

KFK-250

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

Mai 1965

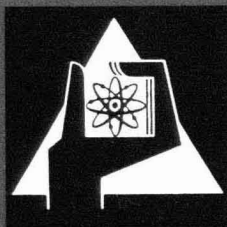
KFK 250

Institut für Radiochemie

PHOTOMETERPROG 4

Ein IBM 7070-Programm zur Berechnung von Stabilitätskonstanten
aus spektralphotometrischen Messungen

Siegfried Helmut Eberle



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE

Kernforschungszentrum Karlsruhe

Mai 1965

K F K 250

Institut für Radiochemie

PHOTOMETERPROG 4

Ein IBM 7070-Programm zur Berechnung von Stabilitätskonstanten
aus spektralphotometrischen Messungen

von

Siegfried Helmut Eberle

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe und Lehrstuhl
für Radiochemie der Technischen Hochschule Karlsruhe

I n h a l t s v e r z e i c h n i s

	Seite
1. Einleitung	1
2. Art und Verwertung der Meßdaten	1
3. Programmbeschreibung	3
3.1. Zeichenerklärung	3
3.2. Eingabe der Meßergebnisse	4
3.3. Hauptprogramm PHOTOMETERPROG 4	5
3.4. Subroutine PHOTBE	6
3.5. Subroutine BEMFAK	7
3.6. Erläuterung der zur Minimalisierung benutzten Größe	8
3.7. Ausgabe	9
4. Fortranliste	11
5. Beispiel	23

Z u s a m m e n f a s s u n g

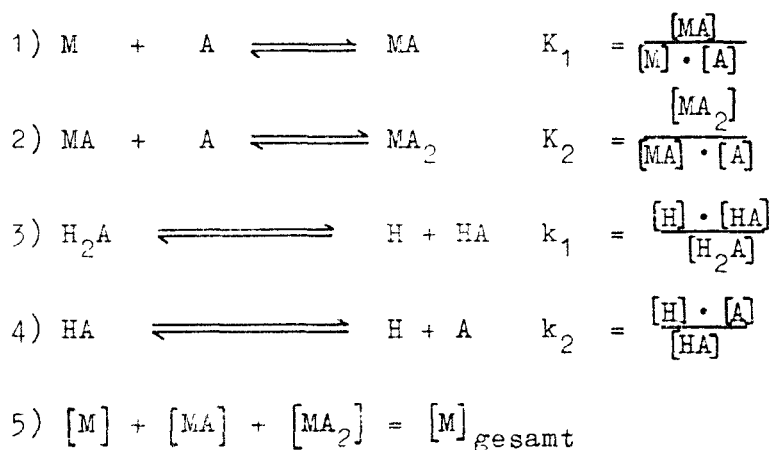
Für die IBM 7070 wurde ein Programm zur Berechnung der Stabilitätskonstanten bei sukzessiver Bildung der Komplexe MA und MA₂ geschrieben (M = Metall, A = Anion des Liganden H₂A). Als Meßdaten müssen die bei 3 Wellenlängen gemessenen Extinktionen und der pH-Wert einer wässrigen Lösung der Komponenten vorliegen. Zur Auswertung wird angenommen, daß nur die metallhaltigen Species zur Absorption beitragen und daß die Extinktionsmoduln für M und MA₂ bekannt sind. Das Programm sucht die Stabilitätskonstanten K₁ und K₂ und die Extinktionsmoduln für MA, die ein Minimum einer passend gewählten Fehlergröße ergeben. Die Fortranliste der Programmstatements und ein Beispiel sind angeführt.

1. E i n l e i t u n g

Die Bildung von Komplexen und Chelaten eines Metallions ist in vielen Fällen mit einer starken Veränderung des Absorptionsspektrums der Lösung der Komponenten verbunden. Mißt man die Lichtabsorption bei einer geeigneten Wellenlänge, so lassen sich daraus die Stabilitätskonstanten der beteiligten Verbindungen berechnen. Die Auswertung erfolgt am häufigsten auf graphischem Weg, wozu mehrere Methoden in der Literatur beschrieben sind (1,2). In neuerer Zeit werden zunehmend elektronische Digitalrechner eingesetzt, die eine viel höhere Rechengenauigkeit und bedeutende Zeitersparnis bieten. Sie gestatten durch Verwendung des Prinzips der kleinsten Quadrate ein auch im Sinn der Fehlerrechnung exaktes Resultat zu erhalten (3,4,5). Das nachstehend erläuterte Programm für die IBM 7070 dient zur Berechnung von Stabilitätskonstanten aus spektralphotometrischen Daten, wobei als "richtige" Konstanten diejenigen angesehen werden, die ein Minimum einer passend gewählten Fehlergröße ergeben. Es ist auf 1:1- und 1:2-Komplexe zwischen einem Metall und einem zweibasigen Liganden beschränkt.

2. A r t u n d V e r w e r t u n g d e r M e ß d a t e n

PHOTOMETERPROG 4 geht von der sukzessiven Bildung zweier Komplexe MA und MA₂ zwischen dem Metall M und dem Liganden H₂A aus, entsprechend den Gleichungen:



K_1 und K_2 sind die beiden Stabilitätskonstanten, k_1 und k_2 die Dissoziationskonstanten des Liganden. Die Ladungszeichen wurden in den obigen Formeln weggelassen, da sie für die Berechnung ohne Bedeutung sind. Ebenso wird jede physikalisch-chemische Bedeutung der Reaktionsgleichungen vom Rechenprogramm ignoriert und nur der mathematische Inhalt der rechts stehenden Formeln berücksichtigt. Demzufolge kann jedes beliebige chemische Gleichgewicht, das auf dieselben mathematischen Zusammenhänge führt, durch das Programm ausgewertet werden.

Als Meßdaten verlangt PHOTOMETERPROG 4 den pH-Wert, die bei 3 Wellenlängen bestimmte Extinktion, die Konzentration des Metallions und die des Liganden. Es wird vorausgesetzt, daß jede der metallhaltigen Species zur Absorption beiträgt und daß die Extinktionsmoduln für das freie Metall und den zweiten Komplex bei allen 3 Meßpunkten bekannt sind. Es gelten dann die Beziehungen (E_1 usw. = Extinktion, $\epsilon_{M,1}$ usw. = Extinktionsmoduln):

$$\begin{aligned} E_1 &= \epsilon_{M,1} \cdot [M] + \epsilon_{MA,1} \cdot [MA] + \epsilon_{MA_2,1} \cdot [MA_2] \\ E_2 &= \epsilon_{M,2} \cdot [M] + \epsilon_{MA,2} \cdot [MA] + \epsilon_{MA_2,2} \cdot [MA_2] \\ E_3 &= \epsilon_{M,3} \cdot [M] + \epsilon_{MA,3} \cdot [MA] + \epsilon_{MA_2,3} \cdot [MA_2] \end{aligned}$$

Für die Verbindung MA gibt man mehrere wahrscheinliche Werte der 3 Extinktionsmoduln vor, das Programm sucht dann selbständig die "beste" Kombination heraus. Die Extinktionsmoduln für M und MA_2 müssen in einem besonderen Versuch bestimmt werden, z.B. an einer Lösung des Metalls ohne Komplexbildner und an einer Lösung, in der die ganze Metallmenge als Komplex MA_2 vorhanden ist. Die 3 Wellenlängen sind so zu wählen, daß die Lichtabsorption dem Ausmaß der Bindung des Metalls an den Liganden proportional ist. Der Einfluß der einzelnen Species auf die Meßstellen soll möglichst verschieden sein, da hiervon die erreichbare Genauigkeit abhängt. Besonders günstig sind die Verhältnisse bei den Ionen NpO_2^+ und PuO_2^{++} , für die das Programm ausgearbeitet wurde. Hier hat jede Species einen eigenen Absorptionspeak, auf den der Einfluß der beiden anderen metallhaltigen Formen kleiner als 10 % ist, und der Ligand selbst absorbiert gar nicht. Das Programm diente in der aufliegenden Version zur Auswertung von Versuchen mit fünfwertigem Neptunium (6), wobei es sich sehr gut bewährte.

3. Programmbeschreibung

Die im Teil 4 dargestellte Fortranliste enthält zahlreiche Commentkarten zur näheren Erklärung des Rechnungsganges. Die Programmbeschreibung erläutert daher nur besonders wichtige Punkte etwas eingehender.

3.1. Zeichenerklärung

ANK(N)	: Konzentration der Ligandenanionen
BLIND1, BLIND2	: Blindwerte der Konstanten SK1 und SK2, die vom Benutzer willkürlich eingesetzt werden müssen
CG	: Gesamtkonzentration an Metall
CGRENZ	: Minimaler Anteil eines Species zur Berechnung einer Konstanten
CS(N)	: Berechnete Gesamtkonzentration an Metall
CSM	: Mittelwerte aller CS
DK1, DK2	: Dissoziationskonstanten der Liganden
E1(N), E2(N), E3(N)	: die bei den 3 Wellenlängen gemessenen Extinktionen
E1B(N)	: der Zusatz "B" kennzeichnet Größen, die mit den erhaltenen Konstanten rückberechnet wurden
EM11 usw.	: Extinktionsmodul der Species 1 bei Wellenlänge 1 (z.B. $EM11 = \epsilon_{M,1}$)
FEHL1 usw.	: Fehlergrößen 1 bis 4
FHJK(N)	: der Quotient $[A^{2-}] / [H_2A]$ für PH(N)
HAG	: Gesamtkonzentration an Ligand
HJK(N)	: Wasserstoffionenkonzentration
KIN1A, KIN1E KIN2A, KIN2E	: Grenzen für die Berechnung von K1 und K2 (kleinster und größter Meßwertindex)
MAXIN2	: Anzahl der vorgegebenen EM22-Werte $1 \leq MAXIN2 \leq 15$
MODIN1 usw.	: Indices der Reihen der Extinktionsmoduln für MA bei den 3 Wellenlängen
N	: Meßwertindex
PH(N)	: pH-Wert
SIGK1, SIGK2	: die mittleren quadratischen Fehler von SK1 und SK2
SK1(N), SK2(N)	: die für jeden Meßpunkt berechneten Stabilitätskonstanten
SK1M, SK2M	: Mittelwerte von SK1 und SK2
SFQCS	: Summe aller $(CS(N) - CSM)^2$

3.2. E i n g a b e

Diese besteht aus vier Arten von Karten, deren Inhalt die folgende Aufstellung angibt:

1. Eine Kontrollzahlenkarte, die als erste Zahl die Identifikationsnummer 1 in Feld 2 enthält. Als nächstes folgen die Forttrannummern der Subroutinen, in der hier beschriebenen Version sind das 05904 und 05903. Weiter sind die Versuchsnummer und das Datum anzugeben, beide in der Form AA-AA-AA (z.B. 06-05-65 für den 6.Mai 1965), in der sie dann am Kopf jeder Druckseite auftauchen. Danach folgen die Berechnungsgrenzen, die angeben, von welchen Meßwerten Konstanten berechnet werden sollen, z.B. bedeutet $KIN1A = 3$, $KIN1E = 15$, daß SK1 für die Meßwerte $N = 3$, $N \ 3 \ 4 \ \dots \dots$ bis $N = 15$ berechnet wird. Zum Schluß kommt NG, die Gesamtzahl aller eingegebenen Meßpunkte, sie muß kleiner als fünfzig sein. Ein zu großer Wert von NG verursacht eine Fehlernachricht und das Abbrechen des Programmablaufes.
2. Die Meßwertkarten, von denen jeweils eine die Zahlen eines Meßpunktes enthält. Anschließend an die Kartenkennzahl, die hier 2 ist, kommen Meßwertindex N, Extinktionswerte $E1(N)$, $E2(N)$, $E3(N)$ und pH-Wert $PH(N)$. Die Reihenfolge der Größen darf nicht verwechselt werden. Die Karten werden auf die richtige Kennzahl geprüft und darauf, ob die Meßwerte in der natürlichen Reihenfolge $N = 1, 2, 3 \dots NG$ angeliefert werden. Liegt eine falsch, fehlt ein Meßwert oder sind mehr als NG Meßwertkarten vorhanden, so druckt das Programm eine Fehlermeldung und beendet den Rechnungslauf.
3. Eine Konstantenkarte, welche als erstes die Kennzahl 3 und dann die aus der Liste zu ersehenden Konstanten enthält. Die Blindwerte der Stabilitätskonstanten BLIND1 und BLIND2 werden benötigt, um eine Division mit unbekanntem Zahlen zu vermeiden, wenn in einem Programmlauf keinerlei Konstanten berechnet wurden. Man verwendet am besten Zahlen vernünftiger Größe, z.B. $1,000 \cdot 10^5$.

4. Vier Karten mit den Extinktionsmoduln. Jede Karte enthält eine Identifikationsnummer (41 usw.) und weiterhin:

- Karte 41 die Extinktionsmoduln von M und MA2 in der Reihenfolge EM11, EM12 usw.
- Karte 42 7 Werte des Extinktionsmoduls der Species MA bei Wellenlänge 1, deren Größe so zu wählen ist, daß der richtige innerhalb des vorgegebenen Bereiches liegt. Im Programm bilden die Extinktionsmoduln eine Reihe EM21(MODIN1), deren Index MODIN1 von 1 bis 7 geht.
- Karte 43 enthält analog Karte 42 Werte für den Extinktionsmodul der Species MA bei Wellenlänge 3.
- Karte 44 kann 1 bis 15 Werte von EM22 enthalten, die den Bereich überstreichen sollen, in dem der richtige Extinktionsmodul liegt. Wird z.B. EM22 = 400 erwartet, so wären die 10 Werte EM22 = 350, 360 ... 440 ein sinnvoller Bereich. Nach der Kennzahl ist zuerst als MAXIN2 die Anzahl der EM22 anzugeben, dann folgen die EM22 selbst.

3.3. Hauptprogramm PHOTOMETERPROG 4

Das Hauptprogramm dirigiert den gesamten Programmablauf, veranlaßt das Einlesen und Ausdrucken, führt die Indizierung berechneter Ergebnisse durch und sucht zuletzt den günstigsten Fall. Die einzige direkte Berechnung im Hauptprogramm ist die der Größe FHJK(N); sie wird im Hauptprogramm ausgeführt, um Rechenzeit zu sparen, da sie sonst mit jedem Aufruf der Subroutinen wiederholt würde. Danach setzen drei ineinander geschachtelte DO-Schleifen diskrete Werte von EM21, EM22 und EM23 fest und rufen dafür die Subroutine PHOTBE zur Berechnung der Konstanten auf. Nach einer Prüfung, ob überhaupt Konstanten berechnet wurden - wenn nicht, werden BLIND1 und BLIND2 eingesetzt - wird mittels der Subroutine BEMFAK aus den erhaltenen Konstanten und den Extinktionsmoduln die Extinktion für jede Wellenlänge zurückberechnet. BEMFAK liefert auch die Fehlergrößen FEHL1 bis FEHL4, die das Hauptprogramm mit dem jeweils gültigen Modulindex MODIN1 und MODIN3 in-

diziert (Reihen FEHL1(MODIN1, MODIN3) usw.). Dasselbe geschieht mit den Größen SK1, SK2, SIGK1, SIGK2, CSM und SFQCS. Nach Durchlaufen der DO-Schleifen 2 und 3 sind alle 49 Kombinationen von EM21 und EM23 für einen Lauf (ein EM22) gerechnet. Die Konstanten und Fehlergrößen werden in Tabellenform ausgedruckt (Seite 1 und 2 der Ausgabe). Für den abgeschlossenen Lauf wird das kleinste FEHL4 und alle dazugehörenden Konstanten gesucht, die mit dem gerade geltenden MODIN2 indiziert werden, worauf das ganze Verfahren mit einem neuen EM22 wiederholt wird. Sobald die DO-Schleife 1 zu Ende ist, druckt das Hauptprogramm die Minimalgrößen für jedes EM22 aus (als Seite 3) und sucht das kleinste Minimum von FEHL4 = BESTF4 sowie die dazu gehörenden Konstanten und Moduln. Für letztere werden nochmals PHOTBE und BEMFAK aufgerufen und alle damit berechneten Einzelwerte in Seite 4 und 5 der Ausgabe abgedruckt.

3.4. S u b r o u t i n e PHOTBE

Durch dieses Unterprogramm erhält man die Stabilitätskonstanten und ihren mittleren quadratischen Fehler. Ausgangspunkt ist das auf Seite 2 begründete Gleichungssystem für den Zusammenhang zwischen Extinktion und Konzentration (hier in Fortranschreibweise):

$$E1(N) = EM11 * C1(N) + EM21 * C2(N) + EM31 * C3(N)$$

$$E2(N) = EM12 * C1(N) + EM22 * C2(N) + EM32 * C3(N)$$

$$E3(N) = EM13 * C1(N) + EM23 * C2(N) + EM33 * C3(N)$$

Die Determinante wird nach der Regel von Sarrus gelöst, wobei zunächst die Hilfsgrößen FK11 bis FK33 errechnet werden. Eine DO-Schleife berechnet die Konzentrationen der einzelnen Species und die des freien Ligandenanions, dabei wird berücksichtigt, daß ein Teil des Liganden zur Komplexbildung verbraucht wurde:

$$ANK(N) = (HAG - C2(N) - 2.* C3(N))*FHJK(N)$$

Die Stabilitätskonstanten erhält man aus zwei weiteren DO-Schleifen, welche aber nur dann eine Berechnung durchführen, wenn die Konzentration jeder der am Gleichgewicht beteiligten Species größer als CGRENZ*CG ist, wobei nur die durch die Grenzindices KIN1A usw. eingeschlossenen Versuchspunkte ausgewertet werden.

Nicht berechnete Konstanten setzt das Programm gleich -1,0. Zu der anschließenden Mittelwertbildung müssen mindestens zwei SK1(N) bzw. SK2(N) vorhanden sein; verhindern die Grenzbedingungen dies, so wird SK1M bzw. SK2M gleich -1,0 gesetzt. Das Hauptprogramm erkennt daran, daß keine Konstanten berechnet wurden, da negative Werte sonst nicht auftreten können. Wie schon erwähnt, setzt das Hauptprogramm dann für SK1M BLIND1 und für SK2M BLIND2 ein.

3.5. S u b r o u t i n e BEMFAK

Die Ausgangsgrößen für die Fehlerrechnung sind die aus den durch PHOTBE gefundenen Konstanten rückwärts berechneten Extinktionen E1B(N) usw., die man mittels der Subroutine BEMFAK erhält. Beachtung verdient dabei der Weg auf dem ANK(N) gewonnen wird, da er Anlaß zu einem programmierten Abbruch des Laufes geben kann. Das aufzulösende Gleichungssystem lautet:

$$\text{ANKI} = (\text{HAG} - \text{C2I} - 2.\text{*C3I})\text{*FHJK(N)}$$

$$\text{C1I} = \frac{\text{CG}}{(1. + \text{SK1}\text{*ANKI} + \text{SK1}\text{*SK2}\text{*ANKI}^2)}$$

$$\text{C2I} = \text{C1I}\text{*SK1}\text{*ANKI}$$

$$\text{C3I} = \text{C2I}\text{*SK2}\text{*ANKI}$$

Zur Auflösung dient ein Iterationsverfahren, dessen Konvergenz an den ANKI verfolgt wird. Die Iteration wird als ausreichend abgebrochen, wenn der Unterschied

$$\text{DIFZ} = \text{ABS}((\text{ANKI} - \text{ANKALT})/\text{ANKI}) = \left| \frac{\text{ANKI} - \text{ANKALT}}{\text{ANKI}} \right|$$

zweier aufeinanderfolgender ANKI kleiner als 0,001 ist. Wenn nicht, so kontrolliert das Programm, ob dieses DIFZ kleiner als das vorhergehende ist und stoppt bei Divergenz die Rechnung nach Ausdrucken einer Fehlernachricht ab. Dasselbe geschieht, wenn nach 20 Iterationsstufen die Bedingung $\text{DIFZ} \leq (0,001)$ nicht erfüllt ist. Nach erfolgreichem Abschluß der Iteration werden die Extinktionen E1B(N), E2B(N) und E3B(N) sowie die Fehlergrößen FEHL1 bis FEHL4 berechnet, danach kehrt der Programmablauf zum Hauptprogramm zurück.

3.6. Erläuterung der zur Minimalisierung benutzten Größe

Die Methode der kleinsten Fehlerquadrate wird üblicherweise auf Zusammenhänge der nachstehenden Form angewandt:

$$Y = f(x_1, x_2 \dots \dots \dots x_n, k_1, k_2 \dots \dots k_m)$$
$$U = (Y - f(x_1, x_2 \dots \dots x_n, k_1, k_2 \dots \dots k_m)),$$

worin die abhängige Variable Y der mit einem Zufallsfehler behaftete Meßwert ist. Die ebenfalls aus dem Experiment erhaltenen x_i sind unabhängige Variable und die k_i sind die auszurechnenden Konstanten. Gesucht werden diejenigen k_i , die ein Minimum von U_N^2 ergeben. Das hier vorliegende Problem ist dadurch gekennzeichnet, daß drei völlig gleichartige abhängige Variable ($E1(N)$, $E2(N)$, $E3(N)$) vorhanden sind, während üblicherweise nur eine berücksichtigt wird. Carlquist und Dyrssen (7) haben in einem ähnlichen Fall die Berechnung bei der Wellenlänge ausgeführt, die bei steigendem pH-Wert eine maximale Veränderung zeigte, damit bleibt aber die in den anderen Meßpunkten enthaltene Information unausgenutzt. R.M. Rust und J.B. Johnson (8) verwandten bis 50 Wellenlängen, ihrer Veröffentlichung ist aber nichts näheres darüber zu entnehmen, wie diese Daten untereinander verknüpft wurden. Als zu minimalisierende Differenz U verwendet PHOTOMETERPROG 4 den Abstand zwischen Meßpunkten und berechneten Punkten im dreidimensionalen Koordinatensystem mit den Achsen E1, E2, E3. Es gilt:

$$U(N)^2 = (E1(N) - E1B(N))^2 + (E2(N) - E2B(N))^2 + (E3(N) - E3B(N))^2$$

$$\sum_{N=1}^{NG} U(N)^2 = \sum_{N=1}^{NG} (E1(N) - E1B(N))^2 + \sum_{N=1}^{NG} (E2(N) - E2B(N))^2 + \sum_{N=1}^{NG} (E3(N) - E3B(N))^2$$

$$FEHL1 = \sum_{N=1}^{NG} (E1(N) - E1B(N))^2 \text{ usw.}$$

$$FEHL4 = \sum_{N=1}^{NG} U(N)^2 = FEHL1 + FEHL2 + FEHL3$$

Zum Aufsuchen der Konstanten, die ein Minimum von $\sum U^2$ ergeben, kennt man mehrere Methoden. Am häufigsten bildet man die ersten Ableitungen von $\sum U(N)^2$ nach allen Konstanten und löst das entstehende Gleichungssystem (9). Einen völlig anderen Weg verfolgt die Programmfamilie

LETAGROP mit dem "pit-mapping" (10). Die "pit-map" ist die von $\sum U(N)^2$ im (n+1)-dimensionalen Raum (n = Zahl der unbekanntenen Konstanten) beschriebene Fläche, deren Form bestimmt wird, woraus LETAGROP dann die Minimumskordinaten sucht. PHOTOMETERPROG verwendet eine vereinfachte Form dieses Prinzips, indem einerseits das Problem auf eine Fläche im dreidimensionalen Raum reduziert wird (Achsen sind $\sum U(N)^2$ und 2 Ext.-moduln) und andererseits soviel Einzelpunkte dieser Fläche berechnet werden, daß das Minimum ohne Kenntnis der Flächengleichung gefunden werden kann.

Die in Abschnitt 2 angegebenen Gleichungen enthalten 8 Unbekannte C1(N), C2(N), C3(N), EM21, EM22, EM23, SK1 und SK2, nach gegenseitigem Einsetzen bleiben 3 unbestimmte Konstanten übrig. PHOTOMETERPROG geht von einer Anzahl vorgegebener Werte der drei EM2 aus und berechnet damit die Stabilitätskonstanten und Fehlerquadratsummen. Um eine dreidimensionale Fläche zu erhalten, wird EM22 festgehalten und FEHL4 für je 7 Werte von EM21 und EM23 errechnet, insgesamt also 49 Punkte, von denen dann der mit dem kleinsten FEHL4 aufgesucht wird. Das Verfahren wird mit einer Anzahl weiteren EM22's wiederholt, wodurch man so viel "pit-maps" erhält, wie Werte für EM22 vorgegeben wurden. Die für jede EM22 ausgedruckte pit-map (Seite 1 der Ausgabe) enthält EM21 und EM23 als Koordinaten und die Werte von FEHL4 als "Punkte", zusätzlich auch FEHL1, FEHL2, FEHL3 und SFQCS. Eine zweite pit-map (Seite 2 der Ausgabe) enthält die Konstanten und ihren mittleren quadratischen Fehler. Zum Abschluß sucht das Hauptprogramm die pit-map mit dem kleinsten Minimum von FEHL4, womit dann die "besten" Werte von EM21, EM22 und EM23 bekannt sind. Natürlich darf der kleinste FEHL4-Wert nicht am Rand des vorgegebenen Bereiches liegen, weshalb das Verfahren zweckmäßig in zwei Stufen mit zuerst einem weiten und dann einem engen Bereich auszuführen ist.

3.7. A u s g a b e

Der Inhalt der Ausgabe geht aus dem abgebildeten Beispiel hervor, woraus auch alle angewandten Meßwerte und Konstanten ersehen werden können. Von den 11 vorhandenen pit-maps ist nur eine abgebildet. Man könnte auf das Ausdrucken der pit-maps ganz verzichten, sie gestatten aber eine einfache Kontrolle darüber, ob das Minimum am Rand liegt und wie sich einzelne Größen mit den Extinktionsmoduln ändern.

Literaturliste

- (1) H.L. Schläfer
"Komplexbildung in Lösung" Springer Verlag Berlin 1961
- (2) F.J.C. Rosotti, H. Rosotti
"The Determination of Stability Constants"
McGraw-Hill, N.Y. 1961
- (3) J.C. Sullivan, J. Rydberg, W.F. Miller
Acta Chem. Scand. 13, 2023 (1959)
- (4) N. Ingri, L.G. Sillen
Acta Chem. Scand. 16, 173 (1962)
- (5) R.M. Rust, J.S. Johnson
J. Phys. Chem. 67, 821 (1963)
- (6) S.H. Eberle KFK 281 (1965)
- (7) B. Carlquist, D. Dyrssen
Acta Chem. Scand, 16, 94 (1962)
- (8) R.M. Rust, J.S. Johnson
J. Phys. Chem. 67, 821 (1963)
- (9) W.R. Busing, H.A. Lery
ORNL-TM-271 (7.8.62)
- (10) L.G. Sillen
Acta Chem. Scand. 16, 159 (1962)

4. Fortranliste der Rechenprogramme

1	C	05901	PHOTOMETERPROG. 4	05901
2	C	05906	EIN PROGRAMM ZUR AUSWERTUNG EINES MIT EXTINKTION- UND PH-MESSUNGEN	05906
3	C	05906	UNTERSUCHTEN KOMPLEXGLEICHWICHTES DURCH EIN FEHLERNIVEAUDIAGRAMM	05906
4	C	05906	VERWENDUNG NUR MIT DEN SUBROUTINEN PHOTBE UND BENFAK.	05906
5	C	05906		05906
6	C	05906	DAS PROGRAMM NIMMT DIE BILDUNG VON 2 SUKZESSIVEN KOMPLEXEN MA UND	05906
7	C	05906	MAZ AUS EINEM METALL M UND DEM ANION A EINES LIGANDEN HZA AN. SIND	05906
8	C	05906	CG UND HAG DIE GESAMTKONZENTRATIONEN AN METALL UND LIGAND, SO WER-	05906
9	C	05906	DEN FOLGENDE BEZIEHUNGEN VORAUSGESETZT	05906
10	C	05906		05906
11	C	05906	1. $M+A=MA$ $SK1=MA/(M+A)$	05906
12	C	05906	2. $MA+A=MAZ$ $SK2=MAZ/(MA+A)$	05906
13	C	05906	3. $HZA=HA+H$ $DK1=(HA+H)/HZA$	05906
14	C	05906	4. $HA=A+H$ $DK2=(A+H)/HA$	05906
15	C	05906	5. $HZA=HAG-MA-2*MAZ$	05906
16	C	05906	6. $CG=M+MA+MAZ$	05906
17	C	05906		05906
18	C	05906	GEMESSEN WERDEN MUESSEN 2 BIS 50 WERTGRUPPEN DES PH-WERTES UND	05906
19	C	05906	DER EXTINKTION BEI 3 WELLENLAENGEN. DIE EXTINKTIONSMODULN DES FREI	05906
20	C	05906	EN METALLES UND DER SPECIES MAZ MUESSEN BEKANNT SEIN. DAS PROGRAMM	05906
21	C	05906	GIBT EINE ANZAHL VON KOMBINATIONEN DER 3 EXTINKTIONSMODULN DER SPE	05906
22	C	05906	CIES MA VOR, HOLT VON DER SUBROUTINE PHOTBE DIE DAMIT BERECHNETEN	05906
23	C	05906	STABILITÄTSKONSTANTEN UND VON DER SUBROUTINE BENFAK DIE MIT DIESE	05906
24	C	05906	N KONST. BERECHNETEN QUADRATSUMMEN DER DIFFERENZ ZW. BERECHNETER	05906
25	C	05906	UND GEMESSENER EXTINKTION. DIESE WERTE WERDEN IN DIAGRAMMFORM AUS-	05906
26	C	05906	GEDRUCKT.	05906
27	C	05901	DAS PROGRAMM SUCHT DIE JEENIGE KOMBINATION DER EXTINKTIONSMODULN DER	05901
28	C	05901	SPECIES MA DIE DIE KLEINSTE FEHLERQUADRATSUMME 4 ERGEBEN. DAMIT	05901
29	C	05901	WERDEN DIE STABILITÄTSKONSTANTEN BERECHNET UND IN EINER LISTE DIE	05901
30	C	05901	RECHNERGEBNISSE FUER JEDEN MESSWERT AUSGEDRUCKT.	05901
31	C	05906		05906
32	C	05906	EINGABE	05906
33	C	05906		05906
34	C	05906	1. KONTROLLZAHLEN	05906
35	C	05906	KENNI=1, KARTENKENNZAHL	05906
36	C	05906	ISUB1, ISUB2=NUMMERN DER SUBROUTINEN PHOTBE UND BENFAK	05906
37	C	05906	NUMH1=VERSUCHSNUMMER	05906
38	C	05906	NUMH2=VERSUCHSJAHR	05906
39	C	05906	NUMH3=EXPERIMENTNUMMER	05906
40	C	05906	KDAT=TAG	05906
41	C	05906	KDAT2=MONAT	05906
42	C	05906	KDAT3=JAHR DER BERECHNUNG	05906
43	C	05906	KIN1A, KIN1E, KIN2A, KIN2E=GRENZEN FUER N ZUR BERECHN. VON K	05906
44	C	05906	NG=ZAHL DER MESSUNGEN, DIESE DARF MAXIMAL 50 SEIN	05906
45	C	05906		05906
46	C	05906	2. MESSWERTE, INSGESAMT NG KARTEN	05906
47	C	05906	KENM2=2, KARTENKENNZAHL	05906
48	C	05906	N=INDEX DER MESSUNG	05906
49	C	05906	E1(N), P2(N), E3(N), PH(N)=DIE GEMESSENEN EXTINKTIONEN BEI	05906
50	C	05906	3 WELLENLAENGE UND DER ZUGEHÖRIGE PH-WERT	05906
51	C	05906		05906
52	C	05906	3. KONSTANTEN	05906
53	C	05906	KENM3=3, KARTENKENNZAHL	05906
54	C	05906	CG=GESAMTKONZENTRATION DES METALLES	05906
55	C	05906	HAG=GESAMTKONZENTRATION DES LIGANDEN	05906
56	C	05906	CGRENZ=MINIMALWERT EINER SPECIES ZUR BERECHNUNG VON K	05906
57	C	05906	DK1, DK2=DISSOZIATIONSKONSTANTEN DES LIGANDEN	05906
58	C	05906	BLIND1, BLIND2=WERTE DER STAB.-KONST. WENN AUS DEN MESSWER-	05906
59	C	05906	TEN KEIN WERT BERECHNET WURDE	05906
60	C	05906		05906

61	C	4.-MODUL,ZUSAMMEN 4 KARTEN	05906
62	C	KARTE 1	05906
63	C	KENN41=41,KARTENKENNZAHL	05906
64	C	EM11,EM12,EM13,EM31,EM32,EM33=EXTINKTIONSMODUL DER SPECIES M BEI	05906
65	C	M UND MA2 BEI DEN 3 WELLENLAENGEN (BSP EM12=SPECIES M BEI	05906
66	C	WELLENLAENGE 2 = W2)	05906
67	C	KARTE 2	05906
68	C	KENN42=42,KARTENKENNZAHL	05906
69	C	EM21(MODIN1)=7 WERTE DES EXT.-MODULS VON MA BEI W1	05906
70	C	KARTE 3	05906
71	C	KENN43=43,KARTENKENNZAHL	05906
72	C	EM23(MODIN3)= 7 WERTE DES EXT.-MODULS VON MA BEI W3	05906
73	C	KARTE 4	05906
74	C	KENN44=44,KARTENKENNZAHL	05906
75	C	MAXIN2=ZAHL DER VORGEgebenEN EM22, MAXIMAL 15 WERTE	05906
76	C	EM22(MODIN2)=WERTE DES EXT.-MODULS VON MA BEI W2	05906
77	C		05906
78	C	AUSGABE	05906
79	C		05901
80	C	DAS PROGRAMM SCHREIBT FUER JEDEN WERT VON EM22 2 SEITEN DIE IN MAT	05901
81	C	RIFORM FUER JEDE KOMBINATION VON EM21 UND EM23 FOLGENDE WERTE ENT	05901
82	C	HALTEN	05901
83	C		05901
84	C	SEITE 1	05906
85	C	SKIM=DEN MITTELWERT DER STABILITAETSKONSTANTEN VON MA	05906
86	C	SIGK1=DEN MITTEL- QUADRAT. FEHLER VON SK1	05906
87	C	SK2M=DEN MITTELWERT DER STABILITAETSKONSTANTEN VON MA2	05906
88	C	SIGK2=DEN MITTL. QUADRAT. FEHLER VON SK2	05906
89	C	CSM=DEN MITTELWERT DER BERECHNETEN METALLKONZENTRATION	05906
90	C		05901
91	C	SEITE 2,FEHLERNIVEAUDIAGRAMM	05906
92	C	FEHL1=SUMME(E1(N)-E18(N))**2	05906
93	C	FEHL2=SUMME(E2(N)-E28(N))**2	05906
94	C	FEHL3=SUMME(E3(N)-E38(N))**2	05906
95	C	FEHL4=FEHL1+FEHL2+FEHL3	05906
96	C	SUMFCS=SUMME(CG-CS(N))**2	05906
97	C	E1B USW. IST DIE MIT DEN SK BERECHNETE EXTINKTION.	05906
98	C		05901
99	C	DANACH DRUCKT DAS PROGRAMM 3 SEITEN AUS, DIE DIE ENDQUELTIGE BERE	05901
100	C	CHNUNG DER STABILITAETSKONSTANTE ZEIGEN.	05901
101	C		05901
102	C	SEITE 3, LISTE DER MINIMA DER 4 FEHLERQUADRATSUMMEN FUER JEDES	05901
103	C	EM22. DAZU WERDEN DIE ZUGEHÖRIGEN ER21 UND EM23 ANGEGEBEN	05901
104	C		05906
105	C	SEITE 4, ENTHAELT DIE MESSWERTE,DIE KONSTANTEN UND FUER JEDEN MESS	05901
106	C	WERT DIE BERECHNETEN KONZENTRATIONEN UND STABILITAETSKONSTANTEN.	05901
107	C	C1,C2,C3 = DIE KONZENTRATIONEN DER 3 SPECIES M,MA,MA2	05901
108	C	CS = C1+C2+C3	05901
109	C	HJK=WASSERSTOFFJONENKONZENTRATION	05901
110	C	AMK=LIGANDENANIONENKONZENTRATION	05901
111	C		05901
112	C	SEITE 5, ENTHAELT DIE MIT HILFE DER MITTELWERTE DER STABILITAETS	05901
113	C	KONSTANTEN RUECKBERECHNETEN MESSWERTE UND KONZENTRATIONEN FUER	05901
114	C	JEDEN PH-WERT	05901
115	C	E1B,E2B,E3B=BERECHNETE EXTINKTIONEN	05901
116	C	C1B,C2B,C3B=BERECHNETE SPECIESKONZENTRATION	05901
117	C	FHJK=A/H2A	05901
118	C	ANKB=BERECHNETE LIGANDENANIONKONZENTRATION	05901
119	C		05901
120	C	BEGINN DER PROGRAMMSTATEMENTS	05906
121	C	1. DIMENSION UND FORMATE	05906

122 DIMENSION EI(50),E2I(50),E3I(50),PHI(50),FHJK(150),ANK(150),CI(50),C2I5
123 10I,C3I(50),CS(50),SK1(50),SK2(50),E18(50),E28(50),E38(50),C18(50),C
124 228I(50),C38(50),ANK8(150),HJK(150),EM2I(7),EM23I(7),EM22(15),SK1MI(7,7
125 3I),SK2MI(7,7),SIGK1I(7,7),SIGK2I(7,7),CSMI(7,7),SFOCSI(7,7),FEHLII
126 4I,7I),FEHLZII(7,7),FEHL3I(7,7),FEHL4I(7,7)
127 5I),FEHLZII(7,7),FEHL3I(7,7),FEHL4I(7,7)
128 DIMENSION FIMIN(15),F2MIN(15),F3MIN(15),F4MIN(15),FCMIN(15),EMIF1
129 115),EM3F(15),EMIF2(15),EM3F2(15),EMIF3(15),EM3F3(15),EMIF4(15),EM
130 23F4(15),EMIFC(15),EM3FC(15)
131 1102 FORMAT(1H,42H 05901 PHOTOMETERPROG 4,FEHLER BEI EINGABE)
132 1103 FORMAT(1HJ,14HKONTROLLZAHLEN)
133 1104 FORMAT(1HJ,9HMESSWERTE)
134 1105 FORMAT(1HJ,10HKONSTANTEN)
135 1106 FORMAT(1HJ,5HMODUL)
136 1107 FORMAT(1HJ,37HMEHR ALS 15 WERTE VON EM22 EINGELESEN)
137 1101 FORMAT(I2,2I6,1I13)
138 1201 FORMAT(1H,1,22H05901 PHOTOMETERPROG 4,50X,7HVERSUCH,13,1H/,13,1H-,1
139 13,10X,5HDATUM,13,1H,13,1H,13)
140 1202 FORMAT(1H,113HBERECHNUNG EINES CHELATGLEICHGEBICHES AUS MESSUNG
141 1N DER EXTINKTION UND DES PH-WERTES DURCH FEHLERNIVEAUDIAGRAMME)
142 1203 FORMAT(1H,7HSEITE 1,5X,4HLAUF,13,3X,52HNIVEAUDIAGRAMM DER KONSTAN
143 1TEN. BERECHNET MIT EM22 =,F8.2)
144 1204 FORMAT(1HJ,71HKONTROLLZAHLEN PHOTBE BEFKA KINIA KINIE KINZA
145 1KIN2E NG MAXIN2,5X,53HMODUL EM11 EM12 EM13 EM31
146 2 EM32 EM33)
147 1205 FORMAT(1H,14X,8I7,11X,6F8.2)
148 1206 FORMAT(1H,10HKONSTANTEN,8X,2HCG,9X,3HDK1,9X,3HDK2,8X,6HB
149 1LIND1,6X,6HBLIND2,6X,6HCGRENZ)
150 1207 FORMAT(1H,13X,E10.4,2X,E10.4,2X,E10.4,2X,E10.4,2X,E10.4,2X,E10.4,
151 12X,F10.5)
152 1208 FORMAT(1HK,17X,6HEM21 =,7E12.4)
153 1209 FORMAT(1HK,6HEM23 =,F7.2,3X,7HSIG1M =,7E12.4)
154 1210 FORMAT(1H,16X,7HSIG1 =,7E12.4)
155 1211 FORMAT(1H,16X,7HSIG2M =,7E12.4)
156 1212 FORMAT(1H,16X,7HSIG2 =,7E12.4)
157 1213 FORMAT(1H,16X,7HCSM =,7E12.4)
158 1214 FORMAT(1H,7HSEITE 2,5X,4HLAUF,13,3X,56HNIVEAUDIAGRAMM DER FEHLER
159 1GROSSEN. BERECHNET MIT EM22 =,F8.2)
160 1215 FORMAT(1HK,6HEM23 =,F7.2,2X,8HFEHL11 =,7E12.4)
161 1216 FORMAT(1H,15X,8HFEHL21 =,7E12.4)
162 1217 FORMAT(1H,15X,8HFEHL31 =,7E12.4)
163 1218 FORMAT(1H,15X,8HFEHL41 =,7E12.4)
164 1219 FORMAT(1H,15X,8HSFOCSI =,7E12.4)
165 1220 FORMAT(1H,7HSEITE 3,5X,46HLISTE DER MINIMALWERTE DER FEHLERQUADRA
166 1TSUMMCN)
167 1221 FORMAT(1HL,2X,4HEM22,4X,4HEM21,3X,4HEM23,2X,8HMINFEL1,3X,4HEM21,3
168 1X,4HEM23,2X,8HMINFEL2,3X,4HEM21,3X,4HEM23,2X,8HMINFEL3,3X,4HEM21
169 2,3X,4HEM23,2X,8HMINFEL4,3X,4HEM23,2X,8HMINSFQCS)
170 1222 FORMAT(1H, F8.2,5I2F7.2,E10.4)
171 1223 FORMAT(1HK,111HBERECHNUNG DES CHELATGLEICHGEBICHES MIT DEN EXTINK
172 1TIONSMODULN DIE EIN MINIMUM DER FEHLERQUADRATSUMME 4 ERGEBEN)
173 1224 FORMAT(1H,47HSEITE 4. AUS DEN MESSWERTEN BERECHNETE GROSSEN)
174 1225 FORMAT(1H,22HVERWENDETE SUBROUTINEN,3X,8HPHOTBE =,16,3X,8HBEMFAK
175 1 =,16)
176 1226 FORMAT(1H,36HSKI WURDE GERECHNET VON MESSWERT N =,13,8H BIS N =,1
177 13,16H UND SK2 VON N =,13,8H BIS N =,13)
178 1227 FORMAT(1H,80HDER MINIMALE ANTEIL EINER SPECIES ZUR BERECHNUNG EIN
179 1ER STABILITÄTSKONSTANTE WAR,F10.4,3H*EG)
180 1228 FORMAT(1H,99HDEM PROGRAMM WURDEN ZUM AUFSUCHEN DER BESTEN KOMBINA
181 1TION DIE FOLGENDEN EXTINKTIONSMODULN VORGEZEIGT)
182 1229 FORMAT(1H,6HEM21 =,7F8.2)

C

```

183 1230 FORMAT(IH ,6HEM22 =,15F8.2)
184 1231 FORMAT(IH ,6HEM23 =,7F8.2)
185 1232 FORMAT(IHK,50HEXTRINKTIONSMODULN UND KONSTANTEN DIESER BERECHNUNG)
186 1233 FORMAT(IH ,4X,4HEM11,5X,4HEM12,5X,4HEM21,5X,4HEM22,5X,4H
187 1EM23,5X,4HEM31,5X,4HEM32,5X,4HEM33,5X,3HDK1,8X,3HDK2,8X,3HHAG,9X,2
188 2HCG,5X,2HNG)
189 1234 FORMAT(IH ,9F9.3,4E11.4,I4)
190 1235 FORMAT(IHK,2X,1HN,3X,2HE1,6X,2HE2,6X,2HE3,7X,2HPH,8X,2HC1,10X,2HC2
191 1,10X,2HC3,10X,2HCS,10X,3HHJK,9X,3HANK,9X,3HSKL,9X,3HSK2)
192 1236 FORMAT(IH ,13,4F8.4,8E12.4)
193 1237 FORMAT(IHJ,16HMITTELWERT SK1 =,E12.4,5X,11HSIGMA SK1 =,E12.4)
194 1238 FORMAT(IHJ,16HMITTELWERT SK2 =,E12.4,5X,11HSIGMA SK2 =,E12.4)
195 1239 FORMAT(IH ,16HMITTELWERT CS =,E12.4,5X,21HSUMME (CG-CS(N))**2 =,
196 IE12.4)
197 1240 FORMAT(IH ,119HSEITE 5. RUECKBERECHNUNG DER MESSWERTE MIT DEN GEFU
198 1NDENEN STABILITAETSKONSTANTEN UND BERECHNUNG DER FEHLERQUADRATSUMM
199 ZEN)
200 1241 FORMAT(IHK,2X,1HN,3X,3HE1B,5X,3HE2B,5X,3HE3B,6X,2HPH,7X,3HC1B,9X,3
201 1HC2B,9X,3HC3B,8X,4HFHJK,9X,3HHJK,8X,4HANKB)
202 1242 FORMAT(IH ,13,4F8.4,6E12.4)
203 1243 FORMAT(IHJ,7HFEHL1 =,E10.4,5X,7HFEHL2 =,E10.4,5X,7HFEHL3 =,E10.4,7
204 7HFEHL4 =,E10.4)
205 1244 FORMAT(IH ,49HODAS PROGRAMM HAT ALS BESTE WERTE GEFUNDEN FEHL4 =,E1
206 10.4,5X,6HEM21 =,F8.2,5X,6HEM22 =,F8.2,5X,6HEM23 =,F8.2)
207 1245 FORMAT(IH ,8IHES KONNTE KEIN MITTELWERT VON SK1 BERECHNET WERDEN.
208 1DAHER WURDE EINGESETZT SK1M =,E12.4)
209 1246 FORMAT(IH ,8IHES KONNTE KEIN MITTELWERT VON SK2 BERECHNET WERDEN.
210 1DAHER WURDE EINGESETZT SK2M =,E12.4)
211 C
212 C
213 C
214 C
215 C
216 1KDAT2,KDAT3,KINIA,KINIE,KINZA,KINZENG
217 IF(KENM1-1)1001,1002,1001
218 1001 PRINT 1102
219 PRINT 1103
220 CALL EXIT
221 C
222 C
223 C
224 C
225 C
226 C
227 C
228 C
229 C
230 C
231 C
232 C
233 C
234 C
235 C
236 C
237 C
238 C
239 C
240 C
241 C
242 C
243 C
1230 FORMAT(IH ,6HEM22 =,15F8.2)
1231 FORMAT(IH ,6HEM23 =,7F8.2)
1232 FORMAT(IHK,50HEXTRINKTIONSMODULN UND KONSTANTEN DIESER BERECHNUNG)
1233 FORMAT(IH ,4X,4HEM11,5X,4HEM12,5X,4HEM21,5X,4HEM22,5X,4H
1234 1EM23,5X,4HEM31,5X,4HEM32,5X,4HEM33,5X,3HDK1,8X,3HDK2,8X,3HHAG,9X,2
1235 2HCG,5X,2HNG)
1236 FORMAT(IH ,9F9.3,4E11.4,I4)
1237 FORMAT(IHK,2X,1HN,3X,2HE1,6X,2HE2,6X,2HE3,7X,2HPH,8X,2HC1,10X,2HC2
1238 1,10X,2HC3,10X,2HCS,10X,3HHJK,9X,3HANK,9X,3HSKL,9X,3HSK2)
1239 FORMAT(IH ,13,4F8.4,8E12.4)
1240 FORMAT(IHJ,16HMITTELWERT SK1 =,E12.4,5X,11HSIGMA SK1 =,E12.4)
1241 FORMAT(IHJ,16HMITTELWERT SK2 =,E12.4,5X,11HSIGMA SK2 =,E12.4)
1242 FORMAT(IH ,16HMITTELWERT CS =,E12.4,5X,21HSUMME (CG-CS(N))**2 =,
1243 IE12.4)
1244 FORMAT(IH ,119HSEITE 5. RUECKBERECHNUNG DER MESSWERTE MIT DEN GEFU
1245 1NDENEN STABILITAETSKONSTANTEN UND BERECHNUNG DER FEHLERQUADRATSUMM
1246 ZEN)
1247 FORMAT(IHK,2X,1HN,3X,3HE1B,5X,3HE2B,5X,3HE3B,6X,2HPH,7X,3HC1B,9X,3
1248 1HC2B,9X,3HC3B,8X,4HFHJK,9X,3HHJK,8X,4HANKB)
1249 FORMAT(IH ,13,4F8.4,6E12.4)
1250 FORMAT(IHJ,7HFEHL1 =,E10.4,5X,7HFEHL2 =,E10.4,5X,7HFEHL3 =,E10.4,7
1251 7HFEHL4 =,E10.4)
1252 FORMAT(IH ,49HODAS PROGRAMM HAT ALS BESTE WERTE GEFUNDEN FEHL4 =,E1
1253 10.4,5X,6HEM21 =,F8.2,5X,6HEM22 =,F8.2,5X,6HEM23 =,F8.2)
1254 FORMAT(IH ,8IHES KONNTE KEIN MITTELWERT VON SK1 BERECHNET WERDEN.
1255 1DAHER WURDE EINGESETZT SK1M =,E12.4)
1256 FORMAT(IH ,8IHES KONNTE KEIN MITTELWERT VON SK2 BERECHNET WERDEN.
1257 1DAHER WURDE EINGESETZT SK2M =,E12.4)
1258 C
1259 C
1260 C
1261 C
1262 C
1263 C
1264 C
1265 C
1266 C
1267 C
1268 C
1269 C
1270 C
1271 C
1272 C
1273 C
1274 C
1275 C
1276 C
1277 C
1278 C
1279 C
1280 C
1281 C
1282 C
1283 C
1284 C
1285 C
1286 C
1287 C
1288 C
1289 C
1290 C
1291 C
1292 C
1293 C
1294 C
1295 C
1296 C
1297 C
1298 C
1299 C
1300 C
1301 C
1302 C
1303 C
1304 C
1305 C
1306 C
1307 C
1308 C
1309 C
1310 C
1311 C
1312 C
1313 C
1314 C
1315 C
1316 C
1317 C
1318 C
1319 C
1320 C
1321 C
1322 C
1323 C
1324 C
1325 C
1326 C
1327 C
1328 C
1329 C
1330 C
1331 C
1332 C
1333 C
1334 C
1335 C
1336 C
1337 C
1338 C
1339 C
1340 C
1341 C
1342 C
1343 C
1344 C
1345 C
1346 C
1347 C
1348 C
1349 C
1350 C
1351 C
1352 C
1353 C
1354 C
1355 C
1356 C
1357 C
1358 C
1359 C
1360 C
1361 C
1362 C
1363 C
1364 C
1365 C
1366 C
1367 C
1368 C
1369 C
1370 C
1371 C
1372 C
1373 C
1374 C
1375 C
1376 C
1377 C
1378 C
1379 C
1380 C
1381 C
1382 C
1383 C
1384 C
1385 C
1386 C
1387 C
1388 C
1389 C
1390 C
1391 C
1392 C
1393 C
1394 C
1395 C
1396 C
1397 C
1398 C
1399 C
1400 C
1401 C
1402 C
1403 C
1404 C
1405 C
1406 C
1407 C
1408 C
1409 C
1410 C
1411 C
1412 C
1413 C
1414 C
1415 C
1416 C
1417 C
1418 C
1419 C
1420 C
1421 C
1422 C
1423 C
1424 C
1425 C
1426 C
1427 C
1428 C
1429 C
1430 C
1431 C
1432 C
1433 C
1434 C
1435 C
1436 C
1437 C
1438 C
1439 C
1440 C
1441 C
1442 C
1443 C
1444 C
1445 C
1446 C
1447 C
1448 C
1449 C
1450 C
1451 C
1452 C
1453 C
1454 C
1455 C
1456 C
1457 C
1458 C
1459 C
1460 C
1461 C
1462 C
1463 C
1464 C
1465 C
1466 C
1467 C
1468 C
1469 C
1470 C
1471 C
1472 C
1473 C
1474 C
1475 C
1476 C
1477 C
1478 C
1479 C
1480 C
1481 C
1482 C
1483 C
1484 C
1485 C
1486 C
1487 C
1488 C
1489 C
1490 C
1491 C
1492 C
1493 C
1494 C
1495 C
1496 C
1497 C
1498 C
1499 C
1500 C

```

```
244 PRINT 1106
245 CALL EXIT
246
247 1010 READ INPUT TAPE 8,1101,KENN42,(EM21(MODIN1),MODIN1=1,7)
248 IF(KENN42-42)1009,1011,1009
249 1011 READ INPUT TAPE 8,1101,KENN43,(EM23(MODIN3),MODIN3=1,7)
250 IF(KENN43-43)1009,1012,1009
251 1012 READ INPUT TAPE 8,1101,KENN44,MAXIN2,(EM22(MODIN2),MODIN2=1,MAXIN2
252 1)
253 IF(KENN44-44)1009,1013,1009
254 IF(MAXIN2-15)1015,1015,1014
255 1014 PRINT 1102
256 PRINT 1107
257 CALL EXIT
258
259 C
260 C
261 C
262 C
263 C
264 C
265 C
266 C
267 C
268 C
269 C
270 C
271 C
272 C
273 C
274 C
275 C
276 C
277 C
278 C
279 C
280 C
281 C
282 C
283 C
284 C
285 C
286 C
287 C
288 C
289 C
290 C
291 C
292 C
293 C
294 C
295 C
296 C
297 C
298 C
299 C
300 C
301 C
302 C
303 C
304 C

BERECHNUNG FHJK(N)
DO 1016 N=1,NG
  HJK(N)=EXPX(-PH(N))
  FHJK(N)=DK1*DK2/(HJK(N)**.5+HJK(N)*DK1+DK1*DK2)
ERSTE DO-SCHLEIFE,SETZT EM22 FEST UND DRUCKT 1 SEITENPAAR AUS
LAUF=1
DO 1024 MODIN2=1,MAXIN2
  C
  ZWEITE DO-SCHLEIFE,SETZT EM21 FEST
  DO 1021 MODIN1=1,7
    C
    DRITE DO-SCHLEIFE,BERECHNUNG MIT EM21,EM22 UND EM23(1)BIS EM23(7)
    DO 1021 MODIN3=1,7
      CALL PHOTBE(E1,E2,E3,FHJK,EM11,EM12,EM13,EM21(MODIN1),EM22(MODIN2)
1,EM23(MODIN3),EM31,EM32,EM33,CG,HAG,NG,KIN1A,KIN1E,KIN2A,KIN2E,CG
2RENZ,C1,C2,C3,ANK,CS,SK1,SK2,SK1M,SK2M,CSM,SIGK1,SIGK2,SFOCS)
      EINSETZEN SK1M=BLIND1 BZW. SK2M=BLIND2 WENN KEINE MITTELWERTE VON
      SK1 ODER SK2 BERECHNET WURDEN
      IF(SK1M)1017,1017,1018
1017 SK1M=BLIND1
1018 IF(SK2M)1019,1019,1020
1019 SK2M=BLIND2
1020 CALL BEFAR(E1,E2,E3,FHJK,NG,CG,HAG,SK1M,SK2M,EM11,EM12,EM13,EM21(
1MODIN1),EM22(MODIN2),EM23(MODIN3),EM31,EM32,EM33,E18,E28,E38,C18,C
228,C38,ANK8,FEHL1,FEHL2,FEHL3,FEHL4)
C
C
INDIZIERUNG DER AUSZUDRUCKENDEN GROSSEN
SK1M1(MODIN1,MODIN3)=SK1M
SK2M1(MODIN1,MODIN3)=SK2M
SIGK11(MODIN1,MODIN3)=SIGK1
SIGK21(MODIN1,MODIN3)=SIGK2
CSM1(MODIN1,MODIN3)=CSM
SFOCS1(MODIN1,MODIN3)=SFOCS
FEHL11(MODIN1,MODIN3)=FEHL1
FEHL21(MODIN1,MODIN3)=FEHL2
FEHL31(MODIN1,MODIN3)=FEHL3
FEHL41(MODIN1,MODIN3)=FEHL4
1021
C
) ENDE DER 2. UND 3. DO-SCHLEIFE, DAS PROGRAMM HAT JETZT ALLE WERTE
UM DAS ERGEBNIS FUER EINEN LAUF (MIT EM22=KONST.)AUSZUDRUCKEN.
AUSDRUCKEN SEITE 1,UEBERSCHRIFT
PRINT 1201,NUMM1,NUMM2,NUMM3,KDAT1,KDAT2,KDAT3
PRINT 1202
PRINT 1203,LAUF,EM22(MODIN2)
PRINT 1204
```

```
305 PRINT 1205,ISUB1,ISUB2,KIN1A,KIN1E,KIN2A,KIN2E,NG,MAXIN2,EM11,EM12 05901
306 1,EM13,EM31,EM32,EM33 05901
307 PRINT 1206 05906
308 PRINT 1207,CG,HAG,DK1,DK2,BLIND1,BLIND2,CGRENZ 05906
309 PRINT 1208,(EM21(MODIN1),MODIN1=1,7) 05906
310 C AUSDRUCKEN SEITE 1,NIVEAUDIAGRAMM DER KONSTANTEN 05906
311 DO 1022 MODIN3=1,7 05906
312 PRINT 1209,EM23(MODIN3),(SKIMI(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
313 PRINT 1210,(SIGK11(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
314 PRINT 1211,(SK2MI(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
315 PRINT 1212,(SIGK21(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
316 1022 PRINT 1213,(CSMI(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
317 C 05906
318 C AUSDRUCKEN SEITE 2,UEBERSCHRIFTEN 05906
319 PRINT 1201,NUMM1,NUMM2,NUMM3,KOAT1,KOAT2,KOAT3 05906
320 PRINT 1202 05906
321 PRINT 1214,LAUF,EM22(MODIN2) 05906
322 PRINT 1204 05906
323 PRINT 1205,ISUB1,ISUB2,KIN1A,KIN1E,KIN2A,KIN2E,NG,MAXIN2,EM11,EM12 05901
324 1,EM13,EM31,EM32,EM33 05901
325 PRINT 1206 05906
326 PRINT 1207,CG,HAG,DK1,DK2,BLIND1,BLIND2,CGRENZ 05906
327 PRINT 1208,(EM21(MODIN1),MODIN1=1,7) 05906
328 C 05906
329 C AUSDRUCKEN SEITE 2, NIVEAUDIAGRAMM DER FEHLERGROSSEN 05906
330 DO 1023 MODIN3=1,7 05906
331 PRINT 1215,EM23(MODIN3),(FEHL11(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
332 PRINT 1216,(FEHL21(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
333 PRINT 1217,(FEHL31(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
334 PRINT 1218,(FEHL41(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
335 1023 PRINT 1219,(SFQCS1(MODIN1,MODIN3),MODIN1=1,7) 05906
336 C 05901
337 C PROGRAMMTEIL ZUR AUFSUCHUNG DER KLEINSTEN WERTE DER FEHLERGROSSEN 05901
338 DIE MINIMA WERDEN MIT MODIN2 INDIZIERT,GLEICHZEITIG WERDEN DIE 05901
339 C ZUGEHÖRIGEN WERTE VON EM21 UND EM23 FESTGEHALTEN 05901
340 C 05901
341 F1MIN(MODIN2)=FEHL11(1,1) 05901
342 F2MIN(MODIN2)=FEHL21(1,1) 05901
343 F3MIN(MODIN2)=FEHL31(1,1) 05901
344 F4MIN(MODIN2)=FEHL41(1,1) 05901
345 FCMIN(MODIN2)=SFQCS1(1,1) 05901
346 EMF1(MODIN2)=EM21(1) 05901
347 EMF3(MODIN2)=EM23(1) 05901
348 EMF2(MODIN2)=EM21(1) 05901
349 EMF2(MODIN2)=EM23(1) 05901
350 EMF3(MODIN2)=EM21(1) 05901
351 EMF4(MODIN2)=EM23(1) 05901
352 EMF4(MODIN2)=EM21(1) 05901
353 EMF4(MODIN2)=EM23(1) 05901
354 EM1FC(MODIN2)=EM21(1) 05901
355 EM3FC(MODIN2)=EM23(1) 05901
356 C 05901
357 DO 1040 MODIN3=1,7 05901
358 DO 1040 MODIN1=1,7 05901
359 IF(F1MIN(MODIN2)-FEHL11(MODIN1,MODIN3))1032,1032,1031 05901
360 F1MIN(MODIN2)=FEHL11(MODIN1,MODIN3) 05901
361 EMF1(MODIN2)=EM21(MODIN1) 05901
362 EM3F1(MODIN2)=EM23(MODIN3) 05901
363 1032 IF(F2MIN(MODIN2)-FEHL21(MODIN1,MODIN3))1034,1034,1033 05901
364 1033 F2MIN(MODIN2)=FEHL21(MODIN1,MODIN3) 05901
365 EMF2(MODIN2)=EM21(MODIN1) 05901
```

```

366 EM3F2(MODIN2)=EM23(MODIN3)
367 IF(F3MIN(MODIN2)-FEHL31(MODIN1,MODIN3))1036,1036,1035
368 F3MIN(MODIN2)=FEHL31(MODIN1,MODIN3)
369 EM1F3(MODIN2)=EM21(MODIN1)
370 EM3F3(MODIN2)=EM23(MODIN3)
371 IF(F4MIN(MODIN2)-FEHL41(MODIN1,MODIN3))1038,1038,1037
372 EM1F4(MODIN2)=EM21(MODIN1)
373 EM3F4(MODIN2)=EM23(MODIN3)
374 F4MIN(MODIN2)=FEHL41(MODIN1,MODIN3)
375 IF(F5MIN(MODIN2)-SFQCSI(MODIN1,MODIN3))1040,1040,1039
376 F5MIN(MODIN2)=SFQCSI(MODIN1,MODIN3)
377 EM1F5(MODIN2)=EM21(MODIN1)
378 EM3F5(MODIN2)=EM23(MODIN3)
379 CONTINUE
380 LAUF=LAUF+1
381 C
382 C
383 C
384 C
385 C
386 C
387 C
388 C
389 C
390 C
391 C
392 C
393 C
394 C
395 C
396 C
397 C
398 C
399 C
400 C
401 C
402 C
403 C
404 C
405 C
406 C
407 C
408 C
409 C
410 C
411 C
412 C
413 C
414 C
415 C
416 C
417 C
418 C
419 C
420 C
421 C
422 C
423 C
424 C
425 C
426 C
1034 EM3F2(MODIN2)=EM23(MODIN3)
1035 F3MIN(MODIN2)=FEHL31(MODIN1,MODIN3)
1036 EM1F3(MODIN2)=EM21(MODIN1)
1037 EM3F3(MODIN2)=EM23(MODIN3)
1038 IF(F4MIN(MODIN2)-FEHL41(MODIN1,MODIN3))1038,1038,1037
1039 EM1F4(MODIN2)=EM21(MODIN1)
1040 F4MIN(MODIN2)=FEHL41(MODIN1,MODIN3)
1041 IF(F5MIN(MODIN2)-SFQCSI(MODIN1,MODIN3))1040,1040,1039
1042 F5MIN(MODIN2)=SFQCSI(MODIN1,MODIN3)
1043 EM1F5(MODIN2)=EM21(MODIN1)
1044 EM3F5(MODIN2)=EM23(MODIN3)
1045 CONTINUE
1046 LAUF=LAUF+1
1047 C
1048 C
1049 C
1050 C
1051 C
1052 C
1053 C
1054 C
1055 C
1056 C
1057 C
1058 C
1059 C
1060 C
1061 C
1062 C
1063 C
1064 C
1065 C
1066 C
1067 C
1068 C
1069 C
1070 C
1071 C
1072 C
1073 C
1074 C
1075 C
1076 C
1077 C
1078 C
1079 C
1080 C
1081 C
1082 C
1083 C
1084 C
1085 C
1086 C
1087 C
1088 C
1089 C
1090 C
1091 C
1092 C
1093 C
1094 C
1095 C
1096 C
1097 C
1098 C
1099 C
1100 C
1101 C
1102 C
1103 C
1104 C
1105 C
1106 C
1107 C
1108 C
1109 C
1110 C
1111 C
1112 C
1113 C
1114 C
1115 C
1116 C
1117 C
1118 C
1119 C
1120 C
1121 C
1122 C
1123 C
1124 C
1125 C
1126 C
1127 C
1128 C
1129 C
1130 C
1131 C
1132 C
1133 C
1134 C
1135 C
1136 C
1137 C
1138 C
1139 C
1140 C
1141 C
1142 C
1143 C
1144 C
1145 C
1146 C
1147 C
1148 C
1149 C
1150 C
1151 C
1152 C
1153 C
1154 C
1155 C
1156 C
1157 C
1158 C
1159 C
1160 C
1161 C
1162 C
1163 C
1164 C
1165 C
1166 C
1167 C
1168 C
1169 C
1170 C
1171 C
1172 C
1173 C
1174 C
1175 C
1176 C
1177 C
1178 C
1179 C
1180 C
1181 C
1182 C
1183 C
1184 C
1185 C
1186 C
1187 C
1188 C
1189 C
1190 C
1191 C
1192 C
1193 C
1194 C
1195 C
1196 C
1197 C
1198 C
1199 C
1200 C
1201 C
1202 C
1203 C
1204 C
1205 C
1206 C
1207 C
1208 C
1209 C
1210 C
1211 C
1212 C
1213 C
1214 C
1215 C
1216 C
1217 C
1218 C
1219 C
1220 C
1221 C
1222 C
1223 C
1224 C
1225 C
1226 C
1227 C
1228 C
1229 C
1230 C
1231 C
1232 C
1233 C
1234 C
1235 C
1236 C
1237 C
1238 C
1239 C
1240 C
1241 C
1242 C
1243 C
1244 C
1245 C
1246 C
1247 C
1248 C
1249 C
1250 C
1251 C
1252 C
1253 C
1254 C
1255 C
1256 C
1257 C
1258 C
1259 C
1260 C
1261 C
1262 C
1263 C
1264 C
1265 C
1266 C
1267 C
1268 C
1269 C
1270 C
1271 C
1272 C
1273 C
1274 C
1275 C
1276 C
1277 C
1278 C
1279 C
1280 C
1281 C
1282 C
1283 C
1284 C
1285 C
1286 C
1287 C
1288 C
1289 C
1290 C
1291 C
1292 C
1293 C
1294 C
1295 C
1296 C
1297 C
1298 C
1299 C
1300 C
1301 C
1302 C
1303 C
1304 C
1305 C
1306 C
1307 C
1308 C
1309 C
1310 C
1311 C
1312 C
1313 C
1314 C
1315 C
1316 C
1317 C
1318 C
1319 C
1320 C
1321 C
1322 C
1323 C
1324 C
1325 C
1326 C
1327 C
1328 C
1329 C
1330 C
1331 C
1332 C
1333 C
1334 C
1335 C
1336 C
1337 C
1338 C
1339 C
1340 C
1341 C
1342 C
1343 C
1344 C
1345 C
1346 C
1347 C
1348 C
1349 C
1350 C
1351 C
1352 C
1353 C
1354 C
1355 C
1356 C
1357 C
1358 C
1359 C
1360 C
1361 C
1362 C
1363 C
1364 C
1365 C
1366 C
1367 C
1368 C
1369 C
1370 C
1371 C
1372 C
1373 C
1374 C
1375 C
1376 C
1377 C
1378 C
1379 C
1380 C
1381 C
1382 C
1383 C
1384 C
1385 C
1386 C
1387 C
1388 C
1389 C
1390 C
1391 C
1392 C
1393 C
1394 C
1395 C
1396 C
1397 C
1398 C
1399 C
1400 C
1401 C
1402 C
1403 C
1404 C
1405 C
1406 C
1407 C
1408 C
1409 C
1410 C
1411 C
1412 C
1413 C
1414 C
1415 C
1416 C
1417 C
1418 C
1419 C
1420 C
1421 C
1422 C
1423 C
1424 C
1425 C
1426 C
1427 C
1428 C
1429 C
1430 C
1431 C
1432 C
1433 C
1434 C
1435 C
1436 C
1437 C
1438 C
1439 C
1440 C
1441 C
1442 C
1443 C
1444 C
1445 C
1446 C
1447 C
1448 C
1449 C
1450 C
1451 C
1452 C
1453 C
1454 C
1455 C
1456 C
1457 C
1458 C
1459 C
1460 C
1461 C
1462 C
1463 C
1464 C
1465 C
1466 C
1467 C
1468 C
1469 C
1470 C
1471 C
1472 C
1473 C
1474 C
1475 C
1476 C
1477 C
1478 C
1479 C
1480 C
1481 C
1482 C
1483 C
1484 C
1485 C
1486 C
1487 C
1488 C
1489 C
1490 C
1491 C
1492 C
1493 C
1494 C
1495 C
1496 C
1497 C
1498 C
1499 C
1500 C
1501 C
1502 C
1503 C
1504 C
1505 C
1506 C
1507 C
1508 C
1509 C
1510 C
1511 C
1512 C
1513 C
1514 C
1515 C
1516 C
1517 C
1518 C
1519 C
1520 C
1521 C
1522 C
1523 C
1524 C
1525 C
1526 C
1527 C
1528 C
1529 C
1530 C
1531 C
1532 C
1533 C
1534 C
1535 C
1536 C
1537 C
1538 C
1539 C
1540 C
1541 C
1542 C
1543 C
1544 C
1545 C
1546 C
1547 C
1548 C
1549 C
1550 C
1551 C
1552 C
1553 C
1554 C
1555 C
1556 C
1557 C
1558 C
1559 C
1560 C
1561 C
1562 C
1563 C
1564 C
1565 C
1566 C
1567 C
1568 C
1569 C
1570 C
1571 C
1572 C
1573 C
1574 C
1575 C
1576 C
1577 C
1578 C
1579 C
1580 C
1581 C
1582 C
1583 C
1584 C
1585 C
1586 C
1587 C
1588 C
1589 C
1590 C
1591 C
1592 C
1593 C
1594 C
1595 C
1596 C
1597 C
1598 C
1599 C
1600 C
1601 C
1602 C
1603 C
1604 C
1605 C
1606 C
1607 C
1608 C
1609 C
1610 C
1611 C
1612 C
1613 C
1614 C
1615 C
1616 C
1617 C
1618 C
1619 C
1620 C
1621 C
1622 C
1623 C
1624 C
1625 C
1626 C
1627 C
1628 C
1629 C
1630 C
1631 C
1632 C
1633 C
1634 C
1635 C
1636 C
1637 C
1638 C
1639 C
1640 C
1641 C
1642 C
1643 C
1644 C
1645 C
1646 C
1647 C
1648 C
1649 C
1650 C
1651 C
1652 C
1653 C
1654 C
1655 C
1656 C
1657 C
1658 C
1659 C
1660 C
1661 C
1662 C
1663 C
1664 C
1665 C
1666 C
1667 C
1668 C
1669 C
1670 C
1671 C
1672 C
1673 C
1674 C
1675 C
1676 C
1677 C
1678 C
1679 C
1680 C
1681 C
1682 C
1683 C
1684 C
1685 C
1686 C
1687 C
1688 C
1689 C
1690 C
1691 C
1692 C
1693 C
1694 C
1695 C
1696 C
1697 C
1698 C
1699 C
1700 C
1701 C
1702 C
1703 C
1704 C
1705 C
1706 C
1707 C
1708 C
1709 C
1710 C
1711 C
1712 C
1713 C
1714 C
1715 C
1716 C
1717 C
1718 C
1719 C
1720 C
1721 C
1722 C
1723 C
1724 C
1725 C
1726 C
1727 C
1728 C
1729 C
1730 C
1731 C
1732 C
1733 C
1734 C
1735 C
1736 C
1737 C
1738 C
1739 C
1740 C
1741 C
1742 C
1743 C
1744 C
1745 C
1746 C
1747 C
1748 C
1749 C
1750 C
1751 C
1752 C
1753 C
1754 C
1755 C
1756 C
1757 C
1758 C
1759 C
1760 C
1761 C
1762 C
1763 C
1764 C
1765 C
1766 C
1767 C
1768 C
1769 C
1770 C
1771 C
1772 C
1773 C
1774 C
1775 C
1776 C
1777 C
1778 C
1779 C
1780 C
1781 C
1782 C
1783 C
1784 C
1785 C
1786 C
1787 C
1788 C
1789 C
1790 C
1791 C
1792 C
1793 C
1794 C
1795 C
1796 C
1797 C
1798 C
1799 C
1800 C
1801 C
1802 C
1803 C
1804 C
1805 C
1806 C
1807 C
1808 C
1809 C
1810 C
1811 C
1812 C
1813 C
1814 C
1815 C
1816 C
1817 C
1818 C
1819 C
1820 C
1821 C
1822 C
1823 C
1824 C
1825 C
1826 C
1827 C
1828 C
1829 C
1830 C
1831 C
1832 C
1833 C
1834 C
1835 C
1836 C
1837 C
1838 C
1839 C
1840 C
1841 C
1842 C
1843 C
1844 C
1845 C
1846 C
1847 C
1848 C
1849 C
1850 C
1851 C
1852 C
1853 C
1854 C
1855 C
1856 C
1857 C
1858 C
1859 C
1860 C
1861 C
1862 C
1863 C
1864 C
1865 C
1866 C
1867 C
1868 C
1869 C
1870 C
1871 C
1872 C
1873 C
1874 C
1875 C
1876 C
1877 C
1878 C
1879 C
1880 C
1881 C
1882 C
1883 C
1884 C
1885 C
1886 C
1887 C
1888 C
1889 C
1890 C
1891 C
1892 C
1893 C
1894 C
1895 C
1896 C
1897 C
1898 C
1899 C
1900 C
1901 C
1902 C
1903 C
1904 C
1905 C
1906 C
1907 C
1908 C
1909 C
1910 C
1911 C
1912 C
1913 C
1914 C
1915 C
1916 C
1917 C
1918 C
1919 C
1920 C
1921 C
1922 C
1923 C
1924 C
1925 C
1926 C
1927 C
1928 C
1929 C
1930 C
1931 C
1932 C
1933 C
1934 C
1935 C
1936 C
1937 C
1938 C
1939 C
1940 C
1941 C
1942 C
1943 C
1944 C
1945 C
1946 C
1947 C
1948 C
1949 C
1950 C
1951 C
1952 C
1953 C
1954 C
1955 C
1956 C
1957 C
1958 C
1959 C
1960 C
1961 C
1962 C
1963 C
1964 C
1965 C
1966 C
1967 C
1968 C
1969 C
1970 C
1971 C
1972 C
1973 C
1974 C
1975 C
1976 C
1977 C
1978 C
1979 C
1980 C
1981 C
1982 C
1983 C
1984 C
1985 C
1986 C
1987 C
1988 C
1989 C
1990 C
1991 C
1992 C
1993 C
1994 C
1995 C
1996 C
1997 C
1998 C
1999 C
2000 C

```



```
60 DD 2002 N=1,NG 05904
61 SK1(N)=-1. 05904
62 SK2(N)=-1. 05904
63 CONTINUE 05904
64 C 2 DO-SCHLEIFEN DIE SK1(N),SK2(N),SK1M UND SK2M BERECHNEN 05904
65 ZK1=0. 05904
66 ZK2=0. 05904
67 SUMK1=0. 05904
68 SUMK2=0. 05904
69 C BERECHNUNG VON SK1(N) FUER N = KINIA BIS KINLE UND WENN C1(N) UND 05904
70 C2(N) GROESSER ALS CGRENZ*CG, SONST BLEIBT SK1(N)=-1. 05904
71 DO 2005 N=KINIA,KINLE 05904
72 IF(C2(N)-CGRENZ*CG)2005,2003,2003 05904
73 2003 IF(C1(N)-CGRENZ*CG)2005,2004,2004 05904
74 2004 SK1(N)=C2(N)/(C1(N)*ANK(N)) 05904
75 ZK1=ZK1+1. 05904
76 SUMK1=SUMK1+SK1(N) 05904
77 CONTINUE 05904
78 C BERECHNUNG VON SK1M, IST KEIN SK1(N) BERECHNET,SO WIRD SK1M = -1. 05904
79 IF(ZK1)2007,2007,2008 05904
80 GO TO 2009 05904
81 SK1M=SUMK1/ZK1 05904
82 SK1M=SUMK1/ZK1 05904
83 C BERECHNUNG VON SK2(N) FUER N = KIN2A BIS KINZE UND WENN C2(N) UND 05904
84 C3(N) GROESSER ALS CGRENZ*CG,SONST BLEIBT SK2(N)=-1. 05904
85 DO 2012 N=KIN2A,KINZE 05904
86 IF(C2(N)-CGRENZ*CG)2012,2010,2010 05904
87 IF(C3(N)-CGRENZ*CG)2012,2011,2011 05904
88 SK2(N)=C3(N)/(C2(N)*ANK(N)) 05904
89 ZK2=ZK2+1. 05904
90 SUMK2=SUMK2+SK2(N) 05904
91 CONTINUE 05904
92 C BERECHNUNG VON SK2M, IST KEIN SK2(N) BERECHNET,SO WIRD SK2M = -1. 05904
93 IF(ZK2)2013,2013,2014 05904
94 GO TO 2015 05904
95 SK2M=SUMK2/ZK2 05904
96 GO TO 2015 05904
97 SK2M=SUMK2/ZK2 05904
98 C BERECHNUNG DES MITTLEREN QUADRATISCHEN FEHLERS DER KONSTANTEN. 05904
99 C WURDEN MENIGER ALS 2 WERTE EINER KONSTANTEN BERECHNET,SO WIRD 05904
100 DIESE GLEICH -1. GESETZT. 05904
101 SUMFK1=0. 05904
102 SUMFK2=0. 05904
103 DO 2019 N=1,NG 05904
104 IF(SK1(N))2017,2017,2016 05904
105 SUMFK1=SUMFK1+(SK1(N)-SK1M)**2 05904
106 IF(SK2(N))2019,2019,2018 05904
107 SUMFK2=SUMFK2+(SK2(N)-SK2M)**2 05904
108 CONTINUE 05904
109 IF(ZK1-1.)2020,2020,2021 05904
110 SIGK1=-1. 05904
111 GO TO 2022 05904
112 SIGK1=SQRT(SUMFK1/(ZK1*(ZK1-1.))) 05904
113 IF(ZK2-1.)2023,2023,2024 05904
114 SIGK2=-1. 05904
115 GO TO 2025 05904
116 SIGK2=SQRT(SUMFK2/(ZK2*(ZK2-1.))) 05904
117 RETURN 05904
118
```



```

1 C SUBROUTINE BEMFAK I PROGRAMMNUMMER 05903
2 C BERECHNUNG DER MESSWERTE UND DER FEHLERGROESSE AUS DEN KONSTANTEN
3 C
4 C DIESE SUBROUTINE DARF NUR MIT HAUPTPROGRAMMEN DER KLASSE
5 C PHOTOMETERPROG VERWENDET WERDEN
6 C
7 C DAS HAUPTPROGRAMM MUSS LIEFERN
8 C 1. DIE MESSWERTE E1(N),E2(N),E3(N) DER EXTINKTION
9 C 2. DIE PH-FUNKTION DES LIGANDEN FHJK(N)= ANK(N)/HAF(N)
10 C 3. DEN MAXIMALWERT NG DES INDEX N (ING DARF MAXIMAL 50 SEIN)
11 C 4. DIE STABILITAETSKONSTANTEN SK, DIE EXTINKTIONSMODULN EM UND
12 C DIE GESAMTKONZENTRATION VON METALL = CG UND LIGAND = HAG
13 C
14 C DIE SUBROUTINE LIEFERT
15 C 1. DIE BERECHNETEN EXTINKTIONEN E1B(N),E2B(N),E3B(N)
16 C 2. DIE BERECHNETEN KONZENTRATIONEN C1B(N),C2B(N),C3B(N),ANKB(N)
17 C 3. DIE FEHLERQUADRATSUMME FEHL1,FEHL2,FEHL3
18 C 4. FEHL4 DIE SUMME FEHL1+FEHL2+FEHL3
19 C
20 C SUBROUTINE BEMFAK(E1,E2,E3,FHJK,NG,CG,HAG,SK1,SK2,EM1,EM2,EM3,
21 C IEM21,EM22,EM23,EM31,EM32,EM33,E1B,E2B,E3B,C1B,C2B,C3B,ANKB,FEHL1,
22 C 2FEHL2,FEHL3,FEHL4)
23 C DIMENSION E1(50),E2(50),E3(50),FHJK(50),E1B(50),E2B(50),E3B(50),
24 C I(C1B(50),C2B(50),C3B(50),ANKB(50)
25 C
26 C DO SCHLEIFE ZUR BERECHNUNG DER KONZENTRATION UND EXTINKTIONEN
27 C DO 3110 N=1,NG
28 C
29 C NAEHERUNGSWERTE FUER DIE ERSTE ITERATIONSTUFE
30 C C2I=0.5*(E2(N)/EM22)
31 C C3I=0.5*(E3(N)/EM33)
32 C DIFALT=ABSF(2.*CG/(HAG-2.*CG))
33 C ITERATION ZUR BERECHNUNG VON ANKB(N)
34 C IT=0
35 C ANKI=(HAG-C2I-2.*C3I)*FHJK(N)
36 C C1I=CG/(1.+SKI*ANKI+SK1*SK2*(ANKI**2))
37 C C2I=C2I*SK2*ANKI
38 C IT=IT+1
39 C ANKALT=ANKI
40 C ANKI=(HAG-C2I-2.*C3I)*FHJK(N)
41 C DIFZ=ABSF((ANKI-ANKALT)/ANKI)
42 C ABFRAGE AUF AUSREICHENDE KONVERGENZ DER ANKI(IT)
43 C IF(DIFZ<0.0013109,3109,3102)
44 C ABFRAGE OB DIE ITERATION KONVERGIERT
45 C 3102 IF(DIFZ<DIFALT)3106,3103,3103
46 C FEHLERNACHRICHT
47 C 3103 PRINT 3104
48 C 3104 FORMAT(I1H,26HITERATION NICHT KONVERGENT)
49 C PRINT 3105,N,EM21,EM22,EM23,IT,ANKI,DIFZ,DIFALT
50 C 3105 FORMAT(I1HJ,2HN=,I2,2X,5HEM21=,F9.2,2X,5HEM22=,F9.2
51 C 1,2X,3HIT=,I2,2X,5HANKI=,E9.3,2X,5HDIFZ=,F6.3,2X,7HDIFALT=,F6.3)
52 C CALL EXIT
53 C KONTROLLE DER ANZAHL DER ITERATIONSTUFEN
54 C 3106 DIFALT=DIFZ
55 C IF(IT<20)3101,3101,3107
56 C FEHLERNACHRICHT
57 C 3107 PRINT 3108
58 C 3108 FORMAT(I1HJ,63HNACH 20 ITERATIONEN NOCH KEINE AUSREICHENDE KONVERGE
59 C INZ DER ANKI)
60 C PRINT 3105,N,EM21,EM22,EM23,IT,ANKI,DIFZ,DIFALT

```


5. Beispiel:

Berechnung der Stabilitätskonstanten des Systems
 Np^{V} -8-Hydroxychinolin-5-sulfonsäure - 0,1 M NH_4ClO_4
 mit PHOTOMETERPROG 4

05901 PHOTOMETERPROG 4
 BERECHNUNG EINES CHELATGLEICHGICHTES AUS MESSUNGEN DER EXKTIKTION UND DES PH-WERTES DURCH FEHLERNEIVEAUDIAGRAMME
 SEITE 1 LAUF 8 NIVEAUDIAGRAMM PER KONSTANTEN. HERECHNET MIT EM22 = 384,00

VERSUCH 12/ 64- 30
 DATUM 2. 9. 64

KONTROLLZAHLEN	PHOTBE	BEMFAK	KINIA	KINIE	KINZA	KINZE	NG	MAXINZ	EM11	EM12	EM13	EM31	EM32	EM33
5904	5903	HAG	2	13	9	22	25	11	384,00	25,00	5,00	6,00	46,00	382,00
CG	CG	DK1	DK2	DK1	DK2	DK1	BLINDI	BLINDZ	CORENZ					
2.390E-03	1.000E-02	7.345E-05	2.965E-09	5.000E 05	5.000E 05	5.000E 04	U.050000							
EM21 =	28.0000	30.0000	32.0000	34.0000	36.0000	38.0000	40.0000							
EM23 = 44.00	SKIM = 1.299E 06	1.313E 06	1.328E 06	1.344E 06	1.360E 06	1.377E 06	1.395E 06	1.395E 06						
	SIGK1 = 2.204E 04	2.014E 04	1.874E 04	1.816E 04	1.868E 04	2.047E 04	2.350E 04	2.350E 04						
	SK2M = 8.861E 04	8.859E 04	8.857E 04	8.855E 04	8.854E 04	8.852E 04	8.850E 04	8.850E 04						
	SIGK2 = 1.036E 03	1.038E 03	1.039E 03	1.041E 03	1.042E 03	1.044E 03	1.045E 03	1.045E 03						
	CSM = 2.409E+03	2.405E+03	2.400E+03	2.396E+03	2.392E+03	2.387E+03	2.383E+03	2.383E+03						
EM23 = 46.00	SKIM = 1.298E 06	1.312E 06	1.327E 06	1.343E 06	1.359E 06	1.376E 06	1.394E 06	1.394E 06						
	SIGK1 = 2.220E 04	2.028E 04	1.885E 04	1.823E 04	1.869E 04	2.043E 04	2.342E 04	2.342E 04						
	SK2M = 8.743E 04	8.741E 04	8.739E 04	8.737E 04	8.735E 04	8.733E 04	8.732E 04	8.732E 04						
	SIGK2 = 7.909E 02	7.922E 02	7.934E 02	7.947E 02	7.960E 02	7.973E 02	7.986E 02	7.986E 02						
	CSM = 2.405E+03	2.401E+03	2.396E+03	2.392E+03	2.388E+03	2.383E+03	2.379E+03	2.379E+03						
EM23 = 48.00	SKIM = 1.296E 06	1.311E 06	1.326E 06	1.341E 06	1.358E 06	1.375E 06	1.393E 06	1.393E 06						
	SIGK1 = 2.235E 04	2.042E 04	1.897E 04	1.830E 04	1.872E 04	2.040E 04	2.334E 04	2.334E 04						
	SK2M = 8.625E 04	8.623E 04	8.621E 04	8.620E 04	8.618E 04	8.616E 04	8.614E 04	8.614E 04						
	SIGK2 = 6.118E 02	6.126E 02	6.134E 02	6.141E 02	6.149E 02	6.157E 02	6.165E 02	6.165E 02						
	CSM = 2.401E+03	2.396E+03	2.392E+03	2.388E+03	2.384E+03	2.379E+03	2.375E+03	2.375E+03						
EM23 = 50.00	SKIM = 1.295E 06	1.310E 06	1.325E 06	1.340E 06	1.357E 06	1.374E 06	1.392E 06	1.392E 06						
	SIGK1 = 2.251E 04	2.056E 04	1.908E 04	1.837E 04	1.874E 04	2.037E 04	2.326E 04	2.326E 04						
	SK2M = 8.508E 04	8.506E 04	8.504E 04	8.502E 04	8.500E 04	8.498E 04	8.496E 04	8.496E 04						
	SIGK2 = 5.637E 02	5.636E 02	5.635E 02	5.634E 02	5.634E 02	5.633E 02	5.632E 02	5.632E 02						
	CSM = 2.397E+03	2.392E+03	2.388E+03	2.384E+03	2.379E+03	2.375E+03	2.371E+03	2.371E+03						
EM23 = 52.00	SKIM = 1.294E 06	1.308E 06	1.323E 06	1.339E 06	1.355E 06	1.372E 06	1.390E 06	1.390E 06						
	SIGK1 = 2.267E 04	2.070E 04	1.920E 04	1.845E 04	1.876E 04	2.034E 04	2.319E 04	2.319E 04						
	SK2M = 8.391E 04	8.389E 04	8.387E 04	8.385E 04	8.383E 04	8.381E 04	8.379E 04	8.379E 04						
	SIGK2 = 6.736E 02	6.728E 02	6.719E 02	6.711E 02	6.703E 02	6.694E 02	6.686E 02	6.686E 02						
	CSM = 2.393E+03	2.388E+03	2.384E+03	2.380E+03	2.375E+03	2.371E+03	2.367E+03	2.367E+03						
EM23 = 54.00	SKIM = 1.293E 06	1.307E 06	1.322E 06	1.338E 06	1.354E 06	1.371E 06	1.389E 06	1.389E 06						
	SIGK1 = 2.283E 04	2.084E 04	1.931E 04	1.853E 04	1.879E 04	2.032E 04	2.312E 04	2.312E 04						
	SK2M = 8.274E 04	8.273E 04	8.271E 04	8.269E 04	8.267E 04	8.265E 04	8.263E 04	8.263E 04						
	SIGK2 = 8.832E 02	8.820E 02	8.808E 02	8.796E 02	8.784E 02	8.772E 02	8.760E 02	8.760E 02						
	CSM = 2.388E+03	2.384E+03	2.380E+03	2.375E+03	2.371E+03	2.367E+03	2.362E+03	2.362E+03						
EM23 = 56.00	SKIM = 1.292E 06	1.306E 06	1.321E 06	1.337E 06	1.353E 06	1.370E 06	1.388E 06	1.388E 06						
	SIGK1 = 2.298E 04	2.099E 04	1.943E 04	1.861E 04	1.883E 04	2.030E 04	2.305E 04	2.305E 04						
	SK2M = 8.158E 04	8.156E 04	8.154E 04	8.153E 04	8.151E 04	8.149E 04	8.147E 04	8.147E 04						
	SIGK2 = 1.138E 03	1.136E 03	1.135E 03	1.134E 03	1.132E 03	1.131E 03	1.130E 03	1.130E 03						
	CSM = 2.384E+03	2.380E+03	2.376E+03	2.371E+03	2.367E+03	2.363E+03	2.358E+03	2.358E+03						

05901 PHOTOMETERPROG 4
 BERECHNUNG EINES CHELATGLEICHWICHTIGES AUS MESSUNGEN DER EXTINKTION UND
 SEITE 2 LAUF 8 NIVEAULIAGRAPH PER FEHLERGRADDESSEN. BERECHNET MIT EM22 = 384,00
 VERSUCH 127 64- 30 DATUM 2. 9. 64
 DES PH-NI-KTES DURCH FEHLERNIVEAUDIAGRAMME

KONTROLLZAHLEN	PHOTHE	HEPFAK	KINJA	KINZA	KINZE	NG	MAXINZ	MODUL	EM11	EM12	EM13	EM31	EM32	EM33
5704	5903	13	22	25	25	11	11	384,00	25,00	5,00	6,00	46,00	382,00	
CC	IIAG	DK1	UK2	UKZ	UKZ	UKZ	UKZ	HLINGZ	CGRENZ					
2.390E-03	1.000E-02	7.345E-05	2.965E-09	5.000E-05	5.000E-05	5.000E-05	5.000E-05	5.000E-04	0.05000					
EM21 =	28.0000	30.0000	32.0000	34.0000	36.0000	38.0000	40.0000							
EM23 = 44.00	FELH11 = 2.089E-03	1.919E-03	1.831E-03	1.823E-03	1.831E-03	1.823E-03	1.831E-03	1.831E-03	2.043E-03	2.269E-03	2.269E-03			
	FELH21 = 2.017E-03	1.651E-03	1.747E-03	1.710E-03	1.747E-03	1.710E-03	1.747E-03	1.747E-03	1.866E-03	2.077E-03	2.077E-03			
	FELH31 = 3.649E-04	3.481E-04	3.334E-04	3.208E-04	3.334E-04	3.208E-04	3.334E-04	3.105E-04	3.029E-04	2.982E-04	2.982E-04			
	FELH41 = 4.470E-03	4.118E-03	3.911E-03	3.854E-03	3.911E-03	3.854E-03	3.911E-03	3.952E-03	4.213E-03	4.645E-03	4.645E-03			
	SFQCSI = 1.104E-08	7.001E-09	4.221E-09	2.076E-09	4.221E-09	2.076E-09	4.221E-09	2.431E-09	3.427E-09	5.687E-09	5.687E-09			
EM23 = 46.00	FELH11 = 2.041E-03	1.887E-03	1.813E-03	1.821E-03	1.813E-03	1.821E-03	1.813E-03	1.808E-03	2.074E-03	2.317E-03	2.317E-03			
	FELH21 = 1.905E-03	1.756E-03	1.670E-03	1.651E-03	1.670E-03	1.651E-03	1.670E-03	1.708E-03	1.847E-03	2.076E-03	2.076E-03			
	FELH31 = 3.125E-04	3.077E-04	3.057E-04	3.062E-04	3.057E-04	3.062E-04	3.057E-04	3.076E-04	3.162E-04	3.262E-04	3.262E-04			
	FELH41 = 4.259E-03	3.951E-03	3.789E-03	3.779E-03	3.789E-03	3.779E-03	3.789E-03	3.826E-03	4.237E-03	4.720E-03	4.720E-03			
	SFQCSI = 7.161E-09	4.321E-09	2.739E-09	2.415E-09	4.321E-09	2.415E-09	4.321E-09	3.354E-09	5.558E-09	9.029E-09	9.029E-09			
EM23 == 48.00	FELH11 = 1.998E-03	1.858E-03	1.801E-03	1.824E-03	1.801E-03	1.824E-03	1.801E-03	1.828E-03	2.110E-03	2.371E-03	2.371E-03			
	FELH21 = 1.876E-03	1.744E-03	1.675E-03	1.675E-03	1.675E-03	1.675E-03	1.675E-03	1.751E-03	1.909E-03	2.159E-03	2.159E-03			
	FELH31 = 3.314E-04	3.396E-04	3.507E-04	3.650E-04	3.507E-04	3.650E-04	3.507E-04	3.428E-04	4.043E-04	4.299E-04	4.299E-04			
	FELH41 = 4.205E-03	3.942E-03	3.837E-03	3.864E-03	3.837E-03	3.864E-03	3.837E-03	4.061E-03	4.424E-03	4.960E-03	4.960E-03			
	SFQCSI = 4.425E-09	2.784E-09	2.403E-09	3.225E-09	2.403E-09	3.225E-09	2.403E-09	5.432E-09	8.846E-09	1.355E-08	1.355E-08			
EM23 = 50.00	FELH11 = 1.959E-03	1.834E-03	1.792E-03	1.832E-03	1.792E-03	1.832E-03	1.792E-03	1.952E-03	2.152E-03	2.431E-03	2.431E-03			
	FELH21 = 1.931E-03	1.817E-03	1.766E-03	1.785E-03	1.766E-03	1.785E-03	1.766E-03	1.879E-03	2.058E-03	2.328E-03	2.328E-03			
	FELH31 = 4.254E-04	4.441E-04	4.692E-04	4.980E-04	4.692E-04	4.980E-04	4.692E-04	5.308E-04	5.680E-04	6.099E-04	6.099E-04			
	FELH41 = 4.312E-03	4.095E-03	4.027E-03	4.115E-03	4.095E-03	4.115E-03	4.095E-03	4.362E-03	4.778E-03	5.368E-03	5.368E-03			
	SFQCSI = 2.832E-09	2.393E-09	3.217E-09	5.308E-09	2.393E-09	5.308E-09	2.393E-09	8.667E-09	1.330E-08	1.920E-08	1.920E-08			
EM23 = 52.00	FELH11 = 1.924E-03	1.815E-03	1.789E-03	1.845E-03	1.789E-03	1.845E-03	1.789E-03	1.982E-03	2.179E-03	2.496E-03	2.496E-03			
	FELH21 = 2.074E-03	1.977E-03	1.945E-03	1.982E-03	1.945E-03	1.982E-03	1.945E-03	2.097E-03	2.295E-03	2.586E-03	2.586E-03			
	FELH31 = 5.803E-04	6.221E-04	6.619E-04	7.058E-04	6.619E-04	7.058E-04	6.619E-04	7.544E-04	8.080E-04	8.671E-04	8.671E-04			
	FELH41 = 4.584E-03	4.414E-03	4.395E-03	4.533E-03	4.395E-03	4.533E-03	4.395E-03	4.633E-03	5.302E-03	5.949E-03	5.949E-03			
	SFQCSI = 2.395E-09	3.193E-09	5.186E-09	8.490E-09	3.193E-09	8.490E-09	3.193E-09	1.306E-08	1.891E-08	2.604E-08	2.604E-08			
EM23 = 54.00	FELH11 = 1.893E-03	1.799E-03	1.789E-03	1.862E-03	1.789E-03	1.862E-03	1.789E-03	2.017E-03	2.252E-03	2.566E-03	2.566E-03			
	FELH21 = 2.307E-03	2.228E-03	2.215E-03	2.272E-03	2.215E-03	2.272E-03	2.215E-03	2.406E-03	2.625E-03	2.937E-03	2.937E-03			
	FELH31 = 8.237E-04	8.743E-04	9.294E-04	9.893E-04	9.294E-04	9.893E-04	9.294E-04	1.054E-03	1.125E-03	1.202E-03	1.202E-03			
	FELH41 = 5.023E-03	4.902E-03	4.933E-03	5.123E-03	4.933E-03	5.123E-03	4.933E-03	5.477E-03	6.002E-03	6.706E-03	6.706E-03			
	SFQCSI = 3.070E-09	5.004E-09	8.315E-09	1.263E-08	5.004E-09	1.263E-08	8.315E-09	1.863E-08	2.570E-08	3.405E-08	3.405E-08			
EM23 = 56.00	FELH11 = 1.866E-03	1.769E-03	1.795E-03	1.885E-03	1.795E-03	1.885E-03	1.795E-03	2.057E-03	2.310E-03	2.643E-03	2.643E-03			
	FELH21 = 2.633E-03	2.573E-03	2.578E-03	2.655E-03	2.578E-03	2.655E-03	2.578E-03	2.809E-03	3.049E-03	3.383E-03	3.383E-03			
	FELH31 = 1.135E-03	1.202E-03	1.273E-03	1.349E-03	1.273E-03	1.349E-03	1.273E-03	1.432E-03	1.520E-03	1.616E-03	1.616E-03			
	FELH41 = 5.635E-03	5.563E-03	5.646E-03	5.809E-03	5.646E-03	5.809E-03	5.646E-03	6.278E-03	6.879E-03	7.642E-03	7.642E-03			
	SFQCSI = 4.991E-09	8.142E-09	1.261E-08	1.835E-08	8.142E-09	1.835E-08	1.261E-08	2.537E-08	3.366E-08	4.325E-08	4.325E-08			

05901 PHOTOMETERPROG 4
 BERECHNUNG EINES CHELATGLEICHMICHTES AUS MESSUNGEN DER EXTINKTION UND DES pH-WERTES DURCH FEHLERNIVEAUDIAGRAMME
 SEITE 3

VERSUCH 127 64- 30
 DATUM 2. 9. 64

KONTROLLZAHLEN	PHOTHE	HMFAK	KINIA	KINIE	KINZA	KINZE	NG	MAXIN2	MODUL	EM11	EM12	EM13	EM31	EM32	EM33
5904	5903	2	13	9	22	25	11	384.00	25.00	5.00	5.00	6.00	46.00	382.00	
CG	HAG	DK1	DK2	BLIND1	BLIND2	CGRENZ	5.000E 05	5.000E 04	0.05000						
2.390E-03	1.000E-02	7.345E-05	2.965E-09												

EM22	EM21	EM23	MINFEHL1	EM21	EM23	MINFEHL2	EM21	EM23	MINFEHL3	EM21	EM23	MINFEHL4	EM21	EM23	MINFEHL5
364.00	32.00	56.00	3.046E-03	40.00	44.00	1.261E-03	40.00	44.00	1.374E-03	38.00	52.00	7.211E-03	40.00	56.00	2.685E-09
368.00	32.00	56.00	2.589E-03	40.00	44.00	1.182E-03	40.00	44.00	1.015E-03	38.00	50.00	5.877E-03	38.00	56.00	2.382E-09
372.00	32.00	56.00	2.240E-03	40.00	44.00	1.218E-03	40.00	44.00	7.315E-04	36.00	50.00	4.688E-03	40.00	50.00	2.380E-09
376.00	32.00	56.00	1.995E-03	38.00	44.00	1.315E-03	40.00	44.00	5.192E-04	36.00	48.00	4.221E-03	40.00	46.00	2.412E-09
378.00	32.00	56.00	1.909E-03	36.00	44.00	1.381E-03	40.00	44.00	4.391E-04	34.00	48.00	5.005E-03	40.00	44.00	2.442E-09
380.00	32.00	56.00	1.846E-03	36.00	44.00	1.461E-03	40.00	44.00	3.758E-04	34.00	48.00	3.857E-03	28.00	56.00	2.429E-09
382.00	32.00	56.00	1.809E-03	34.00	44.00	1.549E-03	40.00	44.00	3.289E-04	34.00	46.00	3.779E-03	28.00	56.00	2.402E-09
384.00	32.00	56.00	1.779E-03	34.00	46.00	1.651E-03	40.00	46.00	2.733E-04	32.00	46.00	3.959E-03	30.00	46.00	2.378E-09
388.00	32.00	44.00	1.720E-03	32.00	44.00	1.893E-03	28.00	46.00	2.978E-04	30.00	44.00	4.377E-03	28.00	44.00	2.413E-09
392.00	32.00	44.00	1.820E-03	28.00	46.00	2.163E-03	28.00	46.00	2.811E-04	30.00	44.00	5.063E-03	28.00	44.00	3.695E-09
396.00	32.00	44.00	1.745E-03	28.00	46.00	2.578E-03	28.00	46.00	3.811E-04	30.00	44.00	5.063E-03	28.00	44.00	3.695E-09

05901 PHOTOMETRPROG 4
 VERSUCH 12/ 64- 30 DATUM 2. 9. 64
 BERECHNUNG EINES CHELATGLEICHWICHTES AUS MESSUNGEN DER EXTINKTION UND DES PH-WERTES DURCH FEHLERKIVAUDIAGRAMME

BERECHNUNG DES CHELATGLEICHWICHTES MIT DEN EXTINKTIONSMODULN DIE EIN MINIMUM DER FEHLERQUADRATSUMME 4 ERGEBEN
 SEITE 4. AUS DEN PESSIMESTEN FERRECHNETF GANZESSEN
 VERWENDETE SUBROUTINEN PHOTRE = 5904 HEMFAK = 5903
 SKI WURDE GERECHNET VON: MESSWERT N = 2 bis N = 13 UND SK2 VON N = 9 BIS N = 22
 DER MINIMALE ANTEIL EINER SPLICHS ZUR RECHNUNG EINER STABILITÄTSKONSTANTE WAR 0.0506*CG
 DEM PROGRAMM WURDEN ZUM AUFSUCHEN DER BESTEN KOMBINATION DIE FOLGENDEN EXTINKTIONSMODULN VORGEZEHN
 EM21 = 28.00 30.00 32.00 34.00 36.00 38.00 40.00
 EM22 = 364.00 368.00 372.00 376.00 380.00 384.00 388.00 392.00 396.00
 EM23 = 44.00 46.00 48.00 50.00 52.00 54.00 56.00

EXTINKTIONSMODULN UND KONSTANTEN DIESER RECHNUNG

EM11	EM12	EM13	EM21	EM22	EM23	EM31	EM32	EM33	DK1	DK2	DK3	HAG	CG	NG
364.000	25.000	5.000	34.000	384.000	46.000	6.000	46.000	382.000	7.345E-05	2.965E-09	1.000E-02	2.390E-03	25	

N	E1	I2	E3	PH	C1	C2	C3	C5	MJK	ANK	SKI	SK2
1	0.9140	0.0710	0.0100	3.6600	2.378E-03	3.115E-05	-8.692E-06	2.400E-03	2.188E-04	3.402E-08	-1.000E 00	-1.000E 00
2	0.7850	0.2030	0.0200	4.0700	2.009E-03	3.980E-04	-7.197E-07	2.406E-03	8.511E-05	1.550E-07	1.278E 06	-1.000E 00
3	0.7100	0.2710	0.0370	4.1850	1.797E-03	5.865E-04	2.479E-06	2.388E-03	6.531E-05	2.260E-07	1.449E 06	-1.000E 00
4	0.6170	0.3610	0.0530	4.3500	1.532E-03	8.382E-04	1.775E-05	2.388E-03	4.467E-05	3.767E-07	1.452E 06	-1.000E 00
5	0.5280	0.4420	0.0720	4.5100	1.280E-03	1.062E-03	4.379E-05	2.386E-03	3.070E-05	5.976E-07	1.389E 06	-1.000E 00
6	0.4530	0.5050	0.0980	4.6500	1.069E-03	1.234E-03	9.392E-05	2.397E-03	2.239E-05	8.706E-07	1.326E 06	-1.000E 00
7	0.4020	0.5400	0.1160	4.7350	9.270E-04	1.330E-03	1.314E-04	2.389E-03	1.841E-05	1.083E-06	1.325E 06	-1.000E 00
8	0.3820	0.5590	0.1220	4.7900	8.702E-04	1.382E-03	1.415E-04	2.394E-03	1.622E-05	1.248E-06	1.273E 06	-1.000E 00
9	0.3550	0.5730	0.1380	4.8300	7.960E-04	1.419E-03	1.800E-04	2.395E-03	1.479E-05	1.372E-06	1.299E 06	9.249E 04
10	0.2880	0.6080	0.1710	4.9700	6.120E-04	1.513E-03	2.575E-04	2.382E-03	1.072E-05	1.925E-06	1.284E 06	8.844E 04
11	0.2200	0.6300	0.2220	5.1300	4.282E-04	1.566E-03	3.869E-04	2.382E-03	7.413E-06	2.782E-06	1.315E 06	8.880E 04
12	0.1660	0.6270	0.2830	5.3000	2.666E-04	1.548E-03	5.507E-04	2.385E-03	5.012E-06	4.068E-06	1.328E 06	8.742E 04
13	0.1360	0.6080	0.3310	5.4000	2.118E-04	1.488E-03	6.846E-04	2.375E-03	3.981E-06	5.043E-06	1.393E 06	8.9126E 04
14	0.1080	0.5390	0.3870	5.6550	1.605E-04	1.279E-03	9.887E-04	2.368E-03	2.213E-06	8.760E-06	-1.000E 00	8.827E 04
15	0.0880	0.4960	0.5040	5.8000	6.760E-05	1.146E-03	1.181E-03	2.394E-03	1.585E-06	1.187E-05	-1.000E 00	8.680E 04
16	0.0560	0.4420	0.5730	5.9400	3.720E-05	9.832E-04	1.381E-03	2.401E-03	1.148E-06	1.586E-05	-1.000E 00	8.856E 04
17	0.0500	0.4110	0.6080	6.0300	2.816E-05	8.907E-04	1.484E-03	2.403E-03	9.333E-07	1.921E-05	-1.000E 00	8.675E 04
18	0.0400	0.3420	0.6800	6.2300	1.689E-05	6.862E-04	1.697E-03	2.400E-03	5.888E-07	2.942E-05	-1.000E 00	8.407E 04
20	0.0300	0.2830	0.7400	6.4100	3.480E-06	5.121E-04	1.875E-03	2.391E-03	3.890E-07	4.317E-05	-1.000E 00	8.485E 04
21	0.0230	0.2400	0.7860	6.5750	-5.569E-06	3.844E-04	2.011E-03	2.390E-03	2.661E-07	6.142E-05	-1.000E 00	8.519E 04
22	0.0210	0.1970	0.8310	6.8150	-1.507E-06	2.562E-04	-2.145E-04	2.399E-03	1.531E-07	1.034E-04	-1.000E 00	8.094E 04
23	0.0190	0.1680	0.8620	7.0300	-4.024E-07	1.697E-04	2.236E-03	2.405E-03	9.333E-08	1.648E-04	-1.000E 00	-1.000E 00
24	0.0170	0.1160	0.9120	7.8900	5.585E-06	1.596E-05	2.385E-03	2.407E-03	1.288E-08	9.752E-04	-1.000E 00	-1.000E 00
25	0.0150	0.1090	0.9130	8.3900	1.945E-06	-2.615E-06	2.390E-03	2.390E-03	4.074E-09	2.200E-03	-1.000E 00	-1.000E 00

MITTELMERT SK1 = 1.343E 06 SIGMA SK1 = 1.823E 04
 MITTELMERT SK2 = 8.737E 04 SIGMA SK2 = 7.947E 02
 MITTELMERT C5 = 2.392E-03 SUMME (C5-C5(N))**2 = 2.415E-09

05901 PHOTOMETERPLOG 4
 VERSUCH 12/ 64- 30 DATUM 2. 9. 64
 BERECHNUNG EINES CHELATGLEICHWICHTES AUS MESSUNGEN DER EXTINKTION UND DES PH-WERTES DURCH FEHLERQUADRIERUNG

BERECHNUNG DES CHELATGLEICHWICHTES MIT EIN MINIMUM DER FEHLERQUADRATSUMME 4 ERGEBEN
 SEITE 5. RUECKRECHNUNG DER MESSWERTE MIT DEN GEFUNDENEN STABILITÄTSKONSTANTEN UND BERECHNUNG DER FEHLERQUADRATSUMMEN
 VERWENDETE SUBROUTINEN PHOTEL = 5904 HEMFAK = 5903
 SKI WURDE GERECHNET VON MESSWERT N = 2 BIS N = 13 UND SK2 VON N = 7 BIS N = 22
 DER PRINZIPIALE ANTEIL EINER SPECIES ZUR RECHNUNG EINER STABILITÄTSKONSTANTE KAR 0.0500*CG
 DEM PROGRAMM WURDEN ZUM AUFSUCHEN DER BESTEN KOMINATION DIE FOLGENDEN EXTINKTIONSMODULN VORGELEBEN
 EM21 = 28.00 30.00 32.00 34.00 36.00 38.00 40.00
 EM22 = 364.00 368.00 372.00 376.00 380.00 384.00 388.00 392.00 396.00
 EM23 = 44.00 46.00 48.00 50.00 52.00 54.00 56.00

EXTINKTIONSMODULN UND KONSTANTEN DIESER VERTICHTUNG		EM23	EM31	EM32	EM33	DK1	DK2	HAG	CG	NG		
EM11	EM12	EM21	EM22	EM23	EM31	EM32	EM33	DK1	DK2	HAG	CG	NG
384.000	25.000	5.000	34.000	384.000	46.000	6.000	382.000	7.345E-05	2.965E-09	1.000E-02	2.390E-03	25
N	EM14	F2H	F3H	PH	CLH	C2H	C3H	FHJK	HJK	ANKB		
1	0.8954	0.0969	0.0163	3.6600	2.2468E-03	1.035E-04	3.048E-01	3.406E-06	2.188E-04	3.371E-08		
2	0.7723	0.2067	0.0108	4.0700	1.9758E-03	4.097E-04	5.931E-06	1.614E-05	8.511E-05	1.546E-07		
3	0.7196	0.2590	0.0388	4.1850	1.8258E-03	5.546E-04	1.976E-05	2.403E-05	6.511E-05	2.264E-07		
4	0.6294	0.3457	0.0545	4.3500	1.5688E-03	7.955E-04	2.626E-05	4.127E-05	4.467E-05	3.777E-07		
5	0.5337	0.4343	0.0751	4.5100	1.2968E-03	1.040E-03	5.433E-05	6.793E-05	3.070E-05	5.977E-07		
6	0.4491	0.5073	0.0982	4.6500	1.0788E-03	1.237E-03	9.413E-05	1.015E-04	2.239E-05	8.702E-07		
7	0.4005	0.5418	0.1148	4.7550	9.2711E-04	1.341E-03	1.269E-04	1.497E-04	1.841E-05	1.082E-06		
8	0.3705	0.5654	0.1266	4.7950	8.355E-04	1.400E-03	1.526E-04	1.668E-04	1.479E-05	1.371E-06		
9	0.3495	0.5794	0.1357	4.8300	7.8031E-04	1.437E-03	1.723E-04	1.668E-04	1.072E-05	1.919E-06		
10	0.2827	0.6166	0.1420	4.9700	5.9631E-04	1.536E-03	2.375E-04	2.414E-04	1.072E-05	1.919E-06		
11	0.2190	0.6357	0.2216	5.1300	4.641E-04	1.582E-03	3.035E-04	3.632E-04	7.413E-06	2.778E-06		
12	0.1655	0.6271	0.2836	5.3000	2.868E-04	1.554E-03	5.316E-04	5.35E-04	3.901E-06	5.060E-06		
13	0.1402	0.6136	0.3442	5.4000	2.214E-04	1.504E-03	6.647E-04	7.060E-04	3.020E-06	6.557E-06		
14	0.1149	0.5876	0.3761	5.5200	1.610E-04	1.417E-03	8.117E-04	9.421E-04	2.213E-06	8.745E-06		
15	0.0922	0.5445	0.4372	5.6500	1.101E-04	1.293E-03	9.873E-04	1.299E-03	1.585E-06	1.188E-05		
16	0.0732	0.4930	0.5030	5.8000	7.134E-05	1.138E-03	1.181E-03	1.828E-03	1.148E-06	1.595E-05		
17	0.0591	0.4400	0.5667	5.9400	4.873E-05	1.069E-03	1.365E-03	2.536E-03	1.98E-06	1.928E-05		
18	0.0517	0.4057	0.6053	6.0300	3.371E-05	8.777E-04	1.478E-03	3.127E-03	9.333E-07	2.942E-05		
19	0.0393	0.3343	0.6833	6.2300	1.684E-05	6.648E-04	1.708E-03	4.970E-03	5.888E-07	2.942E-05		
20	0.0316	0.2785	0.7420	6.4100	7.615E-06	4.922E-04	1.882E-03	7.524E-03	3.890E-07	4.316E-05		
21	0.0216	0.2363	0.7856	6.5750	4.579E-06	3.741E-04	2.011E-03	1.098E-02	2.601E-07	6.153E-05		
22	0.0166	0.1902	0.8325	6.8150	1.709E-06	2.376E-04	2.151E-03	1.896E-02	1.531E-07	1.035E-04		
23	0.0189	0.1622	0.8608	7.0300	6.965E-07	1.547E-04	2.235E-03	3.075E-02	9.333E-08	1.653E-04		
24	0.0151	0.1192	0.9037	7.8900	2.690E-08	2.754E-05	2.362E-03	1.871E-01	1.288E-08	9.817E-04		
25	0.0147	0.1141	0.9088	8.3900	4.178E-09	1.236E-05	2.370E-03	4.212E-01	4.074E-09	2.204E-03		

FEHL1 = 1.821E-03 FEHL2 = 1.651E-01 FEHL3 = 3.062E-04 FEHL4 = 3.779E-03
 DAS PROGRAMM PAT ALS BESTE WERTE GEFUNDFEN FEHL4 = 3.779E-03 EM21 = 34.00 EM22 = 384.00 EM23 = 46.00