

## 浸透係数から飽和水蒸気圧を求める計算プログラム

本サイト(<http://www.hyogo-u.ac.jp/sci/yshibue/solution.html>)内の文書「飽和水蒸気圧条件における電解質水溶液の浸透係数, 熱容量, 蒸発熱」の中で次の関係式を示した。

$$\phi = -\left(\frac{m_w}{vmRT}\right) \left[ G(p) - G(p^\circ) + (p^\circ - p)\bar{V}_w(l) \right] \quad (1)$$

記号 $\phi$ は浸透係数,  $m_w$ は水 1 kg 中に含まれている水の物質質量 (モル),  $v$ は 1 モルの電解質から生じるイオンの物質質量 (モル),  $m$  は電解質の質量モル濃度,  $R$  は気体定数,  $T$  は絶対温度で表した温度,  $G(p)$ は圧力  $p$  (温度は  $T$ ) における水のギブスエネルギー,  $G(p^\circ)$ は圧力  $p^\circ$  (温度は  $T$ ) における水のギブスエネルギー,  $\bar{V}_w(l)$ は気液二相共存条件での液相中の水の部分モル体積を表す。そして, 圧力  $p^\circ$ は純水の飽和蒸気圧,  $p$  は水溶液の飽和水蒸気圧を表す。液相中の水の部分モル体積は同温度で気液二相が共存する純水の液相中での体積で近似する。式(1)で示した関係式に基づいて澁江(2010, p. 107–p.109)は浸透係数から飽和水蒸気圧を計算するプログラムを示した。この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。

式(1)の右辺を移項して得られる式の値をプログラム中では **OBJF** と表している。温度, 質量モル濃度, 浸透係数を指定し, 温度から求められる純水の飽和蒸気圧を用いて **OBJF** が 0 になるような  $p$  の値を求めることができれば, 浸透係数から飽和水蒸気圧を求めることができたことになる。本プログラムでは, **OBJF** の絶対値が  $10^{-4}$  未満であれば計算を終了している。実際の計算では二分法 (例えば, 伊理, 1981) を用いている。

まず, 水溶液の飽和水蒸気圧を  $0.9p^\circ$  と近似する。この近似値を上付き文字(1)を付けて  $p^{(1)}$  と表す。 $p$  が  $p^\circ$  と  $p^{(1)}$  の間にある場合には **OBJF** は負の値になる。**OBJF** が正の値であれば,  $p$  は  $p^{(1)}$  よりも小さい。**OBJF** が正になる時は  $p^{(1)}$  から  $0.1p^\circ$  を引いた値を新しい近似値とする。そして, **OBJF** の値が負になる  $p^{(2)}$  を探す。ただし, **OBJF** の値が正であっても, その絶対値が  $10^{-4}$  未満である時には, この時の近似値を水溶液の飽和水蒸気圧とする。**OBJF** が負になる時は新しい近似値  $p^{(2)}$  を  $p^\circ$  と  $p^{(1)}$  (**OBJF** が以前の近似で正になっていた時には, 正になっていた時の最後の  $p^{(1)}$  の値) の平均値とする。このようにして逐次近似を繰り返して **OBJF** の絶対値が  $10^{-4}$  未満になった時の値から水溶液の飽和水蒸気圧を求める。

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を中心にして解説する。その後で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。なお, 計算プログラムとして示したのものには, 浸透係数や飽和水蒸気圧とは無関係の値を計算している箇所が含まれている。Haar–Gallagher–Kell 式の計算プログラムの大部分をそのまま使用したためである。削除可能な部分が多いが, そのままにしている。

本計算プログラムでは純水の性質を Haar et al. (1984)を用いて計算している。Haar et al. (1984)の式については本サイト内の文書「純水のヘルムホルツエネルギーを与える Haar–Gallagher–Kell の式」で解説しているので, ここでは省略する。この計算プログラムでは  $RT$  の値を水のモル質量で割った値を「 $RT$ 」と名付けている。そこで, 本計算プログラムでは,  $RT$  の値に水のモル質量 (プログラム中の変数 FFH(3)) を掛けて **OBJF** の値を計算している。なお, 本サイト内で, Haar–Gallagher–Kell 式(HGK 式)を用いて飽和蒸気圧条件下での純水の熱力学的性質を計算するプログラムもテキスト形式にして示している。このプログラムは, 温度を入力して飽和蒸気圧などの熱力学的性質を計算するものであり, Haar et al. (1984)が示した FORTRAN のコードに手を加えたものである (澁江, 2005; 澁江, 2008, p. 114–115)。

### 1. サブルーチンにおける計算

プログラム中に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箇条書きで示す。計算で使用するサブルーチンの名前を\*の後に記し、後掲している program list 中で行番号順に示していく。

- \*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絶対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, DPDT R 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, DPDT R 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, DPDT R として圧力の温度微分値, SR としてエントロピー, 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。
- \*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) と圧力を入力値 (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) を使い、DPDX の最小値を 0.1 にしている。
- \*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トロピーの値が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  $2.84217 \cdot 10^{-5} \text{ J g}^{-1}$  でありエントロピーの値は  $-3.77677 \cdot 10^{-6} \text{ J g}^{-1} \text{ K}^{-1}$  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。

\*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した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。

\*CORRTPDLVDVDELG 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 DFINDDOUTTPDTDPD を用いて液相の密度 (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 DFINDDOUTTPDTDPD 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 PCORRTPDLVDV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。

\*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、もう一桁小さくとる必要がある。

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。

\*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。FFH(3) は Haar et al. (1984) が用いた水のモル質量である。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  $k_i$ 、JJ(I) は  $l_i$  に 1 を加えた値あるいは  $l_i$  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。

## 2. 入力と出力

浸透係数から飽和水蒸気圧を計算するプログラムを用いる場合の入力例を表 1 に示す。表中には矢印を付けて入力例の説明を加えている。計算のために必要な入力値は、温度（摂氏温度）、1 モルの電解質から生じるイオンの物質質量（モル）でプログラムでは Nu value (v) として入力を求めている値、電解質の質量モル濃度、および浸透係数である。表 1 で示した入力例に対する出力を表 2 に示す。出力にも矢印を付けて説明を加えている。また、欄外に説明を記しているものもある。出力を見ると、純水の飽和蒸気圧と水溶液の飽和水蒸気圧の値を 7 桁で示しているが、計算プログラムの精度を示すために多めに桁数を取って結果を示しているだけである。純水に関する値の有効桁数は 5 桁であり、純水の密度やモル体積やギブスエネルギーに関しても有効桁数は 5 桁である (Haar et al., 1984)。水溶液に関する値の有効桁数は浸透係数の不確かさに依存するが純水に比べて桁数が増えることはない。

本計算プログラムで使用する気体定数の値は、Haar et al. (1984) が用いた値と同じである。本サイト内で示した他の電解質水溶液では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ので、本計算プログラムでも同じようにしている。

表 1 浸透係数, 温度, 質量モル濃度の入力値から飽和水蒸気圧を計算するプログラムへの入力例

---

Input temperature(deg C). If you want to end, input a negative value? 200←温度を 200°C と入力

How many moles of ions are produced after the dissociation of one mole electrolyte (Nu value)? 3← $\nu = 3$   
と入力

Molality of solution? 1←質量モル濃度を  $1 \text{ mol kg}^{-1}$  と入力

Osmotic coefficient? 0.80350←浸透係数を 0.80350 と入力

This program continues the calculation at the same temperature.

If you change the temperature or the nu value, input Y(or y).

Dou you want to change the temperature or the nu value? y←温度あるいは  $\nu$  の値を変えると入力

Input temperature(deg C). If you want to end, input a negative value? 250←温度を 250°C と入力

How many moles of ions are produced after the dissociation of one mole electrolyte (Nu value)? 3← $\nu = 3$   
と入力

Molality of solution? 1←質量モル濃度を  $1 \text{ mol kg}^{-1}$  と入力

Osmotic coefficient? 0.67515←浸透係数を 0.67515 と入力

This program continues the calculation at the same temperature.

If you change the temperature or the nu value, input Y(or y).

Dou you want to change the temperature or the nu value? y←温度あるいは  $\nu$  の値を変えると入力

Input temperature(deg C). If you want to end, input a negative value? -1←負の値を入力して終了

---

表 2 表 1 で示した入力値に対する出力結果

---

Units

TEMPERATURE deg C ← 温度の単位は摂氏温度

DENSITY g/cm<sup>3</sup> ← 密度の単位は g cm<sup>-3</sup>

PRESSURE bar ← 圧力の単位は bar

ENERGY J/g ← エネルギーの単位は J g<sup>-1</sup>

**\*\*Pure water\*\*** Liquid phase

T= 200.0000 P=+1.553650D+001 D=0.864743 ← 200°C における純水の飽和蒸気圧(P)と  
液相の密度(D)

Molar volume(cm<sup>3</sup>/mol)=+20.83300 ← 液相のモル体積(cm<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>)

**\*\*Pure water\*\*** Vapor phase

T= 200.0000 P=+1.553650D+001 D=7.854207D-003 ← 200°C における純水の飽和蒸気圧(P)と  
気相の密度(D)

Molar volume(cm<sup>3</sup>/mol)=+2.293701D+003 ← 気相のモル体積(cm<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>)

T(deg C)=+200.00000 molality=+1.00000 Osmotic coefficient=+0.803500 Nu=+3 ←

Pvap-sat(pure water)=1.553650D+001 Pvap-sat(solution)=+1.480500D+001 | 欄外で説明

G=-2.59986D+002 Gwater=-2.50419D+002 ←

**\*\*Pure water\*\*** Liquid phase

T= 250.0000 P=+3.973649D+001 D=0.799072 ← 250°C における純水の飽和蒸気圧(P)と  
液相の密度(D)

Molar volume(cm<sup>3</sup>/mol)=+22.54515 ← 液相のモル体積(cm<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>)

**\*\*Pure water\*\*** Vapor phase

T= 250.0000 P=+3.973649D+001 D=1.995587D-002 ← 250°C における純水の飽和蒸気圧(P)と  
気相の密度(D)

Molar volume(cm<sup>3</sup>/mol)=+9.027521D+002 ← 気相のモル体積(cm<sup>3</sup> mol<sup>-1</sup>)

T(deg C)=+250.00000 molality=+1.00000 Osmotic coefficient=+0.675150 Nu=+3 ←

Pvap-sat(pure water)=3.973649D+001 Pvap-sat(solution)=+3.798541D+001 | 欄外で説明

G=-3.84680D+002 Gwater=-3.75651D+002 ←

---

T(deg C)は入力した温度 (摂氏温度), molality は入力した質量モル濃度, Osmotic coefficient は入力した浸透係数の値, Pvap-sat(pure water)は入力した温度における純水の飽和蒸気圧(bar), Pvap-sat(solution)は計算で求められた水溶液の飽和水蒸気圧(bar), G は浸透係数から求められた水溶液中の水のギブスエネルギー, Gwater は飽和蒸気圧条件下での純水のギブスエネルギー

### 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)
AI	$A_{\text{ideal gas}}/RT$ (HGK 式)
ALPHA	$\alpha$ (HGK 式)
AR	$A_{\text{residual}}/RT$ (HGK 式)
ATT	$\beta_i$ (HGK 式)
ATZ(I)	$T_i$ (HGK 式)
B1	$b$ (HGK 式)
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)
BETA	$\beta$ (HGK 式)
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)
C(I)	$C_i$ (HGK 式)
COEF	$m_w/vmRT$
CPD	$C_p/R$ (HGK 式)
CPI	$C_{V\text{ideal gas}}$ の計算式で用いる変数 (HGK 式)
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
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)
DADT	$\left(\frac{\partial A_{\text{residual}}}{\partial T}\right)_\rho$ (HGK 式)
DD	密度の入力値あるいは計算値 (HGK 式)
DDZ	$\rho_i$ (HGK 式)
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)
DEX	$\delta_i^{l_i}\exp(-\alpha_i\delta_i^{k_i})$ (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)
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	密度の推定値から計算した圧力と飽和水蒸気圧の計算値との違い (HGK 式)
(line 21450)	
DP	飽和水蒸気圧の近似値に対する補正項 (HGK 式)
(line 26150)	
DPD	$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T$ (HGK 式)
DPDD	$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T$ (HGK 式)

---



---

DPDT	$(\text{HGK 式}) \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho$
DPDTB	$\frac{1}{\rho RT} \left( \frac{\partial p_{\text{base}}}{\partial T} \right)_\rho$ (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)
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)
DWATERLIQ	気液二相平衡条件にある純水の液相中での密度
DWATERVAP	気液二相平衡条件にある純水の気相中での密度
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	$e^{-\rho}$ (HGK 式)
EX1	$-\alpha_i \delta_i^{k_i}$ (HGK 式)
EX2	$-\beta_i \tau_i^2$ (HGK 式)
FCT	$\frac{(l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i - 1}) \delta_i^{l_i}}{\rho_i} \rho^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (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)
FFH(I)	エネルギーの単位を換算するための係数。計算は $\text{J g}^{-1}$ 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 $\text{MPa}$ を単位にして行っている。(HGK 式)
FH	エネルギーの単位を換算するための係数。計算は $\text{J g}^{-1}$ 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。計算は $\text{MPa}$ を単位にして行っている。(HGK 式)
G	水溶液の飽和蒸気圧条件での水のギブスエネルギー (HGK 式)
GAMMA	$\gamma$ (HGK 式)
GASCON	$R$ (HGK 式)
GD	$G/RT$ (HGK 式)
GI	$A_{\text{ideal gas}}$ を計算するための式で用いる変数 (HGK 式)

---

---

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)
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)
GWATER	純水の飽和蒸気圧条件での水のギブスエネルギー (HGK 式)
HD	$H/RT$ (HGK 式)
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)
ID	密度の単位を選択するための変数 (HGK 式)
IH	エネルギーの単位を選択するための変数 (HGK 式)
II(I)	$k_i - 1$ ( $i = 1 \cdots 36$ )あるいは $k_i$ ( $i = 37 \cdots 40$ ) (HGK 式)
INC	36 (HGK 式)
IP	圧力の単位を選択するための変数 (HGK 式)
IT	温度の単位を選択するための変数 (HGK 式)
JJ(I)	$l_i + 1$ ( $i = 1 \cdots 36$ )あるいは $l_i$ ( $i = 37 \cdots 40$ ) (HGK 式)
K	$k_i$ (HGK 式)
KM	$l_i$ (HGK 式)
L	$l_i + 1$ (HGK 式)
MOL	質量モル濃度
NU	1 モルの電解質が完全に電離した時に生じるイオンの物質質量 (モル)
OBJF	浸透係数の入力値と飽和水蒸気圧の推定値から求められる浸透係数の計算値との違いを表す変数
OBJFUPPER	浸透係数の入力値と飽和水蒸気圧の推定値から求められる浸透係数の計算値との違いの上限で、浸透係数の入力値に等しく取った値
P	純水の飽和蒸気圧 (HGK 式)
PHI	浸透係数
PINPUT	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	圧力を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)
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	$T \sum_{i=37}^{40} \frac{g_i (2\beta_i - 4\beta_i^2 \tau_i^2) \delta_i^{l_i} \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)}{T_i^2}$ (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 17450)	$\rho^2 e^{-\rho}$ (HGK 式)
Q10 (line 19650)	$\delta_i^{l_i} \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2)$ (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 18200)	$g_i \rho^2 e^{-\rho} (1 - e^{-\rho})^{k_i-1} \left(\frac{T_0}{T}\right)^{l_i}$ (HGK 式)
QP(line 19900)	$\sum_{i=37}^{40} \left[ \frac{g_i}{\rho_i} (l_i \delta_i^{-1} - \alpha_i k_i \delta_i^{k_i-1}) \delta_i^{l_i} \rho^2 \exp(-\alpha_i \delta_i^{k_i} - \beta_i \tau_i^2) \right]$ (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)
RT	$RT$ (HGK 式)
SB	$S_{\text{base}}/R$ (HGK 式)
SD	$S/R$ (HGK 式)
SI	$S_{\text{ideal gas}}/R$ (HGK 式)
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。
T	絶対温度で表示した温度 (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)
TEX	$\exp(-\beta_i \tau_i^2)$ (HGK 式)
TIDEAL	$T/100$ (HGK 式)
TL	$\log(T/100)$ (HGK 式)
TR	$T/647.25$
TT	温度の入力値 (HGK 式)
TTT	絶対温度で表示した入力温度 (HGK 式)
TX	$T_i$ (HGK 式)
TZ	647.073 K (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。
VAPPRES	純水の飽和蒸気圧
VWATERLIQ	液相中での水の部分モル体積 (純水のモル体積で近似)
W	$\left 1 - \frac{T}{647.25}\right $ (HGK 式)
X	水溶液の飽和水蒸気圧の推定値
XINPUT	純水の飽和蒸気圧
XLOWER	水溶液の飽和水蒸気圧の下限
XP	密度の近似値に対する補正項
XUPPER	水溶液の飽和水蒸気圧の上限
XX	$1 - y$ (HGK 式)
Y	$bp/4$ (HGK 式)
Z (line 16350)	$p_{\text{base}}/\rho RT$ (HGK 式)
Z (line 22250)	$p/\rho RT$ (HGK 式)
Z0	$\frac{1 + \alpha y + \beta y^2}{(1 - y)^3}$ (HGK 式)

---

## 4. Program list

```
10000 REM Vapor pressure from osmotic coefficient
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), FFH(5), NNT$(2), NND$(2), NNP$(5), NNH$(5)
10350 GOSUB *BLOCKDATA
10400 IT=2 : NT$=NNT$(IT)
10450 ID=2 : ND$=NND$(ID) : FD=FFD(ID)
10500 IP=2 : NP$=NNP$(IP) : FP=FFP(IP)
10550 IH=2 : NH$=NNH$(IH) : FH=FFH(IH)
10600 LPRINT"Units"
10650 LPRINT A1$;SPC(3);NT$
10700 LPRINT A2$;SPC(3);ND$
10750 LPRINT A3$;SPC(3);NP$
10800 LPRINT A4$;SPC(3);NH$
10850 INPUT"Input temperature(deg C). If you want to end, input a negative value";TT
10900 T=TT+273.15# : TTT=T
10950 IF T>647.126# THEN PRINT "Input temperature>critical temperature.":GOTO 10850
11000 IF TT<0 THEN GOTO 15000
11050 INPUT"How many moles of ions are produced after the dissociation of one mole electrolyte (Nu value)";NU
11100 INPUT"molality of solution";MOL
11110 IF MOL=<0 THEN GOTO 11100
11150 INPUT"Osmotic coefficient";PHI
11200 RT=GASCON*T
11250 GOSUB *BBT
11300 DLL=0:DVV=0:DLIQ=0:DVAP=0
11350 GOSUB *PCORRTPDLDV
11400 PPP=P
11450 D=DL
11500 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
11550 D=DOUT
11600 GOSUB *THERMDT
11650 DD=DOUT/FD
11700 G=GD*RT*FH
11750 PRES=PPP*FP
11800 LPRINT
11850 LPRINT"**Pure water** Liquid phase"
11900 LPRINT USING"T=####.#### P=+#.##### D=#.#####";TT, PRES, DD
11950 LPRINT USING"Molar volume(cm^3/mol)=+#.#####";FFH(3)/DD
12000 VAPPRES=PRES
12050 DWATERLIQ=DD
12100 GWATER=G
12150 D=DV
12200 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
12250 D=DOUT
12300 GOSUB *THERMDT
12350 DD=DOUT/FD
12400 G=GD*RT*FH
12450 LPRINT"**Pure water** Vapor phase"
12500 LPRINT USING"T=####.#### P=+#.##### D=#.#####";TT, PRES, DD
12550 LPRINT USING"Molar volume(cm^3/mol)=+#.#####";FFH(3)/DD
12600 LPRINT
12650 DWATERVAP=DD
12700 VWATERLIQ=FFH(3)/DWATERLIQ
12750 COEF=(1000/FFH(3))/((FFH(3)*RT)*(NU*MOL))
```

```
12800 OBJFUPPER=PHI
12850 X=VAPPRES
12900 XINPUT=X
12950 XUPPER=X
13000 X=X-.1#*XINPUT
13050 XLOWER=X
13100 PRES=X
13150 PINPUT=PRES/FP
13200 DGSS=DWATERVAP
13250 D=DGSS : PPP=PINPUT
13300 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
13350 D=DOUT
13400 GOSUB *THERMDT
13450 G=GD*RT*FH
13500 OBJF=PHI+COEF*(VWATERLIQ*(XINPUT-X)/10+FFH(3)*(G-GWATER))
13550 IF ABS(OBJF)<.0001 THEN GOTO 14450
13600 IF OBJF<0 THEN GOTO 13700
13650 IF OBJF>0 THEN GOTO 12950
13700 X=(XUPPER+XLOWER)/2#
13750 PRES=X
13800 PINPUT=PRES/FP
13850 DGSS=DWATERVAP
13900 D=DGSS : PPP=PINPUT
13950 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
14000 D=DOUT
14050 GOSUB *THERMDT
14100 G=GD*RT*FH
14150 OBJF=PHI+COEF*(VWATERLIQ*(XINPUT-X)/10+FFH(3)*(G-GWATER))
14200 IF ABS(OBJF)<.0001 THEN GOTO 14450
14250 IF ABS(XUPPER-XLOWER)<1D-010 THEN PRINT "Error" : STOP
14300 IF OBJF<0 THEN XLOWER=X
14350 IF OBJF>0 THEN XUPPER=X
14400 GOTO 13700
14450 LPRINT USING"T(deg C)=+####.##### molality=+#.##### Osmotic coefficient=+#.##### Nu=+#
";TT,MOL,PHI,NU
14500 LPRINT USING"Pvap-sat(pure water)=+#.#####^~~~~ Pvp-sat(solution)=+#.#####^~~~~";XINPUT,PRES
14550 LPRINT USING"G=+#.#####^~~~~ Gwater=+#.#####^~~~~";G,GWATER
14600 PRINT"This program continues the calculation at the same temperature."
14650 PRINT"If you change the temperature or the nu value, input Y(or y)."
14700 INPUT"Do you want to change the temperature or the nu value";CAL$
14750 IF CAL$="Y" OR CAL$="y" THEN PRINT : GOTO 10850
14800 INPUT"Molality of solution";MOL
14850 INPUT"Osmotic coefficient";PHI
14900 PRINT
14950 GOTO 12750
15000 END
15050 *BBT
15100 BV(1)=1#
15150 FOR I=2 TO 10
15200 BV(I)=BV(I-1)*TZ/T
15250 NEXT I
15300 B1=BP(1)+BP(2)*LOG(1#/BV(2))
15350 B2=BQ(1)
15400 B1T=BP(2)*BV(2)/TZ
15450 B2T=0
15500 B1TT=0
15550 B2TT=0
15600 FOR I=3 TO 10
15650 B1=B1+BP(I)*BV(I-1)
```

```

15700 B2=B2+BQ(I)*BV(I-1)
15750 B1T=B1T-CDBL((I-2))*BP(I)*BV(I-1)/T
15800 B2T=B2T-CDBL((I-2))*BQ(I)*BV(I-1)/T
15850 B1TT=B1TT+BP(I)*CDBL((I-2))*CDBL((I-2))*BV(I-1)/(T*T)
15900 B2TT=B2TT+BQ(I)*CDBL((I-2))*CDBL((I-2))*BV(I-1)/(T*T)
15950 NEXT I
16000 B1TT=B1TT-B1T/T
16050 B2TT=B2TT-B2T/T
16100 RETURN
16150 *BASEDT
16200 Y=.25#*B1*D
16250 XX=1#-Y
16300 Z0=(1#+ALPHA*Y+BETA*Y*Y)/(XX*XX*XX)
16350 Z=Z0+4#*Y*(B2/B1-GAMMA)
16400 DZ0=(ALPHA+2#*BETA*Y)/(XX*XX*XX)+3#*(1#+ALPHA*Y+BETA*Y*Y)/(XX*XX*XX*XX)
16450 DZB=DZ0+4#*(B2/B1-GAMMA)
16500 AB=(-1#)*LOG(XX)-(BETA-1#)/XX+28.16666667#/(XX*XX)+4#*Y*(B2/B1-GAMMA)+15.16666667#+LOG(D*RT/.101325)
16600 BASEF=Z
16650 BB2TT=T*T*B2TT
16700 UB=(-1#)*T*B1T*(Z-1#-D*B2)/B1-D*T*B2T
16800
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
16850 DPDTB=BASEF/T+BASEF*D/Z*(DZB*B1T/4#+B2T-B2/B1*B1T)
16900 SB=UB-AB
16950 RETURN
17000 *QQTD
17050 QR(1)=0
17100 Q5=0
17150 Q=0
17200 AR=0
17250 DADT=0
17300 CVR=0
17350 DPDTR=0
17400 E=EXP((-1#)*AA*D)
17450 Q10=D*D*E
17500 Q20=1#-E
17550 QR(2)=Q10
17600 QV=TZ/T
17650 QT(1)=T/TZ
17700 FOR I=2 TO 10
17750 QR(I+1)=QR(I)*Q20
17800 QT(I)=QT(I-1)*QV
17850 NEXT I
17900 FOR I=1 TO INC
17950 K=II(I)+1
18000 L=JJ(I)
18050 QK=CDBL(K) : QL=CDBL(L)
18150 QZR(K-1)=QR(K+1) : QZT(L)=QT(L+1) : QZR(K)=QR(K+2) : QZT(L+1)=QT(L+2)
18200 QP=HGKG(I)*AA*QZR(K-1)*QZT(L)
18250 Q=Q+QP
18300 Q5=Q5+AA*(2#/D-AA*(1#-E*(QK-1#)/Q20))*QP
18350 AR=AR+HGKG(I)*QZR(K)*QZT(L)/(Q10*QK*RT)
18400 DFDT=Q20^QK*(1#-QL)*QZT(L+1)/(TZ*QK)
18450 D2F=QL*DFDT
18500 DPT=DFDT*Q10*AA*QK/Q20
18550 DADT=DADT+HGKG(I)*DFDT
18600 DPDTR=DPDTR+HGKG(I)*DPT
18650 CVR=CVR+HGKG(I)*D2F/GASCON
18700 NEXT I

```

```
18750 QP=0
18800 Q2A=0
18850 FOR J=37 TO 40
18900 IF HGKG(J)=0 THEN GOTO 20150
18950 K=I(J)
19000 KM=J(J)
19050 QK=CDBL(K) : QKM=CDBL(KM)
19100 DDZ=ADZ(J-36)
19150 DEL=D/DDZ-1#
19200 IF ABS(DEL)<1D-010 THEN DEL=1D-010
19300 EX1=(-1#)*AAD(J-36)*DEL^QK
19350 DEX=EXP(EX1)*DEL^QKM
19400 ATT=AAT(J-36)
19450 TX=ATZ(J-36)
19500 TAU=T/TX-1#
19550 EX2=(-1#)*ATT*TAU*TAU
19600 TEX=EXP(EX2)
19650 Q10=DEX*TEX
19700 QM=QKM/DEL-QK*AAD(J-36)*DEL^(QK-1#)
19750 FCT=QM*D*D*Q10/DDZ
19800 Q5T=FCT*(2#/D+QM/DDZ)-(D/DDZ)*(D/DDZ)*Q10*(QKM/(DEL*DEL)+QK*(QK-1#)*AAD(J-36)*DEL^(QK-2#))
19850 Q5=Q5+Q5T*HGKG(J)
19900 QP=QP+HGKG(J)*FCT
19950 DADT=DADT-2#*HGKG(J)*ATT*TAU*Q10/TX
20000 DPDTR=DPDTR-2#*HGKG(J)*ATT*TAU*FCT/TX
20050 Q2A=Q2A+T*HGKG(J)*(4#*ATT*EX2+2#*ATT)*Q10/(TX*TX)
20100 AR=AR+Q10*HGKG(J)/RT
20150 NEXT J
20200 SR=(-1#)*DADT/GASCON
20250 UR=AR+SR
20300 CVR=CVR+Q2A/GASCON
20350 Q=Q+QP
20400 RETURN
20450 *DFINDDOUTPDTDPD
20500 DD=D
20650 LL=0
20700 LL=LL+1
20750 IF DD=<0 THEN DD=1D-008
20800 IF DD>1.9# THEN DD=1.9#
20850 D=DD
20900 GOSUB *QQTD
20950 Q0=Q
21000 GOSUB *BASEDT
21050 PP=RT*DD*BASEF+Q0
21100 DPD=RT*(Z+Y*DZB)+Q5:DQ=DPD
21150 IF DPD>0 THEN GOTO 21350
21200 IF D>=.2967# THEN DD=DD*1.02
21250 IF D<.2967# THEN DD=DD*.98#
21300 IF LL<10 GOTO 20700
21350 DPDX=DPD*1.1#
21400 IF DPDX<.1# THEN DPDX=.1#
21450 DP=ABS(1#-PP/PPP)
21500 IF DP<1D-009 THEN GOTO 21900
21550 IF D>.3# AND DP<1D-008 THEN GOTO 21900
21600 IF D>.7# AND DP<1D-007 THEN GOTO 21900
21650 XP=(PPP-PP)/DPDX
21700 IF ABS(XP)>.1# THEN XP=XP*.1#/ABS(XP)
21750 DD=DD+XP
21800 IF DD=<0 THEN DD=1D-008
```



```
21850 IF LL=<30 THEN GOTO 20700
21900 DOUT=DD
21950 RETURN
22000 *THERMDT
22050 GOSUB *IDEALT
22100 GOSUB *BASEDT
22150 GOSUB *QQT D
22200 QPQ=Q:QDPQ=Q5
22250 Z=BASEF+QPQ/(RT*D)
22300 DPDD=RT*(BASEF+Y*DZB)+QDPQ
22350 AD=AB+AR+AI-UREF/T+SREF
22400 GD=AD+Z
22450 UD=UB+UR+UI-UREF/T
22500 DPDT=RT*D*DPDTB+DPDTR
22550 CVDX=CVB+CVR+CVIX
22600 CPD=CVDX+T*DPDT*DPDT/(D*D*DPDD*GASCON)
22650 HD=UD+Z
22700 SD=SB+SR+SI-SREF
22750 RETURN
22800 *PST
22850 IF T>314# THEN GOTO 23050
22900 PL=6.3573118#-8858.843#/T+607.56335*T^(-.6#)
22950 PS=.1#*EXP(PL)
23000 RETURN
23050 TR=T/647.25#
23100 W=ABS(1#-TR)
23150 BPST=0
23200 FOR I=1 TO 8
23250 ZPST=CDBL(I)
23300 BPST=BPST+A(I)*W^((ZPST+1#)/2#)
23350 NEXT I
23400 QPST=BPST/TR
23450 PS=22.093*EXP(QPST)
23500 RETURN
23550 *IDEALT
23600 TIDEAL=T/100
23650 TL=LOG(TIDEAL)
23700 GI=(-1#)*(C(1)/TIDEAL+C(2))*TL
23750 HI=(C(2)+C(1)*(1#-TL)/TIDEAL)
23800 CPI=C(2)-C(1)/TIDEAL
23850 FOR I=3 TO 18
23900 GI=GI-C(I)*TIDEAL^CDBL(I-6)
23950 HI=HI+C(I)*CDBL(I-6)*TIDEAL^CDBL(I-6)
24000 CPI=CPI+C(I)*CDBL(I-6)*CDBL(I-5)*TIDEAL^CDBL(I-6)
24050 NEXT I
24100 AI=GI-1#
24150 UI=HI-1#
24200 CVIX=CPI-1#
24250 SI=UI-AI
24300 RETURN
24350 *CORRTPDLVDDELG
24400 IF T>646.3# THEN GOTO 25300
24450 DLIQ=DLL
24500 IF DLL=<0 THEN DLIQ=1.11#-.0004*T
24550 DLL=DLIQ:D=DLIQ
24600 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
24650 D=DOUT:DL=DOUT
24700 GOSUB *THERMDT
24750 GL=GD
```

```
24800 DVAP=DVV
24850 IF DVV=<0 THEN DVAP=PPP/RT
24900 D=DVAP:DVV=DVAP
24950 GOSUB *DFINDDOUTPDTDPD
25000 IF DOUT<5D-007 THEN DOUT=5D-007
25050 D=DOUT:DV=DOUT
25100 GOSUB *THERMDT
25150 GV=GD
25200 DELG=GL-GV
25250 RETURN
25300 PPP=0
25350 IF T>647.126# THEN RETURN
25400 DELG=0
25450 TAUC=.657128#*(1#-T/647.126#)^.325#
25500 DL=.322#+TAUC
25550 DV=.322#-TAUC
25600 D=DV
25650 GOSUB *BASEDT
25700 GOSUB *QQTD
25800 PPP=RT*DV*BASEF+Q
25850 RETURN
25900 *PCORRTPDLVDV
25950 GOSUB *PST
26000 PPP=PS
26050 GOSUB *CORRTPDLVDVDELG
26100 DP=0
26150 DP=DELG*RT/(1#/DV-1#/DL)
26200 PPP=PPP+DP
26250 IF ABS(DELG)<1D-005 THEN GOTO 26350
26300 DLL=DL:DVV=DV:GOTO 26050
26350 P=PPP
26400 RETURN
26450 *BLOCKDATA
26500 FOR I=1 TO 4:READ ATZ(I):NEXT I
26550 DATA 640#,640#,641.6#,270#
26600 FOR I=1 TO 4:READ ADZ(I):NEXT I
26650 DATA 0.319#,0.319#,0.319#,1.55#
26700 FOR I=1 TO 4:READ AAT(I):NEXT I
26750 DATA 2.0D+004,2.0D+004,4.0D+004,25.0#
26800 FOR I=1 TO 4:READ AAD(I):NEXT I
26850 DATA 34.0#,40.0#,30.0#,1.05D+003
26900 GASCON=.461522#:TZ=647.073:AA=1#:INC=36
26950 UREF=-4328.454977# : SREF=7.618072#
27000 ALPHA=11#:BETA=44.333333333333#:GAMMA=3.5#
27050 FOR I=1 TO 10:READ BP(I):NEXT I
27100 DATA 0.7478629#,-0.3540782#,0.0#,0.0#,0.007159876#,0.0#,-0.003528426#,0.0#,0.0#,0.0#
27150 FOR I=1 TO 10:READ BQ(I):NEXT I
27200 DATA 1.1278334#,0.0#,-0.5944001#,-5.010996#,0.0#,0.63684256#,0.0#,0.0#,0.0#,0.0#
27250 FOR I=1 TO 40:READ HGKG(I):NEXT I
27300 DATA -5.3062968529023D+002,2.2744901424408D+003,7.8779333020687D+002
27350 DATA -6.9830527374994D+001,1.7863832875422D+004,-3.9514731563338D+004
27400 DATA 3.3803884280753D+004,-1.3855050202703D+004,-2.5637436613260D+005
27450 DATA 4.8212575981415D+005,-3.4183016969660D+005,1.2223156417448D+005
27500 DATA 1.1797433655832D+006,-2.1734810110373D+006,1.0829952168620D+006
27550 DATA -2.5441998064049D+006,-3.137774947767D+006,5.2911910757704D+006
27600 DATA -1.3802577177877D+006,-2.5109914369001D+005,4.6561826115608D+006
27650 DATA -7.2752773275387D+006,4.1774246148294D+005,1.4016358244614D+006
27700 DATA -3.1555231392127D+006,4.7929666384584D+006,4.0912664781209D+005
27750 DATA -1.3626369388386D+006,6.9625220862664D+005,-1.0834900096447D+006
```

```
27800 DATA -2.2722827401688D+005, 3.8365486000660D+005, 6.8833257944332D+003
27850 DATA 2.1757245522644D+004, -2.6627944829770D+003, -7.0730418082074D+004
27900 DATA -0.225#, -1.68#, 0.055#, -93.0#
27950 FOR I=1 TO 40:READ II(I):NEXT I
28000 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
28050 FOR I=1 TO 40:READ JJ(I):NEXT I
28100 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, 2, 3, 5, 7, 1, 4, 4, 4, 0, 2, 0, 0
28150 FOR I=1 TO 8:READ A(I):NEXT I
28200 DATA -7.8889166#, 2.5514255#, -6.716169#, 33.239495#
28250 DATA -105.38479#, 174.35319#, -148.39348#, 48.631602#
28300 FOR I=1 TO 18:READ C(I):NEXT I
28350 DATA 1.9730271018D+001, 2.09662681977D+001, -4.83429455355D-001, 6.05743189245D+000
28400 DATA 2.256023885D+001, -9.87532442D+000, -4.3135538513D+000, 4.58155781D-001
28450 DATA -4.7754901883D-002, 4.1238460633D-003, -2.7929052852D-004
28500 DATA 1.4481695261D-005, -5.6473658748D-007, 1.6200446D-008, -3.303822796D-010
28550 DATA 4.51916067368D-012, -3.70734122708D-014, 1.37546068238D-016
28600 FOR I=1 TO 2:READ FFD(I):NEXT I
28650 DATA 1.0D-003, 1.0#
28700 FOR I=1 TO 2:READ FFP(I):NEXT I
28750 DATA 1.0#, 10.0#
28800 FOR I=1 TO 3:READ FFH(I):NEXT I
28850 DATA 1.0#, 1.0#, 18.0152#
28900 FOR I=1 TO 2:READ NNT$(I):NEXT I
28950 DATA "K", "deg C"
29000 FOR I=1 TO 2:READ NND$(I):NEXT I
29050 DATA "kg/m3", "g/cm3"
29100 FOR I=1 TO 2:READ NNP$(I):NEXT I
29150 DATA "MPa", "bar"
29200 FOR I=1 TO 3:READ NNH$(I):NEXT I
29250 DATA "kJ/kg", "J/g", "J/mol"
29300 A1$="TEMPERATURE":A2$="DENSITY":A3$="PRESSURE":A4$="ENERGY"
29350 RETURN
```

## 文献

- Haar, L. Gallagher, J. S., and Kell, G. S. (1984) NBS/NRC Steam Tables. 320p., Hemisphere Publishing, New York.
- 伊理正夫 (1981) 数値計算. 173pp., 朝倉書店, 東京.
- 澁江靖弘 (2005) 気液二相平衡条件下での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, **26**, 105–117.
- 澁江靖弘 (2008) 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.
- 澁江靖弘 (2010) 電解質水溶液の浸透係数と凝固点や飽和水蒸気圧との関係. 兵庫教育大学研究紀要, **36**, 97–109.