007, 1.6200446D-008, -3.303822796D-010
33150 DATA 4.51916067368D-012, -3.70734122708D-014, 1.37546068238D-016
33200 FOR I=1 TO 2:READ FFD(I):NEXT I
33250 DATA 1.0D-003, 1.0#
33300 FOR I=1 TO 2:READ FFP(I):NEXT I
33350 DATA 1.0#, 10.0#
33500 FOR I=1 TO 2:READ NNT$(I):NEXT I
33550 DATA "K", "deg C"
33600 FOR I=1 TO 2:READ NND$(I):NEXT I
33650 DATA "kg/m3", "g/cm3"
33700 FOR I=1 TO 2:READ NNP$(I):NEXT I
33750 DATA "MPa", "bar"
33900 A1$="TEMPERATURE":A2$="DENSITY":A3$="PRESSURE"
33950 RETURN
34000 *PARAMETERS
34050 REM B0, B1, C
34100 FOR I=1 TO 11 : READ BOKCL(I) : READ B1KCL(I) : READ CKCL(I) : NEXT I
34150 DATA -2.10289D-002, 2.20813D-001, 0.0#
34200 DATA 6.03967D-001, -4.61849#, 7.64891D-004
34250 DATA 3.67768D-003, -4.10116D-002, 0.0#
34300 DATA -7.05537D-006, 1.10445D-004, -1.12131D-008
34350 DATA 1.97968D-009, -4.73196D-008, 1.72256D-011
34400 DATA -2.47588D-003, -2.74120D-002, 0.0#
34450 DATA 1.44160D-001, 3.32883D-001, -5.71188D-003
34500 REM K1
34550 DATA -2931.268116#, 6353.355434#, 28.172180#
34600 REM fL(Tr, Pr)
34650 DATA 6.56838D-004, 9.67854D-004, -4.12364D-005
34700 REM K2
34750 DATA -33.953143#, 193.004059#, -0.125567#
34800 REM fG(Tr, Pr)
34850 DATA 5.0038D-002, 2.18752D-001, -3.94D-004
34900 REM B0L, B1L, CL
34950 FOR I=1 TO 9 : BOKLCL(I)=BOKCL(I) : B1LKCL(I)=B1KCL(I) : CLKCL(I)=CKCL(I) : NEXT I
35000 REM B0J, B1J, CJ
35050 FOR I=1 TO 7 : B0JKCL(I)=BOKCL(I) : B1JKCL(I)=B1KCL(I) : CJKCL(I)=CKCL(I) : NEXT I
35100 REM BV(KCl)
35150 FOR I=1 TO 15 : READ DBDP(I) : NEXT I
35200 DATA 0.0#, 0.0#, 9.45015D-008, -2.90741D-010, 3.26205D-003, 8.39662D-007, 0.0#, -4.41638D-009, 6.71235D-012
35250 DATA -4.42327D-005, -7.97437D-010, 0.0#, 4.12771D-012, -6.24996D-015, 4.16221D-008
35300 FOR I=1 TO 15 : READ VOKCL(I) : NEXT I
35350 DATA 1.56152D+003, -1.69234D+005, -4.29918#, 4.59233D-003, -3.25686D+004, -6.86887#
35400 DATA 7.35220D+002, 2.02245D-002, -2.15779D-005, 1.03212D+002, 5.34941D-003
```



```

35450 DATA -5.73121D-001, -1.57862D-005, 1.66987D-008, -7.22012D-002
35500 REM CP(KC1)
35550 FOR I=1 TO 7 : READ CPKCL(I) : NEXT I
35600 DATA 3.71110D+004, 0.0#, -7.90247D+003, 3.30367D+001, -1.76733D-002, -2.91950D+004, -5.92362D+006
35650 KCL=74.551# : TTR=298.15# : PR=179# : ATM=1.01325
35700 RVGAS=83.1441# : RGAS=8.31441# : MW=18.0152
35750 FOR I=1 TO 9: READ DU(I) : NEXT I
35800 DATA 3.4279D+002, -5.0866D-003, 9.4690D-007, -2.0525#, 3.1159D+003
35850 DATA -1.8289D+002, -8.0325D+003, 4.2142D+006, 2.1417#
35900 EE=4.803242D-010 : BC=1.380662D-016
35950 RETURN
36000 *DEBYEHUCKEL
36050 PRES=(PRES/FP)*(FFP(2)/FFP(1))
36150 DPDD=DPDD*(FFP(2)/FFP(1))
36200 DPDT=DPDT*(FFP(2)/FFP(1))
36350 EPS=DU(1)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T*T)
36400 E=1#+(PRES-1000)/(DU(7)+DU(8)/T+DU(9)*T+1000)
36450 E=LOG(E)
36500 EPS=EPS+(DU(4)+(DU(5)/(DU(6)+T)))*E
36550 APHI=SQR(2#*3.14159265#*6.022045D+023*D/1000)/3#
36600 APHI=APHI*EE*EE*EE/(BC*SQR(BC)*T*SQR(T)*EPS*SQR(EPS))
36650 DET=DU(7)+DU(8)/T+DU(9)*T+PRES
36700 DEPSDP=DU(4)+DU(5)/(DU(6)+T)
36750 DEPSDP=DEPSDP/DET
36800 DRHODPDD=1#/(D*DPDD)
36850 AV=2#*RVGAS*T*APHI*(3#*DEPSDP/EPS-DRHODPDD)
36900 ALPH=DPDT/(D*DPDD)
36950 DE=DU(7)+DU(8)/T+DU(9)*T
37000 DEPS=DU(1)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T*T)
37050 DEPS=DEPS-DU(5)*LOG(1#+(PRES-1000)/(DE+1000))/((DU(6)+T)*(DU(6)+T))
37100 DEPS=DEPS+(DU(4)+DU(5)/(DU(6)+T))*(1000-PRES)*(DU(9)-DU(8)/(T*T))/((DE+PRES)*(DE+1000))
37150 DEPS=DEPS/EPS
37200 AH=1#+T*DEPS+T*ALPH/3#
37250 AH=AH*(-6#)*APHI*RGAS*T
37300 D2EPS=DU(1)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*(DU(2)+2#*DU(3)*T)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T*T)
37350 D2EPS=D2EPS+2#*DU(1)*DU(3)*EXP(DU(2)*T+DU(3)*T*T)
37400 D2EPS=D2EPS+(2#*DU(5)/((DU(6)+T)*(DU(6)+T)*(DU(6)+T)))*LOG(1#+(PRES-1000)/(DE+1000))
37450 D2EPS=D2EPS-(2#*DU(5)/((DU(6)+T)*(DU(6)+T)))*(DU(9)-DU(8)/(T*T))*(1#/(DE+PRES)-1#/(DE+1000))
37500 D2EPS=D2EPS+(DU(4)+DU(5)/(DU(6)+T))*(2#*DU(8)/(T*T*T))*(1#/(DE+PRES)-1#/(DE+1000))
37550 D2EPSX=(DU(9)-DU(8)/(T*T))*(DU(9)-DU(8)/(T*T))*(1#/(DE+PRES)*(DE+PRES))-1#/(DE+1000)*(DE+1000))
37600 D2EPS=D2EPS-(DU(4)+DU(5)/(DU(6)+T))*D2EPSX
37650 D2EPS=D2EPS/EPS
37700 DWDDDT=DDDT/D
37750 DWD2DDT2=D2DDT2/D
37800 AJ=2#*DWD2DDT2-DWDDDT*DWD2DDT-2#*DWD2DDT/T-6#*D2EPS+15#*DEPS*DEPS+6#*DEPS/T
37850 AJ=AJ-6#*DWD2DDT*DEPS+3#/(T*T)
37900 AJ=AJ*APHI*RGAS*T*T
37950 RETURN
38000 *KCLAQ
38050 MI=MOL
38051 S=S*MW : H=H*MW : G=G*MW
38052 S=S+SREF*RGAS : H=H+UREF*RGAS : G=G+UREF*RGAS-T*SREF*RGAS
38060 CPW=CPD*RGAS
38400 TL=T-227#
38450 TH=647#-T
38500 HF=LOG(1#+1.2#*SQR(MI))/(2#*1.2#)
38550 BVKCL=DBDP(1)+DBDP(2)/T+DBDP(3)*T+DBDP(4)*T*T+DBDP(5)/TH
38600 BVKCL=BVKCL+(DBDP(6)+DBDP(7)/T+DBDP(8)*T+DBDP(9)*T*T+DBDP(10)/TH)*PRES
38650 BVKCL=BVKCL+(DBDP(11)+DBDP(12)/T+DBDP(13)*T+DBDP(14)*T*T+DBDP(15)/TH)*PRES*PRES

```

38700 VKCL=VOKCL (1)+VOKCL (2) /T+VOKCL (3)\*T+VOKCL (4)\*T+VOKCL (5) /TH  
38750 VKCL=VKCL+(VOKCL (6)+VOKCL (7) /T+VOKCL (8)\*T+VOKCL (9)\*T+VOKCL (10) /TH)\*PRES  
38800 VKCL=VKCL+(VOKCL (11)+VOKCL (12) /T+VOKCL (13)\*T+VOKCL (14)\*T+VOKCL (15) /TH)\*PRES\*PRES  
38850 VPHI=VKCL+2#\*AV\*HF+2#\*RVGAS\*T\*MOL\*BVKCL  
38900 VSOLN=VPHI\*MOL+(1000/D)  
38950 DSOLN=(1000+MOL\*KCL) /VSOLN  
39000 LPRINT  
39050 LPRINT USING"V (water)=+##. ### VKCl=+###. ##":MW/D, VKCL  
39100 LPRINT  
39150 REM 179bar  
39200 HKCLTRPR=(VOKCL (1)+2#\*VOKCL (2) /TTR-VOKCL (4) \*TTR\*TTR) \*(PR-ATM)  
39250 HKCLTRPR=HKCLTRPR+((647#-2#\*TTR)\*VOKCL (5) /((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR-ATM)  
39300 HKCLTRPR=HKCLTRPR+(VOKCL (6)+2#\*VOKCL (7) /TTR-VOKCL (9) \*TTR\*TTR) \*(PR\*PR-ATM\*ATM) /2#  
39350 HKCLTRPR=HKCLTRPR+((647#-2#\*TTR)\*VOKCL (10) /((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR\*PR-ATM\*ATM) /2#  
39400 HKCLTRPR=HKCLTRPR+(VOKCL (11)+2#\*VOKCL (12) /TTR-VOKCL (14) \*TTR\*TTR) \*(PR\*PR\*PR-ATM\*ATM\*ATM) /3#  
39450 HKCLTRPR=HKCLTRPR+((647#-2#\*TTR)\*VOKCL (15) /((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR\*PR\*PR-ATM\*ATM\*ATM) /3#  
39500 HKCLTRPR=HKCLTRPR/10  
39550 HKCLPR=HKCLTRPR+CPKCL (1) \*(T-TTR)+CPKCL (2) \*(LOG (T)-LOG (TTR))  
39600 HKCLPR=HKCLPR+CPKCL (3) \*(T\*LOG (T)-T-TTR\*LOG (TTR)+TTR)+CPKCL (4) \*(T\*T-TTR\*TTR) /2#  
39650 HKCLPR=HKCLPR+CPKCL (5) \*(T\*T\*T-TTR\*TTR\*TTR) /3#+CPKCL (6) \*(LOG (TL)-LOG (TTR-227#))  
39700 HKCLPR=HKCLPR+CPKCL (7) \*(1# /TH-1# / (647#-TTR))  
39750 DHDPP=(VOKCL (1)+2#\*VOKCL (2) /T-VOKCL (4) \*T+T\*(647#-2#\*T)\*VOKCL (5) / (TH\*TH)) \*(PRES-PR)  
39800 DHDPP=DHDPP+(VOKCL (6)+2#\*VOKCL (7) /T-VOKCL (9) \*T+T\*(647#-2#\*T)\*VOKCL (10) / (TH\*TH)) \*(PRES\*PRES-PR\*PR) /2#  
39850 DHDPP=DHDPP+(VOKCL (11)+2#\*VOKCL (12) /T) \*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR) /3#  
39900 DHDPP=DHDPP-(VOKCL (14) \*T+T\*(647#-2#\*T)\*VOKCL (15) / (TH\*TH)) \*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR) /3#  
39950 DHDPP=DHDPP/10  
40000 HKCL=HKCLPR+DHDPP  
40050 REM SKCl (298.15K, 0.1MPa)=157.9349 after Archer  
40150 DSOKCL=-((-1#)\*VOKCL (2) / (TTR\*TTR)+VOKCL (3)+2#\*VOKCL (4) \*TTR+VOKCL (5) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (ATM-1#)  
40200 DSOKCL=DSOKCL-((-1#)\*VOKCL (7) / (TTR\*TTR)+VOKCL (8)+2#\*VOKCL (9) \*TTR) \*(ATM\*ATM-1#\*1#) /2#  
40250 DSOKCL=DSOKCL-(VOKCL (10) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (ATM\*ATM-1#\*1#) /2#  
40300 DSOKCL=DSOKCL-((-1#)\*VOKCL (12) / (TTR\*TTR)+VOKCL (13)) \*(ATM\*ATM\*ATM-1#\*1#\*1#) /3#  
40350 DSOKCL=DSOKCL-(2#\*VOKCL (14) \*TTR) \*(ATM\*ATM\*ATM-1#\*1#\*1#) /3#  
40400 DSOKCL=DSOKCL-(VOKCL (15) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (ATM\*ATM\*ATM-1#\*1#\*1#) /3#  
40450 DSOKCL=DSOKCL/10  
40500 SOKCL=157.9349#+DSOKCL  
40550 DSKCLTRPR=-((-1#)\*VOKCL (2) / (TTR\*TTR)+VOKCL (3)+2#\*VOKCL (4) \*TTR+VOKCL (5) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR-ATM)  
40600 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR-((-1#)\*VOKCL (7) / (TTR\*TTR)+VOKCL (8)) \*(PR\*PR-ATM\*ATM) /2#  
40650 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR-(2#\*VOKCL (9) \*TTR+VOKCL (10) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR\*PR-ATM\*ATM) /2#  
40700 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR-((-1#)\*VOKCL (12) / (TTR\*TTR)+VOKCL (13)) \*(PR\*PR\*PR-ATM\*ATM\*ATM) /3#  
40750 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR-(2#\*VOKCL (14) \*TTR) \*(PR\*PR\*PR-ATM\*ATM\*ATM) /3#  
40800 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR-(VOKCL (15) / ((647#-TTR)\*(647#-TTR)))\* (PR\*PR\*PR-ATM\*ATM\*ATM) /3#  
40850 DSKCLTRPR=DSKCLTRPR/10  
40900 SKCLTRPR=SOKCL+DSKCLTRPR  
40950 SKCLPR=SKCLTRPR+CPKCL (1) \*LOG (T/TTR)-CPKCL (2) \*(1# /T-1# /TTR)  
41000 SKCLPR=SKCLPR+CPKCL (3) \*(LOG (T)\*LOG (T)-LOG (TTR)\*LOG (TTR)) /2#  
41050 SKCLPR=SKCLPR+CPKCL (4) \*(T-TTR)+CPKCL (5) \*(T\*T-TTR\*TTR) /2#-(CPKCL (6) /227#) \*(LOG (T\*(TTR-227#) / (TTR\*TL)))  
41100 SKCLPRX=LOG (T/TTR) +(1294#-T) /TH-LOG (TH) -(1294#-TTR) / (647#-TTR) +LOG (647#-TTR)  
41150 SKCLPR=SKCLPR+(CPKCL (7) / (647#\*647#)) \*SKCLPRX  
41200 DSKCL=-((-1#)\*VOKCL (2) / (T\*T)+VOKCL (3)+2#\*VOKCL (4) \*T+VOKCL (5) / (TH\*TH)) \*(PRES-PR)  
41250 DSKCL=DSKCL-((-1#)\*VOKCL (7) / (T\*T)+VOKCL (8)+2#\*VOKCL (9) \*T+VOKCL (10) / (TH\*TH)) \*(PRES\*PRES-PR\*PR) /2#  
41300 DSKCL=DSKCL-((-1#)\*VOKCL (12) / (T\*T)+VOKCL (13)) \*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR) /3#  
41350 DSKCL=DSKCL-(2#\*VOKCL (14) \*T+VOKCL (15) / (TH\*TH)) \*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR) /3#  
41400 DSKCL=DSKCL/10  
41450 SKCL=SKCLPR+DSKCL  
41500 GKCL=HKCL-T\*SKCL  
41550 CP0=CPKCL (1)+CPKCL (2) /T+CPKCL (3) \*LOG (T)+CPKCL (4) \*T+CPKCL (5) \*T+CPKCL (6) /TL+CPKCL (7) / (TH\*TH)  
41600 TD2VDT2=(2#\*VOKCL (2) / (T\*T)+2#\*VOKCL (4) \*T+2#\*VOKCL (5) \*T / (TH\*TH\*TH)) \*(PRES-PR)  
41650 TD2VDT2=TD2VDT2+(2#\*VOKCL (7) / (T\*T)+2#\*VOKCL (9) \*T+2#\*VOKCL (10) \*T / (TH\*TH\*TH)) \*(PRES\*PRES-PR\*PR) /2#

41700 TD2VDT2=TD2VDT2+(2#\*VOKCL(12)/(T\*T)+2#\*VOKCL(14)\*T)\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
41750 TD2VDT2=TD2VDT2+(2#\*VOKCL(15)\*T/(TH\*TH\*TH))\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
41800 TD2VDT2=TD2VDT2/10  
41850 CPK=CP0-TD2VDT2  
41950 LPRINT USING"G/RT= +###.#### GKCL/RT= +###.###":G/(RGAS\*T), GKCL/(RGAS\*T)  
42000 LPRINT USING"H/RT= +###.#### HKCL/RT= +###.###":H/(RGAS\*T), HKCL/(RGAS\*T)  
42050 LPRINT USING"S/R= +###.#### SKCL/R= +###.###":S/RGAS, SKCL/RGAS  
42100 LPRINT USING"Cp/R= +###.### CpKCL/R= +###.###":CPW/RGAS, CPK/RGAS  
42150 LPRINT  
42250 BMO=BOKCL(1)\*T\*T/6#+BOKCL(2)\*T/2#+BOKCL(3)\*T\*T\*(LOG(T)/2#-5#/12#)/3#  
42300 BMO=BMO+BOKCL(4)\*T\*T\*T/12#+BOKCL(5)\*T\*T\*T/20  
42350 BMO=BMO+BOKCL(6)\*(T/2#+3#\*227#\*227#/(2#\*T)+227#\*TL\*LOG(TL)/T)-BOKCL(7)\*(2#\*TH\*LOG(TH)/T+LOG(TH))  
42400 BMO=BMO-BOKCL(8)/T-BOKCL(9)\*TTR\*TTR/T+BOKCL(10)+BOKCL(11)  
42450 BM1=B1KCL(1)\*T\*T/6#+B1KCL(2)\*T/2#+B1KCL(3)\*T\*T\*(LOG(T)/2#-5#/12#)/3#  
42500 BM1=BM1+B1KCL(4)\*T\*T\*T/12#+B1KCL(5)\*T\*T\*T/20  
42550 BM1=BM1+B1KCL(6)\*(T/2#+3#\*227#\*227#/(2#\*T)+227#\*TL\*LOG(TL)/T)-B1KCL(7)\*(2#\*TH\*LOG(TH)/T+LOG(TH))  
42600 BM1=BM1-B1KCL(8)/T-B1KCL(9)\*TTR\*TTR/T+B1KCL(10)+B1KCL(11)  
42650 CM=CKCL(1)\*T\*T/6#+CKCL(2)\*T/2#+CKCL(3)\*T\*T\*(LOG(T)/2#-5#/12#)/3#+CKCL(4)\*T\*T\*T/12#+CKCL(5)\*T\*T\*T/20  
42700 CM=CM+CKCL(6)\*(T/2#+3#\*227#\*227#/(2#\*T)+227#\*TL\*LOG(TL)/T)-CKCL(7)\*(2#\*TH\*LOG(TH)/T+LOG(TH))  
42750 CM=CM-CKCL(8)/T-CKCL(9)\*TTR\*TTR/T+CKCL(10)+CKCL(11)  
42800 BOL=BOLKCL(1)\*T/3#+BOLKCL(2)/2#+BOLKCL(3)\*T\*(LOG(T)-1#/3#)/3#+BOLKCL(4)\*T\*T/4#+BOLKCL(5)\*T\*T\*T/5#  
42850 BOL=BOL+(BOLKCL(6)/(T\*T))\*(TL\*TL/2#+454#\*TL+227#\*227#\*LOG(TL))  
42900 BOL=BOL+(BOLKCL(7)/(T\*T))\*((-1#)\*TH+1294#\*LOG(TH)+647#\*647#/TH)  
42950 BOL=BOL+BOLKCL(8)/(T\*T)+BOLKCL(9)\*TTR\*TTR/(T\*T)  
43000 B1L=B1LKCL(1)\*T/3#+B1LKCL(2)/2#+B1LKCL(3)\*T\*(LOG(T)-1#/3#)/3#+B1LKCL(4)\*T\*T/4#+B1LKCL(5)\*T\*T\*T/5#  
43050 B1L=B1L+(B1LKCL(6)/(T\*T))\*(TL\*TL/2#+454#\*TL+227#\*227#\*LOG(TL))  
43100 B1L=B1L+(B1LKCL(7)/(T\*T))\*((-1#)\*TH+1294#\*LOG(TH)+647#\*647#/TH)  
43150 B1L=B1L+B1LKCL(8)/(T\*T)+B1LKCL(9)\*TTR\*TTR/(T\*T)  
43200 CL=CLKCL(1)\*T/3#+CLKCL(2)/2#+CLKCL(3)\*T\*(LOG(T)-1#/3#)/3#+CLKCL(4)\*T\*T/4#+CLKCL(5)\*T\*T\*T/5#  
43250 CL=CL+(CLKCL(6)/(T\*T))\*(TL\*TL/2#+454#\*TL+227#\*227#\*LOG(TL))  
43300 CL=CL+(CLKCL(7)/(T\*T))\*((-1#)\*TH+1294#\*LOG(TH)+647#\*647#/TH)  
43350 CL=CL+CLKCL(8)/(T\*T)+CLKCL(9)\*TTR\*TTR/(T\*T)  
43400 B0J=B0JKCL(1)+B0JKCL(2)/T+B0JKCL(3)\*LOG(T)+B0JKCL(4)\*T+B0JKCL(5)\*T\*T+B0JKCL(6)/TL+B0JKCL(7)/(TH\*TH)  
43450 B1J=B1JKCL(1)+B1JKCL(2)/T+B1JKCL(3)\*LOG(T)+B1JKCL(4)\*T+B1JKCL(5)\*T\*T+B1JKCL(6)/TL+B1JKCL(7)/(TH\*TH)  
43500 CJ=CJKCL(1)+CJKCL(2)/T+CJKCL(3)\*LOG(T)+CJKCL(4)\*T+CJKCL(5)\*T\*T+CJKCL(6)/TL+CJKCL(7)/(TH\*TH)  
43550 OSC=0  
43600 GM=0  
43700 EAI=EXP((-2#)\*SQR(MI))  
43850 GM1=1#-(1#+2#\*SQR(MI)-4#\*MI/2#)\*EAI  
44000 BL=BOL+2#\*B1L\*(1#-(1#+2#\*SQR(MI))\*EAI)/(4#\*MI)  
44150 BJ=B0J+B1J\*(2#/(4#\*MI))\*(1#-(1#+2#\*SQR(MI))\*EAI)  
44250 REM Pressure dependence  
44300 BITG=(DBDP(1)+DBDP(2)/T+DBDP(3)\*T+DBDP(4)\*T\*T+DBDP(5)/TH)\*(PRES-PR)  
44350 BITG=BITG+(DBDP(6)+DBDP(7)/T+DBDP(8)\*T+DBDP(9)\*T\*T+DBDP(10)/TH)\*(PRES\*PRES-PR\*PR)/2#  
44400 BITG=BITG+(DBDP(11)+DBDP(12)/T+DBDP(13)\*T+DBDP(14)\*T\*T+DBDP(15)/TH)\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
44600 BITGT=(-(1#)\*DBDP(2)/(T\*T)+DBDP(3)+2#\*DBDP(4)\*T+DBDP(5)/(TH\*TH))\*(PRES-PR)  
44650 BITGT=BITGT+((-1#)\*DBDP(7)/(T\*T)+DBDP(8)+2#\*DBDP(9)\*T+DBDP(10)/(TH\*TH))\*(PRES\*PRES-PR\*PR)/2#  
44700 BITGT=BITGT+((-1#)\*DBDP(12)/(T\*T)+DBDP(13)+2#\*DBDP(14)\*T+DBDP(15)/(TH\*TH))\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
44800 DBLDTITG=(2#\*DBDP(3)/T+6#\*DBDP(4)+1294#\*DBDP(5)/(T\*TH\*TH\*TH))\*(PRES-PR)  
44850 DBLDTITG=DBLDTITG+(2#\*DBDP(8)/T+6#\*DBDP(9)+1294#\*DBDP(10)/(T\*TH\*TH\*TH))\*(PRES\*PRES-PR\*PR)/2#  
44900 DBLDTITG=DBLDTITG+(2#\*DBDP(13)/T+6#\*DBDP(14))\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
44950 DBLDTITG=DBLDTITG+(1294#\*DBDP(15)/(T\*TH\*TH\*TH))\*(PRES\*PRES\*PRES-PR\*PR\*PR)/3#  
44960 OSC=1#-APHI\*SQR(MI)/(1#+1.2#\*SQR(MI))+MOL\*(BMO+BITG+BM1\*EAI)+2#\*MOL\*MOL\*CM  
44970 GM=(-(1#)\*API\*(SQR(MI)/(1#+1.2#\*SQR(MI))+4#\*HF)+2#\*MOL\*(BMO+BITG+(BM1/(4#\*MI))\*GM1)+3#\*MOL\*MOL\*CM  
44980 GM=EXP(GM)  
44990 PHIL=2#\*AH\*HF-2#\*MOL\*RGAS\*T\*(BL+BITGT+MOL\*CL)  
45000 PHICP=CPK+2#\*AJ\*HF-2#\*MOL\*RGAS\*T\*(BJ+DBLDTITG+MOL\*CJ)  
45050 CPX=PHICP-CPK  
45100 BM=BMO+2#\*BM1\*(1#-(1#+2#\*SQR(MI))\*EAI)/(4#\*MI)

```
45150 BM=BM+BITG
45200 GEX=(-8#)*APHI*HF*MI+2#*MOL*MOL*BM+2#*MOL*MOL*MOL*CM
45250 GEX=GEX*RGAS*T
45300 SX=(PHIL-GEX/MOL)/T
45350 SSPEC=S*(1000/MW)+MOL*(SKCL+SX)+2#*MOL*RGAS*(1#-LOG(MOL))
45400 SSPEC=SSPEC/(1000+MOL*KCL)
45450 HSPEC=H*(1000/MW)+MOL*(HKCL+PHIL)
45500 HSPEC=HSPEC/(1000+MOL*KCL)
45550 CPSPEC=CPW*(1000/MW)+MOL*PHICP
45600 CPSPEC=CPSPEC/(1000+MOL*KCL)
45650 LPRINT USING"m=#.##### Density(g/cm3)= +#.#####";MOL, DSOLN
45700 LPRINT USING" Osmotic coeff= +#.###";OSC
45750 LPRINT USING" Activity coeff= +#.###";GM
45800 LPRINT USING" phiL/RT= +##.###";PHIL/(RGAS*T)
45850 LPRINT USING" Ex entr/R= +##.###";SX/RGAS
45900 LPRINT USING" phiCp/R= +###.##";PHICP/RGAS
45950 LPRINT USING" Hspecific(J/g)= +#.#####^";HSPEC
46000 LPRINT USING" Sspecific(J/g K)= +#.###";SSPEC
46050 LPRINT USING" Cpspecific(J/g K)= +#.###";CPSPEC
46100 LPRINT
46150 RETURN
```

## 文献

- Ananthaswamy, J. and Atkinson, G. (1984) Thermodynamics of concentrated electrolyte mixtures. Pitzer–Debye–Hückel limiting slopes for water from 0 to 100 °C and from 1 atm to 1 kbar. *J. Chem. Eng. Data*, **29**, 81–87.
- Bradley, D. J. and Pitzer, K. S. (1979) Thermodynamics of electrolytes. 12. Dielectric properties of water and Debye–Hückel parameters to 350°C and 1kbar. *J. Phys. Chem.*, **83**, 1599–1603.
- Cohen, E. R. and Taylor, B. N. (1973) The 1973 least-squares adjustment of the fundamental constants. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **2**, 663–734.
- Haar, L. Gallagher, J. S., Kell, G. S. (1984) NBS/NRC Steam Tables. 320p., Hemisphere Publishing, New York.
- Pabalan, R. T. and Pabalan, K. S. (1988) Apparent molar heat capacity and other thermodynamic properties of aqueous KCl solutions to high temperatures and pressures. *J. Chem. Eng. Data*, **33**, 354–362.
- 澁江靖弘 (2005) 水の熱力学的性質を計算するプログラム–Haar et al. (1984)の式を用いて–. 兵庫教育大学研究紀要, **27**, 143–154.
- 澁江靖弘 (2008a) 325°C, 500bar, 濃度 6 mol/kg までの塩化カリウム水溶液の熱力学的性質を計算するプログラム–Pabalan–Pitzer 式を用いて–. 兵庫教育大学研究紀要, **32**, 67–79.
- 澁江靖弘 (2008b) 塩化マグネシウム水溶液と塩化カルシウム水溶液の熱力学的性質の計算プログラム (その1) –Holmes達の式を用いて–. 兵庫教育大学研究紀要, **33**, 113–126.