JAEA-Data/Code
2008-010

JAEA-Data/Code

再処理抽出分離工程シミュレーションコード PARC の開発

Development of a Computer Code, PARC, for Simulation of Liquid-Liquid Extraction Process in Reprocessing

津幡 靖宏　朝倉 俊英　森田 泰治

Yasuhiro TSUBATA, Toshihide ASAKURA and Yasuji MORITA

原子力基礎工学研究部門
湿式分離プロセス化学研究グループ

Research Group for Aqueous Separation Process Chemistry
Nuclear Science and Engineering Directorate

April 2008

Japan Atomic Energy Agency　日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ（http://www.jaea.go.jp）
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構　研究技術情報部　研究技術情報課
〒319-1195　茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2008

JAEA-Data/Code 2008-010

再処理抽出分離工程シミュレーションコード PARC の開発

日本原子力研究開発機構
原子力基礎工学研究部門　燃料・材料工学ユニット
津幡 靖宏、朝倉 俊英、森田 泰治

（2008 年 2 月 22 日受理）

ピュレックス法による使用済燃料再処理プロセスのシミュレーションのための抽出分離計算コード PARC を整備した。PARC は、再処理施設内に設置される複数の連結されたパルスカラム及びミキサセトラを模擬することが可能で、各抽出器内のウラン、プルトニウム、ネプツニウム、核分裂生成物等の移行挙動を過渡計算及び定常計算によってシミュレーションすることができる。

本報告では、PARC で採用されている物質移動、化学反応等の各計算モデルについてまとめるとともに、入出力ファイルの作成例、計算結果の例を示した。

原子力科学研究所（駐在）：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2－4

JAEA-Data/Code 2008-010

Development of a Computer Code, PARC, for Simulation of Liquid-Liquid Extraction Process in Reprocessing

Yasuhiro TSUBATA, Toshihide ASAKURA and Yasuji MORITA

Division of Fuels and Material Engineering
Nuclear Science and Engineering Directorate
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received February 22, 2008)

A computer code PARC was developed for simulating liquid-liquid extraction process in the PUREX reprocessing plant. PARC is able to predict transient behavior and profiles at equilibrium of uranium, plutonium, neptunium and fission products in several units of pulsed columns and mixer-settlers, which are connected each other in the PUREX plant.

In this report, mathematical models of mass transfer and chemical reactions employed in PARC are described and an example of PUREX simulation is given.

Keywords: PUREX, Fuel Reprocessing, Mixer-settler, Pulsed Column, Uranium, Plutonium, Neptunium, Fission Products, Simulation Program

目　次

1.　はじめに …… 1
2.　PARC の概要 …… 2
2.1　計算対象 …… 2
2.2　計算機能 …… 3
3.　基本モデル …… 6
3.1　パルスカラム …… 6
3.1.1　物質収支式 …… 6
3.1.2　シャフト部における基本モデルの差分表現 …… 7
3.1.3　上下分相タンク内差分式 …… 11
3.1.4　逆混合係数 …… 12
3.1.5　物質移動モデル …… 13
3.1.6　分散相ホールドアップ …… 15
3.1.7　分散相液滴径 …… 16
3.2　ミキサセトラ …… 17
3.2.1　物質収支式 …… 17
3.2.2　ミキサセトラ内部における差分式 …… 17
3.2.3　ミキサセトラ両端における差分式 …… 18
3.2.4　物質移動モデル …… 19
3.3　タンク …… 21
3.3.1　物質収支式 …… 21
3.3.2　差分式 …… 21
3.4　物性値 …… 23
3.4.1　密度 …… 23
3.4.2　粘度 …… 24
3.4.3　界面張力 …… 25
4.　化学種 …… 29
5.　化学反応速度 …… 31
5.1　水相に関する化学反応速度式 …… 31
5.2　有機相に関する化学反応速度式 …… 38
6.　分配比 …… 41
7.　PARC の動作環境と実行方法 …… 50
8.　入力ファイルの書式 …… 52
8.1　入力データの全体構成 …… 52
8.1.1　基本構造 …… 52
8.1.2　コメントの記述方法 …… 53
8.2　キーワードデータ …… 54

8.3 化学反応の入力 …… 55
8.3.1 インタープリタの入力データの構造と種類 …… 55
8.3.2 化学式及び濃度の記述方法 …… 55
8.3.3 化学反応式 …… 56
8.3.4 cond 部 …… 56
8.3.5 case 部 …… 59
8.3.6 予約語及び組込関数 …… 62
8.3.7 定数 …… 63
8.4 位置データ …… 65
8.4.1 位置データの書式 …… 65
8.4.2 入力データ …… 66
9. 出力ファイルの書式 …… 88
9.1 主要出力（".out" ファイル） …… 88
9.1.1 入力データのエコーバック …… 88
9.1.2 パルスカラムに関する出力 …… 88
9.1.3 ミキサセトラに関する出力 …… 92
9.1.4 水相タンクに関する出力 …… 96
9.1.5 有機相タンクに関する出力 …… 98
9.2 リスタート出力（".rst"ファイル） …… 101
9.2.1 共通データ …… 101
9.2.2 パルスカラムの濃度に関する出力 …… 101
9.2.3 ミキサセトラの濃度に関する出力 …… 102
9.2.4 水相タンクの濃度に関する出力 …… 103
9.2.5 有機相タンクの濃度に関する出力 …… 103
9.2.6 パルスカラムの分配比に関する出力 …… 104
9.2.7 ミキサセトラの分配比に関する出力 …… 104
9.3 経時出力（".trn"ファイル） …… 104
9.4 収束状態出力（".cnv"ファイル） …… 105
10. PARC による計算実行例 …… 106
謝辞 …… 120
参考文献 …… 120
付録 …… 124

Contents

1. Introduction 1
2. Outline of PARC 2
2.1 Object of Calculation 2
2.2 Function of Calculation 3
3. Basic Calculation Model 6
3.1 Pulsed Column 6
3.1.1 Mass Balance Equation 6
3.1.2 Differential Equation for Column Parts 7
3.1.3 Differential Equation for Settling Parts 11
3.1.4 Axial Mixing Coefficient 12
3.1.5 Mass Transfer Model 13
3.1.6 Dispersed Phase Holdup 15
3.1.7 Drop Size 16
3.2 Mixer-Settlers 17
3.2.1 Mass Balance Equation 17
3.2.2 Differential Equation for Inside Part 17
3.2.3 Differential Equation for End Part 18
3.2.4 Mass Transfer Model 19
3.3 Vessels 21
3.3.1 Mass Balance Equation 21
3.3.2 Differential Equation 21
3.4 Properties of Liquids 23
3.4.1 Density 23
3.4.2 Viscosity 24
3.4.3 Interfacial Tension 25
4. Chemicals 29
5. Chemical Reaction Rates 31
5.1 Aqueous Phase 31
5.2 Organic Phase 38
6. Distribution Ratio 41
7. Operating System and Execution Method 50
8. Format of Input File 52
8.1 Structure of Input File 52
8.1.1 Fundamental Structure 52
8.1.2 Description of Comments 53
8.2 Keyword Data 54

8.3 Description of Chemical Reactions 55
8.3.1 Structure of Interpreter Input 55
8.3.2 Description of Chemical Formula and Concentrations 55
8.3.3 Description of Reaction Formula 56
8.3.4 Cond Part 56
8.3.5 Case Part 59
8.3.6 Reserved Words and Functions 62
8.3.7 Description of Constants 63
8.4 Position Data 65
8.4.1 Format of Position Data 65
8.4.2 Description of Position Data 66
9. Format of Output Files 88
9.1 Major Output (".out" File) 88
9.1.1 Echo of Input Data 88
9.1.2 Pulsed Columns 88
9.1.3 Mixer Settlers 92
9.1.4 Aqueous Solution Vessels 96
9.1.5 Organic Solution Vessels 98
9.2 Restart Output (".rst" Files) 101
9.2.1 Common Output 101
9.2.2 Concentrations in Pulsed Columns 101
9.2.3 Concentrations in Mixer Settlers 102
9.2.4 Concentrations in Aqueous Solution Vessels 103
9.2.5 Concentrations in Organic Solution Vessels 103
9.2.6 Distribution Ratio in Pulsed Columns 104
9.2.7 Distribution Ratio in mixer Settlers 104
9.3 Transient Output (".trn" File) 104
9.4 Convergence State Output (".cnv" File) 105
10. An Example of Calculation of PUREX Process 106
Acknowledgements 120
References 120
Appendix 124

1　はじめに

PUREX 法を採用した使用済燃料の再処理施設では、主要な工程である分離・分配工程、ウラン精製工程、プルトニウム精製工程等にパルスカラム型又はミキサセトラ型抽出器が採用され設置されている。再処理施設の設計、運転管理、安全性確保に当たっては、各抽出器内の放射性物質の移行挙動を把握することが重要である。

日本原子力研究開発機構（以下、「原子力機構」という。）では、PUREX 法による再処理プロセス内のウラン、プルトニウム、ネプツニウム、核分裂生成物（FP）等の移行挙動をシミュレーションするための計算コードとして PARC（Program for Advanced Extraction Process with Radiation Effect Calculation）を整備してきた。PARC では、複数のパルスカラム及びミキサセトラを相互に連結したプラントのシミュレーション解析が可能である。計算対象とできる化学成分は、水素イオン, U(IV), U(VI), Pu(III), Pu(IV), Pu(VI), Np(IV), Np(V), Np(VI), Zr, Tc, HNO_2 等、29 化学種である。PARC は、ユーザが指定する各化学種について、酸化還元反応等の反応速度、水相・有機相間の物質移動を計算し、各時刻における各抽出器の各段の濃度分布を出力する機能を持っている（過渡計算機能）。また、過渡計算の結果を基にして、工程全体が平衡に到達した状態を算出することができる（定常計算機能）。

PARC の大きな特長の一つにインタプリタ機能がある。この機能は、PARC に既に組み込まれている化学種の定義、化学反応式、化学反応速度の計算式、分配反応の計算式を、ユーザによる指定に従ってほぼ任意に変更することが可能となるものである。従来の再処理プロセスシミュレーションでは、ユーザが化学反応モデルの変更を検討する際には、変更のつどソースプログラムを直接改変し再コンパイルする作業が必要となるため、プログラミング及び数値計算技術に関する知識が少なからず必要であった。PARC のインタプリタ機能を利用することで、ソースプログラムの編集作業が不要となる。また、煩雑なファイル管理作業（プログラムのバージョン管理）を低減化することができる。

PARC のソースプログラムは、現状では全て C 言語で記述され、計算機ハードウエア、オペレーティングシステム、特定のライブラリに依存しない汎用的なものとなっているので、ユーザは好みの処理系を選択することができる。

当機構では、これまで原子力科学研究所・燃料サイクル安全工学研究施設（NUCEF）において使用済燃料を用いた抽出分離試験を実施してきており、抽出器の運転条件の検討及び試験結果の解析に計算コードを活用してきた[1)]。今後は、PARC が、再処理施設の運転条件の合理化、安全性向上の検討、さらには新たな抽出分離プロセスの研究開発に寄与することが期待される。

本報告では、PARC で用いられている物質収支、分配平衡、化学反応速度等の各計算モデルについて説明している。また、仮想プラントを想定したシミュレーション計算結果の例をあわせて示した。なお、PARC は吸収線量の評価や劣化物の生成等の放射線の影響を評価できる機能も有しているが、まだ整備が完全でない部分もあり、別途報告することとし本報では対象外とする。

２　ＰＡＲＣの概要

PARC が対象とするプロセスおよび PARC の主要な計算機能について以下に示す。

２．１　計算対象

PARC が対象とする再処理プロセスは、リン酸トリブチル(TBP)を抽出剤、n－ドデカンを希釈剤とする PUREX 法である。パルスカラム、ミキサセトラ、水相のタンク、有機相のタンク（以下、「コンポーネント」という。）の組み合わせから成る多段向流抽出システムの解析が可能である。

（１）化学種

PARC では、計算対象とする化学種として、以下の 29 成分の定義が組み込まれている（４章参照）。

水素イオン、ウラン(VI)、プルトニウム(IV)、プルトニウム(III)、ウラン(IV) 、
硝酸ヒドロキシルアミン（HAN）、硝酸ヒドラジン、亜硝酸、ジルコニウム、テクネチウム、
ネプツニウム(IV)、ネプツニウム(V)、ネプツニウム(VI)、アジ化水素、iso-ブチルアルデヒド、
n-ブチルアルデヒド、iso-酪酸、n-酪酸、ヨウ素、セシウム、ルテニウム(III)、
プルトニウム(VI)、バナジウム(IV)、バナジウム(V)、リン酸ジブチル（DBP）、
リン酸モノブチル（MBP）、リン酸、核分裂生成物（FP）、過酸化水素

PARC の特徴の一つとして、化学種の選択機能がある。ユーザは、上記化学種の中から、計算対象としたい化学種を入力設定により選択することが可能である。選択設定に基づいて、関連する化学反応式、反応速度計算式、分配比計算式の中から必要なものの選択が自動的になされる。本機能を利用して対象としない化学種を除外することによって、行列計算の負荷が軽減され計算速度の向上が期待できる（8.4.2.1 節(3)参照）。

（２）化学反応

PARC には PUREX プロセスにおいて重要と考えられる化学反応モデルが定義され組み込まれている。以下に主要な化学反応を示す（５章参照）。

プルトニウム(IV)のウラン(IV)による還元
プルトニウム(IV)の硝酸ヒドロキシルアミンによる還元
プルトニウム(III)の再酸化
ウラン(IV)の酸化
ウラン(IV)の空気による酸化
亜硝酸のヒドラジンによる分解

亜硝酸の硝酸ヒドロキシルアミンによる分解
テクネチウムの触媒作用によるヒドラジンの分解
ネプツニウムの酸化、還元反応
ネプツニウムとプルトニウムの酸化、還元反応
ネプツニウムの不均化反応　　等

（３）分配比

ウラン(VI)、プルトニウム(IV)等に関しては、これまで良く用いられてきた Richardson による相関式[2)] 等を参考としている。また、ネプツニウム、ジルコニウム、テクネチウム等の化学種については、文献記載のもの、文献の実験値から相関式を導出したもの、また原子力科学研究所 NUCEF での試験結果から導出したものが含まれる。

（４）コンポーネント

コンポーネントの個数（ncomp）は任意であり制限はない。ただし経時出力ファイル（*.trn ファイル）への出力機能（8.4.2.1 節(23)～(24)参照）を使用する場合には、出力書式の関係で 99 個以下（2 桁の正整数個）に制限される。

コンポーネント間の水相及び有機相の流れの接続は任意に指定できる。ただし各相独自の配管ループは存在しないとしている。抽出器へのフィード及び他のコンポーネントからの流入については、任意個数のメッシュへの任意個数の流入項（ソース項）の設定が可能である（8.4.2.1 節(6)参照）。

（５）メッシュ

パルスカラム及びミキサセトラのメッシュ数（MSH、パルスカラムの鉛直方向の分割個数あるいはミキサセトラの段数（図 3.1 及び 3.3 参照）。）は任意であり制限はない。ただし経時出力ファイル（*.trn ファイル）への出力機能（8.4.2.1 節(23)～(24)参照）を使用する場合には、出力書式の関係で 999 個以下（3 桁の正整数個）に制限される。

水相タンク、有機相タンクは複数メッシュの分割が定義されておらず、メッシュ数は常に 1 と定義している。

（６）コンポーネント温度

コンポーネント毎に異なる運転温度（T）を設定可能である。温度の経時変化はないものとしている。この温度設定は、反応速度や分配比の計算に用いられる。

２．２　計算機能

（１）過渡計算機能及び定常計算機能

PARC の過渡計算機能とは、水相及び有機相の配管によって相互に連結されたコンポーネント内の各化学種（ユーザが選択した化学種）について、タイムステップを進めながら化学反応、分

配平衡計算を実行し、水相及び有機相の化学種濃度をユーザが指定するタイミングで出力する機能である。

また定常計算機能とは、各コンポーネント内の各化学種の濃度が、時間を経ても変化せず安定した状態（定常状態）を算出する機能である。なお、定常計算を実行する際には、あらかじめ十分長い時間の過渡計算を実行しその最終結果が定常状態に十分近づいていることを確認しておく必要がある。定常に近づいていない状態で定常計算を実行した場合、演算に問題が生じて異常終了する可能性があるためである。

PARC では、4 種類の計算パターンを実行することができる（8.4.2.1 節(15)参照）。ユーザは、①過渡計算のみ実行、②過渡計算の後に定常計算の実行、③過渡計算→定常計算→過渡計算、④過渡計算→定常計算→過渡計算→定常計算のうちから計算パターンを選択できる。

（２）リスタート計算機能

PARC から出力された計算結果（ある時刻における各コンポーネント内の濃度情報）を初期濃度として、継続してシミュレーションを実施する機能である。リスタート計算では、メインの入力ファイルではなく、他のファイル（リスタートファイル（*.rst ファイル、8.4.2.1 節(19), (20)及び 9.2 節参照）等）に含まれる濃度データを読み込んで初期値として計算を開始する。この機能によって計算時間の短縮、計算ジョブの分割実行が可能となる。

（３）安定性

計算では完全陰解法を用いている。大きな時間刻みにもかかわらず振動のない安定な解析が可能となり、計算時間を短縮できる。

（４）インタプリタ機能

PARC の特長の一つに「インタプリタ機能」がある。この機能を活用することにより、既に定義されプログラム化されている化学種、化学反応式（水相及び有機相）、反応速度計算式（水相及び有機相）及び分配比計算式を、ユーザ入力によってほぼ任意に変更、取消が可能となる。さらに未定義の新しい化学種、化学反応を定義することが可能となる。これによってソースプログラムの編集作業を行うことなく様々なモデルの導入が可能となる。

新たに考慮したい計算式等は、PARC の入力ファイル中に直接記述する（8.2 節参照）。PARC が入力ファイルを読み込み、入力ファイルに記述された文字列を分割し、構文解析を行う。構文解析に当たっては、コンパイラでよく用いられる LL (1) 構文解析法 [3] を用いて、文字列中に現れる予約語（"Pu", "Np", "ELSE" 等）、括弧の対応、四則演算、条件文等の文法構造の認識等を行う。また、構文解析結果をもとに、自動微分法 [4] を用いて行列計算に必要な Jacobian 行列を自動的に生成し、既存の計算式とともに計算を実行する。

インタプリタ入力例１（化学反応式及び反応速度計算式の定義の追加）

```
Pu(IV)+2Np(VI)+2H2O-> 2Pu(VI)+2Np(V)+4H;
ELSE;
d[xPu(IV)]/dt=-0.24*[xPu(IV)]*[xNp(VI)]/[xH]**3.0;
```

この例では、プルトニウム(IV)とネプツニウム(VI)の化学反応が新たに定義され、既存の反応とともに計算を実行する。

インタプリタ入力例２（反応速度の変更）

```
RX0101 = 0.0
```

この例では、PARC に既設の「プルトニウム(IV)のウラン(IV)による還元反応（水相）」の反応速度を 0 としており、この反応が起こらないとした計算を実行する（8.2 節参照）。

（５）プログラミング言語

PARC の全てのソースプログラムは、C 言語によって記述されている。C 言語を用いることで、ポインタ変数の利用やメモリの動的確保の機能を利用した前記インタプリタ機能の実装が FORTRAN 等に比べて容易となる。C 言語については多くの参考書[5)] がある。コンパイルにあたっては、Microsoft Visual C++ 等の市販のコンパイラが利用可能である。

３　基本モデル

PARC でモデル化が可能な抽出器は、パルスカラム及びミキサセトラの 2 種類である。また、水相タンクおよび有機相タンクのモデル化が可能である。以下に基本計算モデルを示す。

３．１　パルスカラム

パルスカラムの基本モデルでは、パルスカラムはシャフト部及び上下分相タンクで構成される（図 3.1）。入力ファイルにおいてパルスカラムの鉛直方向の分割数（MSH）を N と設定した場合、下部分相タンクがメッシュ番号１、上部分相タンクがメッシュ番号 N と定義され、シャフト部は(N-2)個のメッシュに分割される。このときシャフト部の分割は長さ方向に均等あるいは不均等な分割が可能である。二相は各々上下方向に流れ向流接触するとする。シャフト部では、水相と有機相がエマルジョンの形で存在するとしており水相分散又は有機相分散のいずれか運転条件を選択できる。また、パルスの印加にともなう連続相及び分散相の逆混合の効果を考慮しており、逆混合係数を用いたモデルとなっている。シャフト部での分散相液滴径、逆混合係数、分散相ホールドアップの算出には Kumar [6-8] らによる perforated plate 型パルスカラムに関する実験式を用いている。なお、baffle plate 型パルスカラムに関しては、PARC では直接的に扱うことはできないが、一例として前田らによる SAFE コード [9-10] で採用されている baffle plate 型パルスカラム用のモデルが参考になると思われる。

また、モデル化の都合から、上部及び下部分相タンクには、共に二相が相分離した状態で存在するとし、二相の体積割合はタンク毎に固定値（phi1、phi2）を指定することとしている（8.4.2.3.2 節(2)参照）。

水相-有機相間の分配平衡による物質移動については、ミキサセトラと同様、物質移動速度を考慮したモデルであり、総括物質移動係数を用いてモデル化している。総括物質移動係数はシャフト部及び上下分相タンクにおいて設定される。

３．１．１　物質収支式

物質収支式は以下のようになる.。ただし化学種に関する添字は省略してある。

（水相）

$$\frac{\partial x}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left(E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right)+\frac{1}{\phi_a}\frac{\partial}{\partial z}(u_a x)+M_a+\sum\left[\left(\prod r(x)\right)R_a\right]+\frac{1}{\phi_a}S_a \tag{3.1}$$

（有機相）

$$\frac{\partial y}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left(E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right)+\frac{1}{\phi_o}\frac{\partial}{\partial z}(u_o y)+M_o+\sum\left[\left(\prod r(y)\right)R_o\right]+\frac{1}{\phi_o}S_o \tag{3.2}$$

ここで

t ：時間

z ：軸方向座標

x ：水相濃度

y ：有機相濃度

φ ：ホールドアップ

E ：逆混合係数

U ：みかけ流速 （流量/全断面積）

M ：二相間物質移動量

R ：化学反応量

S ：カラム途中からの流入量

である。また、添字は

a ：水相

o ：有機相

である。

積 $\mathbf{\Pi} r(x)$及び $\mathbf{\Pi} r(y)$は、化学反応式の左辺に現れる化学種の濃度の関数の積である。$r(x)$及び $r(y)$は次のような関数としている（図 3.2）。この関数は、演算の安定化のために導入したものである。

$$r(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\delta} x & (0 \le x \le \delta) \\ 1 & (\delta \le x) \end{cases} \tag{3.3}$$

$$r(y) = \begin{cases} \dfrac{1}{\delta} y & (0 \le y \le \delta) \\ 1 & (\delta \le y) \end{cases} \tag{3.4}$$

ここで、x 及び y は濃度、δ は定数である。

３．１．２　シャフト部における基本モデルの差分表現

（１）シャフト部における差分表現

パルスカラムの基本モデルを差分により表現すると次のようになる。すべての量はメッシュ中央で定義されているものとし、移流項には風上差分を用いた。

（水相）

$$\frac{x_i^{n+1}-x_i^n}{\Delta t}=\frac{1}{\Delta z_i}\left[\frac{2(x_{i+1}^{n+1}-x_i^{n+1})}{\frac{\Delta z_i}{E_{a,i}}+\frac{\Delta z_{i+1}}{E_{a,i+1}}}-\frac{2(x_i^{n+1}-x_{i-1}^{n+1})}{\frac{\Delta z_{i-1}}{E_{a,i-1}}+\frac{\Delta z_i}{E_{a,i}}}\right]$$
$$+\frac{1}{\Delta z_i\cdot\phi_{a,i}}\left(U_{a,i+1}\cdot x_{i+1}^{n+1}-U_{a,i}\cdot x_i^{n+1}\right)+M_{a,i}^{n+1} \tag{3.5}$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(x_i^{n+1})\right)R_{a,i}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_i\cdot\phi_{a,i}\cdot A}\sum F_{a,i+1/2}^{f}\cdot x_{f,i+1/2}$$

（有機相）

$$\frac{y_i^{n+1}-y_i^n}{\Delta t}=\frac{1}{\Delta z_i}\left[\frac{2(y_{i+1}^{n+1}-y_i^{n+1})}{\frac{\Delta z_i}{E_{o,i}}+\frac{\Delta z_{i+1}}{E_{o,i+1}}}-\frac{2(y_i^{n+1}-y_{i-1}^{n+1})}{\frac{\Delta z_{i-1}}{E_{o,i-1}}+\frac{\Delta z_i}{E_{o,i}}}\right]$$
$$-\frac{1}{\Delta z_i\cdot\phi_{o,i}}\left(U_{o,i}\cdot y_i^{n+1}-U_{o,i-1}\cdot y_{i-1}^{n+1}\right)+M_{o,i}^{n+1} \tag{3.6}$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(y_i^{n+1})\right)R_{o,i}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_i\cdot\phi_{o,i}\cdot A}\sum F_{o,i-1/2}^{f}\cdot y_{f,i-1/2}$$

ここで

i ：メッシュ番号

n ：時間ステップ番号

x_f ：シャフト部メッシュへの流入濃度（水相）

他のコンポーネントからの流れについては n+1 を、独立したフィードの場合は n の値を用いる。

y_f ：シャフト部メッシュへの流入濃度（有機相）

他のコンポーネントからの流れについては n+1 を、独立したフィードの場合は n の値を用いる。

F^f：シャフト部メッシュへの流入流量

A ：流路断面積

である。

（２）シャフト部と分相タンクの境界での差分表現

以下では、シャフト部の高さが H の場合、シャフト部と下部分相タンクとの境界を $z=0$、上部分相タンクとの境界を $z=$ H と表現する（図 3.1）。シャフト部の境界条件は次のように表される。ただし、添字 *in* は入口の量であることを示す。

（水相）

$$\left[\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{z=0}=0 \tag{3.7}$$

$$-\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{z=H-0}+[(U_a x)_{in}-(U_a x)_{z=H-0}]=0 \tag{3.8}$$

（有機相）

$$\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{z=+0}-[(U_o y)_{z=+0}-(U_o y)_{in}]=0 \tag{3.9}$$

$$\left[\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{z=H}=0 \tag{3.10}$$

拡散項と移流項に対して、メッシュ N 又はメッシュ 1 で入口の量に対して積分を行うと

（水相）

$$\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{N+\frac{1}{2}-0}-\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{N-\frac{1}{2}}+(U_a x)_{N+\frac{1}{2}-0}-(U_a x)_{N-\frac{1}{2}} \tag{3.11}$$

（有機相）

$$\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{\frac{3}{2}}-\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{\frac{1}{2}+0}-(U_o y)_{\frac{3}{2}}+(U_o y)_{\frac{1}{2}+0} \tag{3.12}$$

式(3.8)、(3.9) より

$$(U_a x)_{in}=\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{N+\frac{1}{2}-0}+(U_a x)_{N+\frac{1}{2}-0} \tag{3.13}$$

$$(U_o y)_{in}=-\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{\frac{1}{2}+0}+(U_o y)_{\frac{1}{2}+0} \tag{3.14}$$

であり(3.13)、(3.14)を(3.11)、(3.12)に代入して

$$(U_a x)_{in}-\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{N-\frac{1}{2}}-(U_a x)_{N-\frac{1}{2}} \tag{3.15}$$

$$(U_o y)_{in}+\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{\frac{3}{2}}-(U_o y)_{\frac{3}{2}} \tag{3.16}$$

となる。

また、水相と有機相の出口に対して拡散項と移流項の積分を行うと

（水相）

$$\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{\frac{3}{2}}-\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{\frac{1}{2}}+(U_a x)_{\frac{3}{2}}-(U_a x)_{\frac{1}{2}} \tag{3.17}$$

（有機相）

$$\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{N+\frac{1}{2}}-\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{N-\frac{1}{2}}-(U_o y)_{N+\frac{1}{2}}+(U_o y)_{N-\frac{1}{2}} \tag{3.18}$$

である。ここで(3.7)、(3.10)より

$$\left[\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{\frac{1}{2}}=0,\qquad x_{\frac{1}{2}}\fallingdotseq x_1 \tag{3.19}$$

$$\left[\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{N+\frac{1}{2}}=0,\qquad y_{N+\frac{1}{2}}\fallingdotseq y_N \tag{3.20}$$

であり、(3.19) (3.20)を、(3.17)(3.18)に代入して

$$\phi_a\left[E_a\frac{\partial x}{\partial z}\right]_{\frac{3}{2}}+(U_a x)_{\frac{3}{2}}-(U_a x)_1 \tag{3.21}$$

$$-\phi_o\left[E_o\frac{\partial y}{\partial z}\right]_{N-\frac{1}{2}}-(U_o y)_N+(U_o y)_{N-\frac{1}{2}} \tag{3.22}$$

となる。

以上から、シャフト部の上下端における差分式（風上差分）は次のようになる。

（下端）

$$\begin{aligned}\frac{x_1^{n+1}-x_1^n}{\Delta t}&=\frac{1}{\Delta z_1}\cdot\frac{2(x_2^{n+1}-x_1^{n+1})}{\frac{\Delta z_1}{E_{a,1}}+\frac{\Delta z_2}{E_{a,2}}}+\frac{1}{\Delta z_1\cdot\phi_{a,1}}(U_{a,2}\cdot x_2^{n+1}-U_{a,1}\cdot x_1^{n+1})+M_{a,1}^{n+1}\\&\quad+\sum\left[\left(\prod r(x_1^{n+1})\right)R_{a,1}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_1\cdot\phi_{a,1}\cdot A}\sum F_{a,\frac{3}{2}}^{f}\cdot x_{f,\frac{3}{2}}\end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}\frac{y_1^{n+1}-y_1^n}{\Delta t}&=\frac{1}{\Delta z_1}\cdot\frac{2(y_2^{n+1}-y_1^{n+1})}{\frac{\Delta z_1}{E_{o,1}}+\frac{\Delta z_2}{E_{o,2}}}-\frac{1}{\Delta z_1\cdot\phi_{o,1}}(U_{o,1}\cdot y_1^{n+1}-U_{o,in}\cdot y_{in}^{n+1})+M_{o,1}^{n+1}\\&\quad+\sum\left[\left(\prod r(y_1^{n+1})\right)R_{o,i}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_1\cdot\phi_{o,1}\cdot A}\sum F_{o,\frac{1}{2}}^{f}\cdot y_{f,\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{3.24}$$

（上端）

$$\frac{x_N^{n+1}-x_N^n}{\Delta t}=-\frac{1}{\Delta z_N}\cdot\frac{2(x_N^{n+1}-x_{N-1}^{n+1})}{\frac{\Delta z_{N-1}}{E_{a,N-1}}+\frac{\Delta z_N}{E_{a,N}}}+\frac{1}{\Delta z_N\cdot\phi_{a,N}}(U_{a,in}\cdot x_{in}^{n+1}-U_{a,N}\cdot x_N^{n+1})+M_{a,N}^{n+1}$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(x_N^{n+1})\right)R_{a,N}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_N\cdot\phi_{a,N}\cdot A}\sum F^f_{a,N+\frac{1}{2}}\cdot x_{f,N+\frac{1}{2}} \tag{3.25}$$

$$\frac{y_N^{n+1}-y_N^n}{\Delta t}=-\frac{1}{\Delta z_N}\cdot\frac{2(y_N^{n+1}-y_{N-1}^{n+1})}{\frac{\Delta z_{N-1}}{E_{o,N-1}}+\frac{\Delta z_N}{E_{o,N}}}-\frac{1}{\Delta z_N\cdot\phi_{o,N}}(U_{o,N}\cdot y_N^{n+1}-U_{o,N-1}\cdot y_{N-1}^{n+1})+M_{a,N}^{n+1}$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(y_N^{n+1})\right)R_{o,N}^{n+1}\right]+\frac{1}{\Delta z_N\cdot\phi_{o,N}\cdot A}\sum F^f_{o,N-\frac{1}{2}}\cdot y_{f,N-\frac{1}{2}} \tag{3.26}$$

ここで

N ： シャフト部のメッシュ分割数

$U_{o,in}$ ： 下部分相タンクにおける有機相速度

y_{in} ： 下部分相タンクにおける有機相濃度

$U_{a,in}$ ： 上部分相タンクにおける水相速度

x_{in} ： 上部分相タンクにおける水相濃度

である。

３．１．３　上下分相タンク内差分式

（下部分相タンク）

$$\frac{x_{out}^{n+1}-x_{out}^n}{\Delta t}=\frac{1}{V_{a,b}}(A\cdot U_{a,1}\cdot x_1^{n+1}-AFL\cdot x_{out}^{n+1})-\beta_b\cdot a_b(y_{in}^{*n+1}-y_{in}^{n+1})$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(x_{out}^{n+1})\right)R_{a,out}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{a,b}}\sum F^f_{a,\frac{1}{2}}\cdot x_{f,\frac{1}{2}} \tag{3.27}$$

$$\frac{y_{in}^{n+1}-y_{in}^n}{\Delta t}=-\frac{1}{V_{o,b}}OFD\cdot y_{in}^{n+1}+\beta_b\cdot a_b(y_{in}^{*n+1}-y_{in}^{n+1})$$
$$+\sum\left[\left(\prod r(y_{in}^{n+1})\right)R_{o,in}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{o,b}}\sum F^f_{o,b}\cdot y_{f,b} \tag{3.28}$$

ここで

AFL ： 下部分相タンクにおける水相流量

OFD ： 下部分相タンクにおける有機相流量 （ $=\sum F^f_{o,b}$ ）

$V_{a,b}$ ： 水相体積（ユーザ入力による固定値）

$V_{o,b}$ ： 有機相体積（ユーザ入力による固定値）
β_b ： 有機相基準の総括物質移動係数（ユーザ入力による固定値）
a_b ： 単位体積（水相+有機相）あたりの界面積（ユーザ入力による固定値）
である。

（上部分相タンク）

$$\frac{x_{in}^{n+1}-x_{in}^{n}}{\Delta t}=-\frac{1}{V_{a,t}}AFD\cdot x_{in}^{n+1}-\beta_t\cdot a_t\cdot(y_{out}^{*n+1}-y_{out}^{n+1})$$
$$+\sum[(\prod r(x_{in}^{n+1)})R_{a,in}^{n+1})]+\frac{1}{V_{a,t}}\sum F_{a,t}^{f}\cdot x_{f,t} \tag{3.29}$$

$$\frac{y_{out}^{n+1}-y_{out}^{n}}{\Delta t}=-\frac{1}{V_{o,t}}(OFL\cdot y_{out}^{n+1}-A\cdot U_{o,N}\cdot y_N^{n+1})+\beta_t\cdot a_t(y_{out}^{*n+1}-y_{out}^{n+1})$$
$$+\sum[(\prod r(y_{out}^{n+1}))R_{o,out}^{n+1}]+\frac{1}{V_{o,t}}\sum F_{o,N+1/2}^{f}\cdot y_{f,N+1/2} \tag{3.30}$$

ここで

AFD ： 上部分相タンクにおける水相流量 （ $=\sum F_{a,t}^{f}$ ）

OFL ： 上部分相タンクにおける有機相流量
$V_{a,t}$ ： 水相体積（ユーザ入力による固定値）
$V_{o,t}$ ： 有機相体積（ユーザ入力による固定値）
β_t ： 有機相基準の総括物質移動係数（ユーザ入力による固定値）
a ： 単位体積（水相+有機相）あたりの界面積（ユーザ入力による固定値）
である。

３．１．４　逆混合係数

パルス印加に伴うシャフト部での軸方向（鉛直方向）の逆混合については、逆混合係数を用いた表現をとっている。連続相の逆混合係数 E_c の算出には、Kumar らが提案した perforated plate 型パルスカラムでの推算モデル [7] を採用した。なお、PARC では分散相の逆混合係数 E_d にも同じ値を用いている。

$$\frac{E_c\Delta\rho}{\mu_c}=K_1\exp(K_2\varphi)\cdot\left(\frac{V_d\mu_c}{\sigma}\right)^{0.11}\left(\frac{\mu_c}{\mu_d}\right)^{-0.37}\left[\frac{\mu_c}{(\sigma\ \Delta\rho h)^{0.5}}\right]^{-0.61}\left(\frac{d_0}{h}\right)^{0.36}\left(\frac{\Delta\rho h}{\rho^* h^*}\right)^{1.05} \tag{3.31}$$

$$K_1=46.15 \tag{3.32}$$

$$K_2=\begin{cases}0.80 & Af<2(Af)_{\mathrm{m}}\\ 0.34 & Af>2(Af)_{\mathrm{m}}\end{cases} \tag{3.33}$$

$$\varphi = \begin{cases} \left[\dfrac{Af-(Af)_{\mathrm{m}}}{(Af)_{\mathrm{m}}}\right]^3 - \left[\dfrac{Af-(Af)_{\mathrm{m}}}{(Af)_{\mathrm{m}}}\right]^2 & Af < 2(Af)_{\mathrm{m}} \\ \dfrac{Af-2\cdot(Af)_{\mathrm{m}}}{(Af)_{\mathrm{m}}} & Af > 2(Af)_{\mathrm{m}} \end{cases} \tag{3.34}$$

$$(Af)_{\mathrm{m}} = 9.69\times10^{-3}\cdot\left(\frac{\sigma\,\Delta\rho^{1/4}\alpha}{\mu_d^{\,3/4}}\right)^{0.33} \tag{3.35}$$

$$h^* = 0.05 \tag{3.36}$$

$$\rho^* = 998 \tag{3.37}$$

$$E_d = E_c \tag{3.38}$$

ここで

A ：パルス振幅 (※) （両振幅、すなわち振幅の 2 倍）[m]

d_0 ：目皿板の穴直径 (※) [m]

E_c ：連続相逆混合係数 [$m^2\ s^{-1}$]

E_d ：分散相逆混合係数 [$m^2\ s^{-1}$]

f ：パルス振動数 (※) [s^{-1}]

h ：プレート間隔 (※) [m]

h^* ：標準プレート間隔 [m]

V_d ：分散相みかけ流速 [$m\ s^{-1}$]

$\triangle\rho$ ：相間密度差 [$kg\ m^{-3}$]

μ_c ：連続相粘度 [Pa・s]

μ_d ：分散相粘度 [Pa・s]

ρ_c ：連続相密度 [$kg\ m^{-3}$]

ρ_d ：分散相密度 [$kg\ m^{-3}$]

ρ^* ：20℃ における水の密度 [$kg\ m^{-3}$]

σ ：界面張力 [$N\ m^{-1}$]

である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。

３．１．５　物質移動モデル

化学種の分配平衡による水相と有機相間の物質移動については、水相－有機相間の物質移動速度を考慮することとし、PARC では総括物質移動係数を用いたモデルを採用している。PULCO コード [11] のように液滴の運動を詳細に表現したモデルではなく、総括物質移動係数は各化学種の分配比にのみ依存するとする Petrich の経験的モデル [12] を参考にしている。

（1）シャフト部における物質移動

Petrich の経験的モデルは、実験データからカーブフィッティングによって得られたもので、次式で表される [12)]。

$$dC_{\mathrm{drop}} / dt = S \cdot \beta \left(C_{\mathrm{drop},\, t=\infty} - C_{\mathrm{drop},t} \right)$$

$$\beta = \alpha \left(\frac{dC_{\mathrm{cont}}}{dC_{\mathrm{drop}}} \right)^{\gamma} \tag{3.39}$$

$\alpha = 0.0038 \ \pm \ 0.0009 \quad \mathrm{cm\ s^{-1}}$

$\gamma = 0.63 \ \pm \ 0.16$

ここで、

C_{cont} ：連続相中濃度 [mol dm^{-3}]

C_{drop} ：分散相中濃度 [mol dm^{-3}]

β ：総括物質移動係数（分散相基準） [cm s^{-1}]

S ：分散相体積あたり分散相表面積 [cm^{-1}]

である。

PARC では、Petrich モデルを参考に、シャフト部での有機相基準の総括物質移動係数 β が次式で表されるとしている。

$$\beta = 0.0038 \left(\frac{dC_{\mathrm{aq}}}{dC_{\mathrm{org}}} \right)^{0.63} \tag{3.40}$$

ここで、

C_{aq} ：水相濃度 [mol dm^{-3}]

C_{org} ：有機相濃度 [mol dm^{-3}]

β ：総括物質移動係数（有機相基準） [cm s^{-1}]

である。ここでの微分は平衡線上の微分である。

式(3.1)、(3.2)での物質移動項 M は次のようになる。

$$M = s \cdot \beta (y^{*} - y) \tag{3.41}$$

$$y^{*} = D \cdot x$$

ここで

s ： 各相単位体積あたりの接触界面積 [cm^{-1}]

y ： 有機相中の濃度 [mol dm^{-3}]

D ： 分配比 [-]

x ： 水相中の濃度 [mol dm^{-3}]

である。

単位体積（水相および有機相の合計）あたりの接触界面積 a [m^{-1}] は次式で与えられる。

$$a = 6\ \frac{\phi_{\mathrm{d}}}{d_{\mathrm{p}}} \tag{3.42}$$

ここで

ϕ_d ： 分散相ホールドアップ [-]

d_p ： 分散相液滴径 [m]

である。

総括物質移動係数のモデル化については、今後も検討が必要と考えられる。

（２）上下分相タンクにおける物質移動

分相タンクにおける物質移動モデルの考え方は、式(3.41)と同様である。ただし総括物質移動係数、水相及び有機相の各ホールドアップ、二相の接触界面積は、ユーザ入力によって固定値を与えることとしている。入力作成に当たっては、模擬しようとするパルスカラムの構造や連続相／分散相の選択を考慮することが望ましい。

３．１．６　分散相ホールドアップ

シャフト部における分散相のホールドアップ率の算出には、Kumar ら [8] による perforate plate 型パルスカラムでの推算モデルを採用した。

$$\phi_d = k_1 \exp\left[k_2 \left| Af - (Af)_{\mathrm{m}} \right|\right] V_d^{0.86} \left(V_c + V_d\right)^{0.28} \cdot \Delta\rho^{-0.30} \rho^{-0.93} \mu_d^{0.77} \alpha^{-0.56} h^{-0.56} \tag{3.43}$$

$$\left(Af\right)_{\mathrm{m}} = k_3 \left(\frac{\sigma \Delta\rho^{1/4} \alpha}{\mu_d^{\ 3/4}} \right)^{0.33} \tag{3.44}$$

$k_1 = 1.99 \times 10^6$,　$k_2 = 44.31$,　$k_3 = 9.69 \times 10^{-3}$

ここで

A ： パルス振幅 (※)（両振幅、すなわち振幅の 2 倍）[m]

f ： パルス振動数 (※) [s^{-1}]

h ： perforate plate の間隔 (※) [m]

V_c ： 連続相みかけ流速 [m s^{-1}]

V_d ： 分散相みかけ流速 [m s^{-1}]

α ： 目皿板の free area 割合 (※) [-]

ϕ_d ： 分散相ホールドアップ率 [-]

μ_d ： 分散相粘性率 [Pa・s]

ρ_d ： 分散相密度 [kg m^{-3}]

$\Delta\rho$ ： 水相－有機相間の密度差 [kg m^{-3}]

σ ： 界面張力 [N m^{-1}]

である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。

３．１．７　分散相液滴径

シャフト部における分散相液滴径の算出には、Kumar ら[6)] による perforated plate 型パルスカラムでの推算モデルを採用した。

$$\frac{d_p}{\sqrt{\dfrac{\sigma}{\Delta\rho\ g}}} = 0.16\cdot\alpha^{0.40}\left(\frac{h}{\sqrt{\dfrac{\sigma}{\rho_c g}}}\right)^{0.18}\cdot\left(\frac{\mu_d\ g^{1/4}}{\rho_c^{1/4}\sigma^{3/4}}\right)^{-0.20}\cdot\left(\frac{\mu_d}{\mu_c}\right)^{0.34}\cdot\left[0.23+\exp\left(-29.66\frac{A\ f^2}{g\ \alpha}\right)\right] \tag{3.45}$$

ここで

A	：	パルス振幅 (※)（両振幅、すなわち振幅の 2 倍）	[m]
d_p	：	液滴径	[m]
f	：	パルス振動数 (※)	[s^{-1}]
g	：	重力加速度	[m s^{-2}]
h	：	perforate plate の間隔 (※)	[m]
α	：	目皿板の free area 割合 (※)	[-]
μ_c	：	連続相粘度	[Pa・s]
μ_d	：	分散相粘度	[Pa・s]
ρ_c	：	連続相密度	[kg m^{-3}]
$\Delta\rho$	：	水相と有機相の密度差	[kg m^{-3}]
σ	：	界面張力	[N m^{-1}]

である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。

３．２　ミキサセトラ

３．２．１　物質収支式

ミキサセトラの基本計算モデルは、水相及び有機相の流れについては Revised-MIXSET 等の従来のミキサセトラ計算コード [13-15] とほぼ同様である（図 3.3）。段内のリサイクルフローについては、PARC では水相リサイクルのみを考慮している。ミキサ部及びセトラ部の水相及び有機相のホールドアップはユーザ入力により固定することとしている。ミキサ部のホールドアップは、コンポーネント毎にユーザが固定値（phi1）を与え、またミキサセトラのセトラ部のホールドアップは、全てのミキサセトラに共通の固定値（phiS、8.4.2.1 節(27)参照。）を与えることとした。

（ミキサ部水相）

$$\frac{d}{dt}x_{m,i} = -\frac{1}{V_{a,i}^{m}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{m,i} + \frac{F_{a,i}^{r}}{V_{a,i}^{m}}x_{s,i} + \frac{F_{a,i+1}}{V_{a,i}^{m}}x_{s,i+1} + M_{ma,i} + \sum\left[\left(\prod r(x_{m,i})\right)R_{ma,i}\right] + \frac{1}{V_{a,i}^{m}}\sum F_{a,i}^{f}x_{f,i} \tag{3.46}$$

（ミキサ部有機相）

$$\frac{d}{dt}y_{m,i} = -\frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{m}}y_{m,i} + \frac{F_{o,i-1}}{V_{o,i}^{m}}y_{s,i-1} + M_{mo,i} + \sum\left[\left(\prod r(y_{m,i})\right)R_{mo,i}\right] + \frac{1}{V_{o,i}^{m}}\sum F_{o,i}^{f}y_{f,i} \tag{3.47}$$

（セトラ部水相）

$$\frac{d}{dt}x_{s,i} = \frac{1}{V_{a,i}^{s}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{m,i} - \frac{1}{V_{a,i}^{s}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{s,i} + \sum\left[\left(\prod r(x_{s,i})\right)R_{sa,i}\right] \tag{3.48}$$

（セトラ部有機相）

$$\frac{d}{dt}y_{s,i} = \frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{s}}y_{m,i} - \frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{s}}y_{s,i} + \sum\left[\left(\prod r(y_{s,i})\right)R_{so,i}\right] \tag{3.49}$$

３．２．２　ミキサセトラ内部における差分式

（ミキサ部水相）

$$\frac{x_{m,i}^{n+1}-x_{m,i}^{n}}{\Delta t} = -\frac{1}{V_{a,i}^{m}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{m,i}^{n+1} + \frac{F_{a,i}^{r}}{V_{a,i}^{m}}x_{s,i}^{n+1} + \frac{F_{a,i+1}}{V_{a,i}^{m}}x_{s,i+1}^{n+1} + M_{ma,i}^{n+1} + \sum\left[\left(\prod r(x_{m,i}^{n+1})\right)R_{ma,i}^{n+1}\right] + \frac{1}{V_{a,i}^{m}}\sum F_{a,i}^{f}x_{f,i} \tag{3.50}$$

（ミキサ部有機相）

$$\frac{y_{m,i}^{n+1}-y_{m,i}^{n}}{\Delta t}=-\frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{m}}y_{m,i}^{n+1}+\frac{F_{o,i-1}}{V_{o,i}^{m}}y_{s,i-1}^{n+1}+M_{mo,i}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(y_{m,i}^{n+1}))R_{mo,i}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{o,i}^{m}}\sum F_{o,i}^{f}y_{f,i} \quad (3.51)$$

（セトラ部水相）

$$\frac{x_{s,i}^{n+1}-x_{s,i}^{n}}{\Delta t}=\frac{1}{V_{a,i}^{s}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{m,i}^{n+1}-\frac{1}{V_{a,i}^{s}}(F_{a,i}+F_{a,i}^{r})x_{s,i}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(x_{s,i}^{n+1}))R_{sa,i}^{n+1}\right] \quad (3.52)$$

（セトラ部有機相）

$$\frac{y_{s,i}^{n+1}-y_{s,i}^{n}}{\Delta t}=\frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{s}}y_{m,i}^{n+1}-\frac{F_{o,i}}{V_{o,i}^{s}}y_{s,i}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(y_{s,i}^{n+1}))R_{so,i}^{n+1}\right] \quad (3.53)$$

３．２．３　ミキサセトラ両端における差分式

（１）有機相入口段

（ミキサ部水相）

$$\begin{aligned}\frac{x_{m,1}^{n+1}-x_{m,1}^{n}}{\Delta t}=&-\frac{1}{V_{a,1}^{m}}(F_{a,1}+F_{a,1}^{r})x_{m,1}^{n+1}+\frac{F_{a,1}^{r}}{V_{a,1}^{m}}x_{s,1}^{n+1}+\frac{F_{a,2}}{V_{a,1}^{m}}x_{s,2}^{n+1}+M_{ma,1}^{n+1}\\&+\sum\left[(\prod r(x_{m,1}^{n+1}))R_{ma,1}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{a,1}^{m}}\sum F_{a,1}^{f}x_{f,1}\end{aligned} \quad (3.54)$$

（ミキサ部有機相）

$$\frac{y_{m,1}^{n+1}-y_{m,1}^{n}}{\Delta t}=-\frac{F_{o,1}}{V_{o,1}^{m}}y_{m,1}^{n+1}+M_{mo,1}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(y_{m,1}^{n+1}))R_{mo,1}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{o,1}^{m}}\sum F_{o,1}^{f}y_{f,1} \quad (3.55)$$

（セトラ部水相）

$$\frac{x_{s,1}^{n+1}-x_{s,1}^{n}}{\Delta t}=\frac{1}{V_{a,1}^{s}}(F_{a,1}+F_{a,1}^{r})x_{m,1}^{n+1}-\frac{1}{V_{a,1}^{s}}(F_{a,1}+F_{a,1}^{r})x_{s,1}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(x_{s,1}^{n+1}))R_{sa,1}^{n+1}\right] \quad (3.56)$$

（セトラ部有機相）

$$\frac{y_{s,1}^{n+1}-y_{s,1}^{n}}{\Delta t}=\frac{F_{o,1}}{V_{o,1}^{s}}y_{m,1}^{n+1}-\frac{F_{o,1}}{V_{o,1}^{s}}y_{s,1}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(y_{s,1}^{n+1}))R_{so,1}^{n+1}\right] \quad (3.57)$$

（２）水相入口段

（ミキサ部水相）

$$\frac{x_{m,N}^{n+1}-x_{m,N}^{n}}{\Delta t}=-\frac{1}{V_{a,N}^{m}}(F_{a,N}+F_{a,N}^{r})x_{m,N}^{n+1}+\frac{F_{a,N}^{r}}{V_{a,N}^{m}}x_{s,N}^{n+1}+M_{ma,N}^{n+1}$$
$$+\sum\left[(\prod r(x_{m,N}^{n+1}))R_{ma,N}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{a,N}^{m}}\sum F_{a,N}^{f}x_{f,N} \tag{3.58}$$

（ミキサ部有機相）

$$\frac{y_{m,N}^{n+1}-y_{m,N}^{n}}{\Delta t}=-\frac{F_{o,N}}{V_{o,N}^{m}}y_{m,N}^{n+1}+\frac{F_{o,N-1}}{V_{o,N}^{m}}y_{s,N-1}^{n+1}+M_{mo,N}^{n+1}$$
$$+\sum\left[(\prod r(y_{m,N}^{n+1}))R_{mo,N}^{n+1}\right]+\frac{1}{V_{o,N}^{m}}\sum F_{o,N}^{f}y_{f,N} \tag{3.59}$$

（セトラ部水相）

$$\frac{x_{s,N}^{n+1}-x_{s,N}^{n}}{\Delta t}=\frac{1}{V_{a,N}^{s}}(F_{a,N}+F_{a,N}^{r})x_{m,N}^{n+1}-\frac{1}{V_{a,N}^{s}}(F_{a,N}+F_{a,N}^{r})x_{s,N}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(x_{s,N}^{n+1}))R_{sa,N}^{n+1}\right] \tag{3.60}$$

（セトラ部有機相）

$$\frac{y_{s,N}^{n+1}-y_{s,N}^{n}}{\Delta t}=\frac{F_{o,N}}{V_{o,N}^{s}}y_{m,N}^{n+1}-\frac{F_{o,N}}{V_{o,N}^{s}}y_{s,N}^{n+1}+\sum\left[(\prod r(y_{s,N}^{n+1}))R_{so,N}^{n+1}\right] \tag{3.61}$$

３．２．４　物質移動モデル

ミキサセトラでの分配平衡による二相間の物質移動は、ミキサ部のみでなされるモデルとなっている。ミキサ部での物質移動計算に当たっては、パルスカラムと同様、総括物質移動速度を考慮したモデルとしている（3.1.5 節参照）。

ミキサ部での単位体積（水相及び有機相の合計）あたりの二相接触界面積　a [m^{-1}] は次式[16]で与えられる。

$$a=K\frac{\phi_d}{C\ d_R}\left(\frac{d_R^3N^2\rho_c}{\sigma}\right)^{0.6} \tag{3.62}$$

$$C=1+9\phi_d \tag{3.63}$$

$$K=100 \tag{3.64}$$

ここで

a　：単位体積（水相及び有機相の合計）あたりの接触界面積

ϕ_d　：分散相ホールドアップ（※）

K　：文献[16] のモデルでは $K = 100$ となる。K はユーザ入力によって変更が可能である。

d_R　：攪拌翼の直径（※）

N　：攪拌翼の回転速度（※）

ρ_c　：連続相密度

σ　：界面張力

である。各量は、0.6 乗しているカッコ内（Weber 数）が正しく無次元となるよう適当な単位をとるものとする。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。

３．３　タンク

３．３．１　物質収支式

タンクの解析モデルを以下に示す。PARC で模擬できるタンクは、水相のみのタンク、有機相のみのタンクの二種類である。本モデルでのタンク内の液量（体積）は一定であり、変化しないとしている。また、タンク内での化学反応は考慮されている。

（水相タンク）

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{V_a} F_a x + \sum\left[(\prod r(x))R_a\right] + \frac{1}{V_a}\sum F_a^f x_f \tag{3.65}$$

$$y = 0 \tag{3.66}$$

（有機相タンク）

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{1}{V_o} F_o y + \sum\left[(\prod r(y))R_o\right] + \frac{1}{V_o}\sum F_o^f y_f \tag{3.67}$$

$$x = 0 \tag{3.68}$$

ここで

x ： 水相濃度

y ： 有機相濃度

V ： タンクの容積（= タンクの液量（一定））

R ： 化学反応量

F ： 流量

である。添字は、

a ： 水相

o ： 有機相

f ： フィードまたは他コンポーネントからの流入

である。

３．３．２　差分式

（水相タンク）

$$\frac{x^{n+1} - x^n}{\Delta t} = -\frac{1}{V_a} F_a x^{n+1} + \sum[(\prod r(x^{n+1}))R_a^{n+1}] + \frac{1}{V_a}\sum F_a^f x_f \tag{3.69}$$

$$y^{n+1} = 0 \tag{3.70}$$

（有機相タンク）

$$x^{n+1} = 0 \tag{3.71}$$

$$\frac{y^{n+1} - y^{n}}{\Delta t} = -\frac{1}{V_o} F_o y^{n+1} + \sum [(\prod r(y^{n+1})) R_o^{n+1}] + \frac{1}{V_o} \sum F_o^{f} y_f \tag{3.72}$$

３．４　物性値

パルスカラムにおける液滴径、逆混合係数、ホールドアップ、またミキサセトラにおける二相の接触界面積の算出に必要となる水相及び有機相の溶液密度、粘度、界面張力は以下のように算出する。

これらの物性値は、ユーザ入力によって各コンポーネント毎に設定し、コンポーネント内では一定として扱われる。

３．４．１　密度

パルスカラムにおける液滴径、逆混合係数、ホールドアップ、またミキサセトラにおける二相の接触界面積の算出に必要となる水相及び有機相の溶液密度は以下のように算出する[17]。

（１）水相密度

$$\rho_T = 1.0125 \cdot \rho_{25} + 0.000145 \cdot T - 0.0005 \cdot T \cdot \rho_{25} - 0.0036 \tag{3.73}$$

$$\rho_{25} = 1.0012 + 0.3177 x_{U6} + 0.22 x_{PU4} + 0.03096 x_H \tag{3.74}$$

ここで、

ρ_T	：T [℃] における水相密度	[g cm^{-3}]
ρ_{25}	：25 ℃における水相密度	[g cm^{-3}]
x_{U6}	：ウラン(VI)の水相濃度 (※)	[mol dm^{-3}]
x_{PU4}	：プルトニウム(IV)の濃度 (※)	[mol dm^{-3}]
x_H	：H^+の水相濃度 (※)	[mol dm^{-3}]
T	：溶液温度 (※)	[℃]

である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。x_{U6}, x_{PU4} 及び x_H は、コンポーネント毎に代表濃度を与えることとした。

（２）有機相密度

$$\rho_T = \rho_{25} + 0.318 y_{U6} + 0.028 y_H - 8 \times 10^{-4} (T - 25) \tag{3.75}$$

$$\rho_{25} = 0.972 \cdot F + (1 - F) \cdot 0.750 \tag{3.76}$$

ここで

ρ_T	：T [℃]における有機相密度	[g cm^{-3}]
ρ_{25}	：25 ℃における有機相密度	[g cm^{-3}]
y_{U6}	：ウラン(VI)の有機相濃度 (※)	[mol dm^{-3}]

y_H ：H^+の有機相濃度 (※) [mol dm^{-3}]
F ：有機相中の TBP の体積分率 (※) [-]
T ：溶液温度 (※) [℃]
である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。y_{U6}, y_{PU4} 及び y_H は、コンポーネント毎に代表濃度を与えることとした。

３．４．２　粘度

パルスカラムにおける液滴径、逆混合係数、ホールドアップ、またミキサセトラにおける二相の接触界面積の算出に必要となる溶液の粘度は以下のように算出する [17]。

（１）水相粘度

$$\log_{10}\mu = \left[0.9527 + 0.2426x_{U6} + 0.0100x_{U6}^2 + (0.0089 - 0.0023x_{U6})\cdot x_H\right] - 4 \tag{3.77}$$

ここで
μ ：水相粘度 [Pa s]
x_{U6} ：ウラン(VI)の水相濃度 (※) [mol dm^{-3}]
x_H ：H^+の水相濃度 (※) [mol dm^{-3}]
である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。x_{U6} 及び x_H は、コンポーネント毎に代表濃度を与えることとした。

（２）有機相粘度

$$\mu = \mu_{25℃} + 33\times10^{-4}\cdot y_{U6} \tag{3.78}$$

$$\log_{10}\mu_{25} = \left[F\cdot(1.345 + 0.36\cdot F) + (1-F)\cdot\log_{10}14\right] - 4 \tag{3.79}$$

ここで
μ ：有機相粘度 [Pa s]
μ_{25} ：温度 25℃における溶媒粘度 [Pa s]
（ウラン等が含まれていない TBP 及び n-ドデカンのみからなる溶媒）
y_{U6} ：ウラン(VI)の有機相濃度 (※) [mol dm^{-3}]
F ：有機相中の TBP の体積分率 (※) [-]
である。なお、（※）を付したパラメータはユーザ入力による固定値である。y_{U6} は、コンポーネント毎に代表濃度を与えることとした。

３．４．３　界面張力

パルスカラムにおける液滴径、逆混合係数、ホールドアップ、またミキサセトラにおける二相の接触界面積の算出に必要となる溶液の界面張力は以下のように算出する[17)]。

$$\sigma = 4.8 \times 10^{-2} \ [\mathrm{N\,m^{-1}}] \tag{3.80}$$

界面張力は、文献[17)]に例示されたものを現状組み込んでいる。接触する溶液の種類によって異なる場合には[18-19)]、例えばミキサセトラの接触界面積のモデル（3.2.4 節）の K 値を調整することで対応できる。

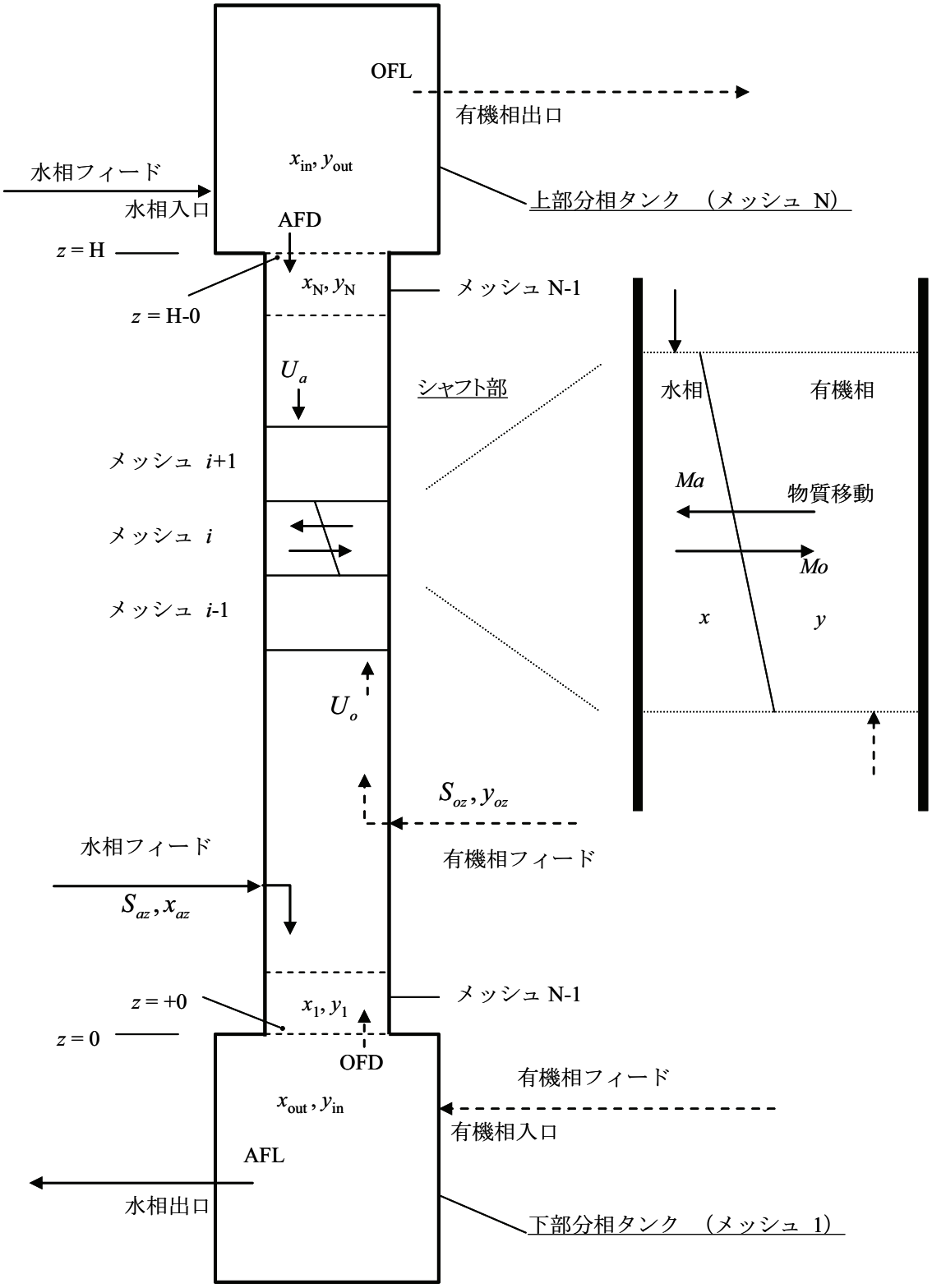


図３．１　PARC でのパルスカラムのモデル

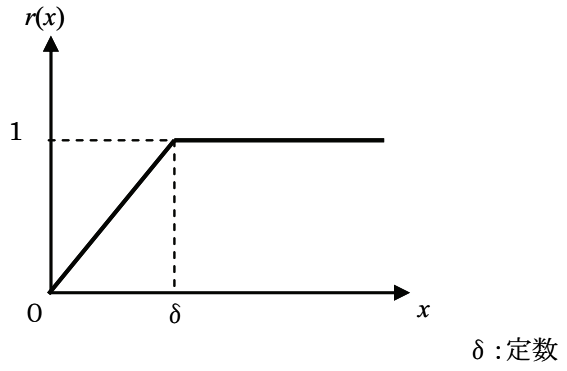


図３．２　化学反応項に係る $r(x)$ 関数

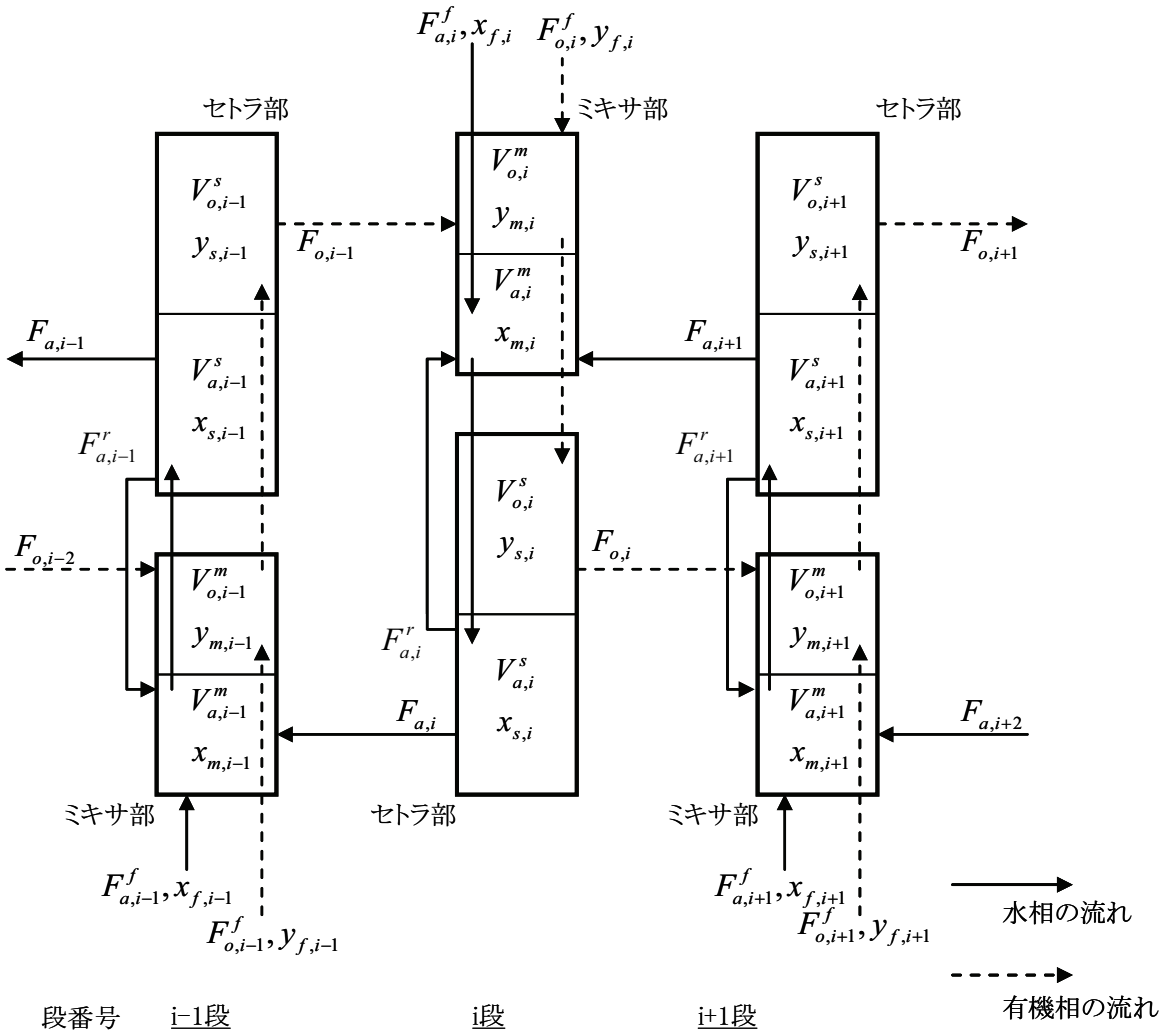


図３．３　PARC でのミキサセトラのモデル

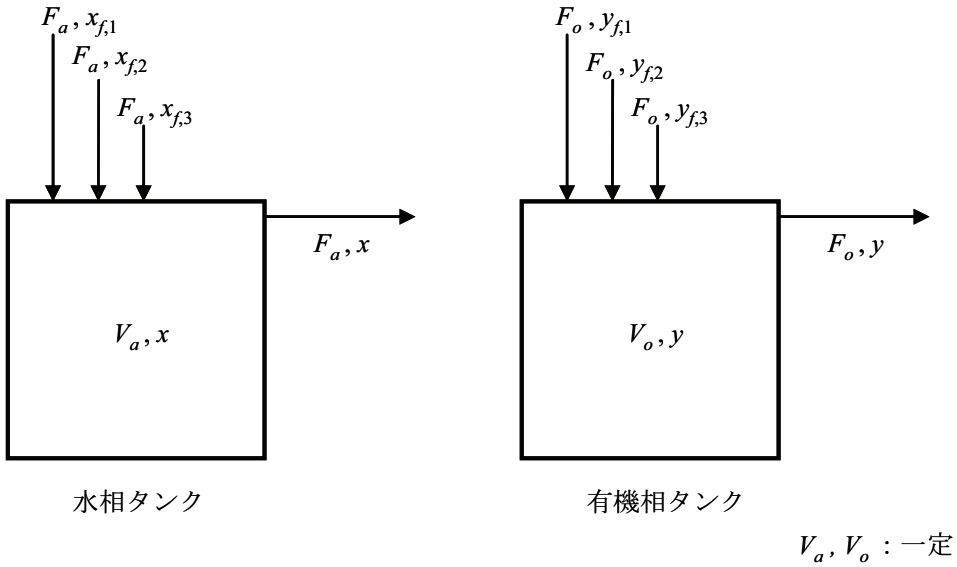


図３．４　PARC での水相タンク及び有機相タンクのモデル

4　化学種

PARC では、水相、有機相共に表 4.1 に示す 29 化学種が定義されている。以下の化学種からユーザが任意に計算対象とする化学種を選択することができる（8.4.2.1 節(3)参照）。また、インタプリタ機能の利用によりこれら以外の化学種の追加も可能である。

表４．１　PARC で扱うことができる 29 化学種

化学種 ID	化学種名称	単位変換係数（注１）	硝酸根濃度への寄与（注２）		フリーTBP 濃度計算で考慮する TBP 配位数（注３）
			xNO3	CN	
1	水素イオン	－	1	1	1 及び 2
2	ウラン(VI)	238.03	2	2	2
3	プルトニウム(IV)	239.0	4	4	2
4	プルトニウム(III)	239.0	3	3	2
5	ウラン(IV)	238.03	4	4	2
6	硝酸ヒドロキシルアミン（HAN）	－	0	1	0
7	硝酸ヒドラジン	－	0	1	0
8	亜硝酸	－	0	0	0
9	ジルコニウム	91.22	0	0	0
10	テクネチウム	98.0	0	0	0
11	ネプツニウム(IV)	237.0	4	4	2
12	ネプツニウム(V)	237.0	1	1	2
13	ネプツニウム(VI)	237.0	2	2	2
14	アジ化水素	－	0	0	0
15	iso-ブチルアルデヒド	－	0	0	0
16	n-ブチルアルデヒド	－	0	0	0
17	iso-酪酸	－	0	0	0
18	n-酪酸	－	0	0	0
19	ヨウ素	126.9	0	0	0
20	セシウム	132.9	0	0	0
21	ルテニウム(III)	101.1	0	0	0
22	プルトニウム(VI)	239.0	0	0	0
23	バナジウム(IV)	50.94	0	0	0
24	バナジウム(V)	50.94	0	0	0
25	リン酸ジブチル（DBP）	－	0	0	0
26	リン酸モノブチル（MBP）	－	0	0	0
27	リン酸	－	0	0	0
28	核分裂生成物（FP）（注４）	－	0	0	0
29	過酸化水素	－	0	0	0

（注１）　「単位変換係数」が定義されている化学種（ウラン、プルトニウム、ネプツニウム等）については、入出力ファイルにおける濃度表記の単位は g dm^{-3} とする。入力ファイルに記述された濃度設定は、単位変換係数で除され、単位が mol dm^{-3} に変換された上で化学反応速度等、各種計算を行う。出力時には mol dm^{-3} から g dm^{-3} に再変換されて表示される。硝酸ヒドロキシルアミン等、係数の欄が "－"となっている化学種は、g と mol の間の単位変換を行わない化学種であり、従って入力ファイル中での濃度指定の単位は mol dm^{-3} とする。

（注２）　分配比の計算に当たって硝酸根の濃度を用いる場合、その化学種の濃度を考慮するかどうかを表す。PARC では、"x_{NO3}" 及び "*CN*" なる二種類の濃度変数を保持しており、各々定義が異なっている（5.1 節参照）。

（注３）　分配比の計算に当たってフリーTBP 濃度を用いる場合、フリーTBP 濃度の算出に当たってその化学種の濃度を考慮するかどうかを表す（式(6.1)等参照）。

（注４）　ここでいう「核分裂生成物（FP）」とは、PARC に未定義の FP 化学種をまとめて一つの化学種であるかのように総称して定義したもの。将来的な機能拡張を想定した定義である。

５　化学反応速度

PARC コードでは、以下の化学反応式及び反応速度式が定義され組み込まれている。また、インタプリタ機能を利用することで、各反応速度式の変更、これら以外の反応の追加定義が可能である。また、原子力機構がまとめた「再処理プロセス・化学ハンドブック」[19] が参考となる。

５．１　水相に関する化学反応速度式

水相中の化学反応式は以下のとおりである。*RX* で始まる定数は、キーワードデータとして定義されており、ユーザが作成する入力ファイルにおいて任意に変更が可能である（8.2 節参照）。

（１）プルトニウム(IV)のウラン(IV)による還元反応 [13) 20)]

$$U^{4+} + 2\,Pu^{4+} + 2\,H_2O \rightarrow UO_2^{2+} + 2\,Pu^{3+} + 4\,H^+ \tag{5.1}$$

$$\frac{dx_{PU4}}{dt} = -RX0101 \cdot \frac{x_{U4} \cdot x_{PU4}}{x_H^2} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.2}$$

$RX0101 = 1.5\times10^2$

ここで、

x_H, x_{PU4}, x_{U4}：各々、H^+, Pu(IV), U(IV)の水相濃度 [mol dm^{-3}]

である。以下同様とする。

（２）プルトニウム(IV)の硝酸ヒドロキシルアミンによる還元反応 [2) 13) 21)]

$$2\,Pu^{4+} + 2\,NH_3OH^+ \rightarrow 2\,Pu^{3+} + 4\,H^+ + 2\,H_2O + N_2 \tag{5.3}$$

$$\frac{dx_{PU4}}{dt} = -\frac{k_1 \cdot x_{PU4}^2 \cdot x_{HAN}^2}{x_{PU3}^2 \cdot x_H^4 \cdot \left(1+\beta_1 x_{NO3}\right)^2} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.4-a}$$

$k_1 = RX0201\ \exp(-RX0202/T)$ (5.4-b)

$\beta_1 = RX0203\ \exp(-RX0204/T)$ (5.4-c)

$RX0201 = 2\times10^{33}$

$RX0202 = 22100$

$RX0203 = 31650$

$RX0204 = 2625$

T：温度　[K]

$$x_{NO3} = x_H + 2\,x_U + 4\,x_{PU4} + 3\,x_{PU3} + 4\,x_{U4} + 4\,x_{NP4} + x_{NP5} + 2\,x_{NP6} \tag{5.4-d}$$

（３）プルトニウム(III)の酸化反応 [13)]

$$2\ Pu^{3+} + 3\ H^{+} + NO_3^{-} \rightarrow 2\ Pu^{4+} + HNO_2 + H_2O \tag{5.5}$$

(i)　x_{NO2} ＜ 10^{-4} のとき

$$\frac{dx_{PU3}}{dt} = -RX0301 \cdot x_{PU3} \cdot x_H^{1.8} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.6-a}$$

$RX0301 = 5.1\times10^{-3}$

(ii)　$10^{-4} \leqq x_{NO2}$ ＜ 2.3×10^{-2} のとき

$$\frac{dx_{PU3}}{dt} = 10^{-(1.3\log_{10} x_H + RX0302)} \cdot x_{PU3} \cdot x_{NO2}^{(0.44-\log_{10} x_H)} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.6-b}$$

$RX0302 = 0.54$

(iii)　$2.3\times10^{-2} \leqq x_{NO2}$ のとき

$$\frac{dx_{PU3}}{dt} = -RX0303 \cdot x_{PU3} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.6-c}$$

$RX0303 = 5.5\times10^{-2}$

（４）ウラン(IV)の酸化反応 [13) 22)]

$$U^{4+} + NO_3^{-} + H_2O \rightarrow UO_2^{2+} + H^{+} + HNO_2 \tag{5.7}$$

(i) x_H ＜ 0.8 のとき

$$\frac{dx_{U4}}{dt} = -RX0401 \cdot x_{U4} \cdot x_{NO2}^{0.38} \cdot x_H^{2.7} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.8-a}$$

(ii) $0.8 \leqq x_H$ のとき

$$\frac{dx_{U4}}{dt} = -RX0402 \cdot x_{U4} \cdot x_{NO2}^{0.38} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.8-b}$$

$RX0401 = 2.5\times10^{-2}$

$RX0402 = 1.3\times10^{-2}$

（５）ウラン(IV)の空気による酸化反応 [13) 23) 24)]

$$2\ U^{4+} + O_2 + H_2O \rightarrow 2\ UO_2^{2+} + 4\ H^{+} \tag{5.9}$$

$$\frac{dx_{U4}}{dt} = -RX0501 \cdot \frac{x_{U4}}{x_H} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.10}$$

$RX0501 = 2.5\times10^{-4}$

（６）亜硝酸のヒドラジンによる分解 [13) 25)]

$$N_2H_5^{+} + HNO_2 \rightarrow H^{+} + 2\ H_2O + HN_3 \tag{5.11}$$

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = -RX0601 \cdot x_H \cdot x_{NO2} \cdot x_{HYD} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.12)$$

$RX0601 = 3.7\times10^4$

（７）亜硝酸の硝酸ヒドロキシルアミンによる分解 [13) 26)]

$$HNO_2 + NH_3OH^+ \rightarrow H^+ + 2\ H_2O + N_2O \qquad (5.13)$$

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = -k_1 \cdot x_{NO2} \cdot x_{HAN} \cdot x_H \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.14)$$

$k_1 = RX0701 \exp(-RX0702 / T)$

$RX0701 = 7.59\times10^{11}$

$RX0702 = 6350$

（８）放射線による硝酸からの亜硝酸の生成

現状では、反応速度は 0 に固定している。

$$HNO_3 \rightarrow HNO_2 \qquad (5.15)$$

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = 0 \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.16)$$

（９）放射線による亜硝酸の分解

現状では、反応速度は 0 に固定している。

$$HNO_2 + H_2O \rightarrow NO_3^- + H^+ + H_2 \qquad (5.17)$$

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = 0 \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.18)$$

（１０）テクネチウムの触媒作用によるヒドラジンの分解反応 [27) 28)]

$$\frac{dx_{HYD}}{dt} = -a \cdot x_{TC} \cdot \left(\frac{x_{HYD}}{0.1}\right)^{0.66} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.19\text{-a})$$

$$a = RX1001 \cdot \exp\left(-\frac{RX1002}{RT}\right) \qquad (5.19\text{-b})$$

$RX1001 = 2.8333\times10^{11}$

$RX1002 = 71000$

$R = 8.3145$

T ： 温度 [K]

（１１）ネプツニウム(V)の酸化反応 [29) 30) 31)]

$$2\ NpO_2^{+} + NO_3^{-} + 3\ H^{+} \rightarrow 2\ NpO_2^{2+} + HNO_2 + H_2O \tag{5.20}$$

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX1101 \cdot C_N^2 \frac{x_H^{1.3} \cdot x_{NO2} \cdot x_{NP5}}{x_{NO2} + x_{NP5}} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.21-a}$$

$RX1101 = 1.8\times10^{-3}$

$$C_N = x_H + 2\ x_{U6} + 4\ x_{PU4} + 3\ x_{PU3} + 4\ x_{U4} + x_{HAN} + x_{HYD} + 4\ x_{NP4} + x_{NP5} + 2\ x_{NP6} \tag{5.21-b}$$

（１２）ネプツニウム(IV)の酸化反応 [29) 31)]

$$2\ Np^{4+} + NO_3^{-} + 3\ H_2O \rightarrow 2\ NpO_2^{+} + HNO_2 + 5\ H^{+} \tag{5.22}$$

$$\frac{dx_{NP4}}{dt} = -RX1201 \cdot x_{NP4} \cdot x_{NP5} \cdot x_{NO2}^{-0.5} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.23}$$

$RX1201 = 1.9\times10^{-3}$

（１３）ネプツニウム (VI)のウラン(IV)による還元反応 [32)]

$$2\ NpO_2^{2+} + U^{4+} + 2H_2O \rightarrow 2\ NpO_2^{+} + UO_2^{2+} + 4\ H^{+} \tag{5.24}$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -RX1301 \cdot x_{NP6} \cdot x_{U4} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.25}$$

$RX1301 = 14.4$

（１４）ネプツニウム(V) のウラン(IV)による還元反応

$$2\ NpO_2^{+} + U^{4+} + 4\ H^{+} \rightarrow 2\ Np^{4+} + UO_2^{2+} + 2H_2O \tag{5.26}$$

次の①又は②の反応をユーザ入力によって選択可能とした。

① REACT コードの式 [33) 34) 35)]

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX1401 \cdot x_{NP5} \cdot x_{U4} \cdot \left(\frac{RX1402}{x_H^2} + RX1403 \cdot x_H \right) \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.27}$$

$RX\ 1401 = 4.5$

$RX\ 1402 = 1.6$

$RX\ 1403 = 1.42$

② Advanced-MIXSET コードの式 [36) 37)]

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX1404 \cdot x_{NP5} \cdot x_{U4} - RX1405 \cdot x_{NP4} \cdot x_{U4} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.28)$$

$RX\,1404 = 0.1$

$RX\,1405 = 0.62$

（１５）ネプツニウム(VI)の硝酸ヒドロキシルアミンによる還元反応 [38)]

$$2\ NpO_2^{2+} + 2\ NH_3OH^+ \rightarrow 2\ NpO_2^+ + 4\ H^+ + N_2 + 2\ H_2O \qquad (5.29)$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -RX1501 \cdot \frac{x_{NP6} \cdot x_{HAN}}{x_H} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.30)$$

$RX1501 = 92.1$

（１６）ネプツニウム(VI)のヒドラジンによる還元反応 [39)]

$$2\ NpO_2^{2+} + 2\ N_2H_5^+ \rightarrow 2\ NpO_2^+ + 2\ H^+ + N_2 + 2\ NH_4^+ \qquad (5.31)$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -RX1601 \cdot \frac{x_{NP6} x_{HYD}}{x_H^{1.3}} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.32)$$

$RX1601 = 8.3$

（１７）ネプツニウム(IV)のプルトニウム(IV)による酸化反応 [40)]

$$Pu^{4+} + Np^{4+} + 2H_2O \rightarrow Pu^{3+} + NpO_2^+ + 4H^+ \qquad (5.33)$$

$$\frac{dx_{NP4}}{dt} = -RX1701 \cdot \frac{x_{NP4} x_{PU4}}{x_H^4} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.34)$$

$RX\,1701 = 70.0$

（１８）ネプツニウム(VI)のプルトニウム(III)による還元反応 [41)]

$$Pu^{3+} + NpO_2^{2+} \rightarrow Pu^{4+} + NpO_2^+ \qquad (5.35)$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -x_{PU3} x_{NP6} (RX1801 + \frac{RX1802}{x_H}) \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.36)$$

$RX1801 = 2130.0$

$RX1802 = 186.0$

（１９）ネプツニウム(V)のプルトニウム(III)による還元反応 [29) 33) 34) 42)]

$$Pu^{3+} + NpO_2^+ + 4H^+ \rightarrow Pu^{4+} + Np^{4+} + 2H_2O \qquad (5.37)$$

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX1901 \cdot \frac{x_{PU3} x_{NP5}}{x_H^{1.3}} \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.38)$$

$RX1901 = 5.98\times10^{-2}$

（２０）ネプツニウムの不均化反応

①ネプツニウム(VI)及びネプツニウム(IV)の生成 [40)]

$$2\ NpO_2^{+} + 4H^{+} \rightarrow NpO_2^{2+} + Np^{4+} + 2\ H_2O \qquad (5.39)$$

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX2001 \cdot x_H^2 \cdot x_{NP5}^2 \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.40)$$

$RX2001 = 1.6\times10^{-3}$

②ネプツニウム(V)の生成 [33) 34) 43) 44) 45)]

$$NpO_2^{2+} + Np^{4+} + 2\ H_2O \rightarrow 2\ NpO_2^{+} + 4H^{+} \qquad (5.41)$$

$$\frac{dx_{NP4}}{dt} = -RX2002 \cdot x_{NP4} \cdot x_{NP6} (RX2003 + RX2004 \cdot C_N) \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.42\text{-a})$$

$RX2002=2.5$

$RX2003=2.16$

$RX2004=12.5$

$$C_N = x_H + 2\ x_{U6} + 4\ x_{PU4} + 3\ x_{PU3} + 4\ x_{U4} + x_{HAN} + x_{HYD} + 4\ x_{NP4} + x_{NP5} + 2\ x_{NP6} \qquad (5.42\text{-b})$$

（２１）ネプツニウム(VI)の iso-ブチルアルデヒドによる還元反応 [46)]

$$NpO_2^{2+} + \text{iso-}C_3H_7CHO + H_2O \rightarrow NpO_2^{+} + \text{iso-}C_3H_7COOH + H^{+} \qquad (5.43)$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -RX2101 \cdot \exp(-RX2102/T) \cdot x_{NP6} \cdot x_{IBAL} \cdot x_H \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.44)$$

$RX2101 = 6.0\times10^{6}$

$RX2102 = 4.1\times10^{3}$

（２２）ネプツニウム(VI)の n-ブチルアルデヒドによる還元反応 [46)]

$$NpO_2^{2+} + \text{n-}C_3H_7CHO + H_2O \rightarrow NpO_2^{+} + \text{n-}C_3H_7COOH + H^{+} \qquad (5.45)$$

$$\frac{dx_{NP6}}{dt} = -RX2201 \cdot \exp(-RX2202/T) \cdot x_{NP6} \cdot x_{NBAL} \cdot x_H \qquad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \qquad (5.46)$$

$RX2201 = 4.2\times10^{4}$

$RX2202 = 3.4\times10^{3}$

（２３）プルトニウム(IV)の iso-ブチルアルデヒドによる還元反応 [47)]

$Pu^{4+} + iso\text{-}C_3H_7CHO + H_2O \rightarrow Pu^{3+} + iso\text{-}C_3H_7COOH + H^+$ (5.47)

$$\frac{dx_{PU4}}{dt} = -RX2301 \cdot x_{PU4} \cdot x_{IBAL} \cdot x_H \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.48)$$

$RX2301 = 3.8$

（２４）バナジウム(V)によるネプツニウム(V)の酸化反応 [48)]

$NpO_2^+ + VO_2^+ + 2H^+ \rightarrow NpO_2^{2+} + VO^{2+} + H_2O$ (5.49)

$$\frac{dx_{NP5}}{dt} = -RX2401 \cdot \exp(-\frac{RX2402}{RT}) \cdot x_H^2 \cdot x_{V5} \cdot x_{NP5} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.50)$$

$RX2401 = 1.5884\times10^9$

$RX2402 = 4.6492\times10^4$

（２５）TBP の化学劣化反応 [49)]

$DBP \rightarrow MBP \rightarrow H_3PO_4$ (5.51)

$$\frac{dx_{DBP}}{dt} = -k_2 \cdot x_{DBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.52)$$

$$\frac{dx_{MBP}}{dt} = k_2 \cdot x_{DBP} - k_3 \cdot x_{MBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.53)$$

$$\frac{dx_{PO4}}{dt} = k_3 \cdot x_{MBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.54)$$

$k_2 = F_2(x_H)$ (5.55-a)

$F_2(x_H)$ ： 以下の３点（x_H=0.5, 3.0, 6.0）での反応速度を線型内挿する。

$$F_2(0.5) = 3.08\times10^{13} \cdot \exp(-\frac{1.344\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.55\text{-b})$$

$$F_2(3.0) = 3.67\times10^{13} \cdot \exp(-\frac{1.299\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.55\text{-c})$$

$$F_2(6.0) = 1.64\times10^{11} \cdot \exp(-\frac{1.083\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.55\text{-d})$$

$k_3 = F_3(x_H)$ (5.56-a)

$F_3(x_H)$ ： 以下の３点（x_H=0.5, 3.0, 6.0）での反応速度を線型内挿する。

$$F_3(0.5) = 8.21\times10^{11} \cdot \exp(-\frac{1.244\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.56\text{-b})$$

$$F_3(3.0) = 1.28\times10^{12} \cdot \exp(-\frac{1.213\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.56\text{-c})$$

$$F_3(6.0) = 7.87\times10^{10}\cdot\exp(-\frac{1.098\times10^4}{T})/60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \tag{5.56-d}$$

（２６）硝酸の放射線分解

将来的な拡張を考慮したもので、現状で反応速度は 0 に固定している。

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = 0 \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.57}$$

$$\frac{dx_{H2O2}}{dt} = 0 \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.58}$$

（２７）亜硝酸の気相への分解

将来的な拡張を考慮したもので、現状で反応速度は 0 に固定している。

$$\frac{dx_{NO2}}{dt} = 0 \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.59}$$

５．２　有機相に関する化学反応速度式

有機相中の化学反応式は以下のとおりである。*RY* で始まる定数は、キーワードデータとして定義されており、ユーザが作成する入力ファイルにおいて任意に変更が可能である（8.2 節参照）。

（１）プルトニウム(IV)のウラン(IV)による還元反応 [13) 20)]

$$U^{4+} + 2\ Pu^{4+} + 2\ H_2O \rightarrow UO_2^{2+} + 2\ Pu^{3+} + 4\ H^+ \tag{5.60}$$

$$\frac{dy_{PU4}}{dt} = -RY0101\cdot\frac{y_{U4}y_{PU4}}{y_H^2} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.61}$$

$RY0101 = 6.5$

（２）プルトニウム(III)の再酸化反応 [13) 20)]

$$2\ Pu^{3+} + 3\ H^+ + NO_3^- \rightarrow 2\ Pu^{4+} + HNO_2 + H_2O \tag{5.62}$$

$$\frac{dy_{PU3}}{dt} = -RY0201\cdot y_{PU3}\cdot y_{NO2}\cdot y_H^{3.1} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \tag{5.63}$$

$RY0201 = 1.5\times10^{-1}$

（３）ウラン(IV)の亜硝酸による酸化反応 [13) 22)]

$U^{4+} + NO_3^- + H_2O \rightarrow UO_2^{2+} + H^+ + HNO_2$ (5.64)

(i) $y_H \leqq 0.34$ のとき

$$\frac{dy_{U4}}{dt} = -RY0301 \cdot y_{U4} \cdot y_{NO2}^{0.49} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.65\text{-a})$$

$RY0301 = 1.6\times10^{-2}$,

(ii) $0.34 < y_H$ のとき

$$\frac{dy_{U4}}{dt} = -RY0302 \cdot y_{U4} \cdot y_H^{0.63} \cdot y_{NO2}^{0.49} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.65\text{-b})$$

$RY0302 = 4.0\times10^{-2}$

（４）ウラン(IV)の空気による酸化反応 [13) 23)]

$2\ U^{4+} + O_2 + H_2O \rightarrow 2\ UO_2^{2+} + 4\ H^+$ (5.66)

$$\frac{dy_{U4}}{dt} = -RY0401 \cdot \frac{y_{U4}}{y_H^{0.86}} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.67)$$

$RY0401 = 3.2\times10^{-3}$

（５）TBP の化学劣化反応 [49)]

$TBP \rightarrow DBP \rightarrow MBP \rightarrow H_3PO_4$ (5.68)

$$\frac{dy_{DBP}}{dt} = k_1 \cdot T_0 - k_2 \cdot y_{DBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.69)$$

$$\frac{dy_{MBP}}{dt} = k_2 \cdot y_{DBP} - k_3 \cdot y_{MBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.70)$$

$$\frac{dy_{PO4}}{dt} = k_3 \cdot y_{MBP} \quad [\mathrm{mol\ dm^{-3}\ min^{-1}}] \quad (5.71)$$

T_0 ： TBP 濃度

$k_1 = F_1(y_H) / e$ (5.72-a)

$F_1(y_H)$ ： 以下の３点（x_H=0.5, 3.0, 6.0）での反応速度を線型内挿する。

$$F_1(0.5) = 5.69\times10^{12} \cdot \exp(-\frac{1.244\times10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.72\text{-b})$$

$$F_1(3.0) = 7.05\times10^{13} \cdot \exp(-\frac{1.289\times10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.72\text{-c})$$

$$F_1(6.0) = 1.11\times10^{11} \cdot \exp(-\frac{1.042\times10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min^{-1}}] \quad (5.72\text{-d})$$

$e = 2.718$

$k_2 = F_2(y_{\mathrm{H}}) / e$ (5.73-a)

$F_2(y_{\mathrm{H}})$ ： 以下の３点（x_H=0.5, 3.0, 6.0）での反応速度を線型内挿する。

$$F_2(0.5) = 3.08 \times 10^{13} \cdot \exp(-\frac{1.344 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.73-b}$$

$$F_2(3.0) = 3.67 \times 10^{13} \cdot \exp(-\frac{1.299 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.73-c}$$

$$F_2(6.0) = 1.64 \times 10^{11} \cdot \exp(-\frac{1.083 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.73-d}$$

$k_3 = F_3(y_{\mathrm{H}}) / e$ (5.74-a)

$F_3(y_{\mathrm{H}})$ ： 以下の３点（x_H=0.5, 3.0, 6.0）での反応速度を線型内挿する。

$$F_3(0.5) = 8.21 \times 10^{11} \cdot \exp(-\frac{1.244 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.74-b}$$

$$F_3(3.0) = 1.28 \times 10^{12} \cdot \exp(-\frac{1.213 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.74-c}$$

$$F_3(6.0) = 7.87 \times 10^{10} \cdot \exp(-\frac{1.098 \times 10^4}{T}) / 60.0 \quad [\mathrm{min}^{-1}] \tag{5.74-d}$$

６ 分配比

PARC に組み込まれている各化学種の分配比の算出式は以下のとおりである。*D* で始まる定数（*DH*01, *DH*02, *DU*601 等）は、キーワードデータとして定義されており、インタプリタ機能を利用することで任意に変更が可能である（8.2 節参照）。また、原子力機構がまとめた「再処理プロセス・化学ハンドブック」[19] が参考となる。

（１）水素イオンの分配比

Richardson によるモデルを参考としている [2) 13) 50)]。

$$D_H = K_{1,H} \cdot T_f + K_{2,H} \cdot T_f^2 \tag{6.1-a}$$

$$K_{1,H} = (DH01 \cdot x_{NO3}^{0.82} + DH02 \cdot x_{NO3}^{3.44}) \cdot (1 - DH03 \cdot e^{-DH04 \cdot F}) \cdot e^{DH05 \cdot \tau} \tag{6.1-b}$$

$$K_{2,H} = K_{1,H} \tag{6.1-c}$$

$$\tau = \frac{1}{T} - \frac{1}{298}$$

T :	溶液温度	[K]
F :	有機相中の TBP フラクション	[-]
T_f :	フリーTBP 濃度	[mol/L]

$$x_{NO3} = x_H + 2x_{U6} + 4x_{PU4} + 3x_{PU3} + 4x_{U4} + 4x_{NP4} + x_{NP5} + 2x_{NP6} \tag{6.1-d}$$

*DH*01 = 0.135	*DH*02 = 0.0052
*DH*03 = 0.54	*DH*04 = 15
*DH*05 = 340	

（２）ウラン(VI)の分配比

Richardson によるモデルを参考としている [2) 13) 50)]。

$$D_{U6} = K_{2,U6} \cdot T_f^2 \tag{6.2-a}$$

$$\begin{aligned} K_{2,U6} = {} & (DU601 \cdot x_{NO3}^{1.57} + DU602 \cdot x_{NO3}^{3.9} + DU603 \cdot x_{NO3}^{7.3}) \\ & \cdot (DU604 \cdot F^{-0.17} - DU605) \cdot e^{DU606 \cdot \tau} \end{aligned} \tag{6.2-b}$$

*DU*601 = 3.7	*DU*602 = 1.4
*DU*603 = 0.011	*DU*604 = 4
DU 605 = 3	*DU* 606 = 2500

（３）プルトニウム(IV)の分配比

Richardson によるモデルを参考としている [2) 13) 50)]。

$$D_{PU4} = K_{2,PU4} \cdot T_f^2 \tag{6.3-a}$$

$$\begin{aligned} K_{2,PU4} = &(DPU401 \cdot x_{NO3}^{1.57} + DPU402 \cdot x_{NO3}^{3.9} + DPU403 \cdot x_{NO3}^{7.3}) \\ &\cdot (DPU404 \cdot F^{-0.17} - DPU405) \\ &\cdot (DPU406 + DPU407 \cdot F^{1.25} + DPU408 \cdot x_{NO3}^{2}) \cdot e^{-DPU409 \cdot \tau} \end{aligned} \tag{6.3-b}$$

$DPU401 = 3.7$　　$DPU402 = 1.4$

$DPU403 = 0.011$　　$DPU404 = 4$

$DPU405 = 3$　　$DPU406 = 0.2$

$DPU407 = 0.55$　　$DPU408 = 0.0074$

$DPU409 = 200$

（４）プルトニウム(III)の分配比

Richardson によるモデルを参考としている [2) 13) 50)]。

$$D_{PU3} = K_{2,PU3} \cdot T_f^2 \tag{6.4-a}$$

$$K_{2,PU3} = DPU301 \cdot x_{NO3}^{1.8} + DPU302 \cdot F \cdot x_{NO3}^{7}, \tag{6.4-b}$$

$DPU301 = 0.04$

$DPU302 = 0.000156$

（５）ウラン(IV)の分配比

Revised-MIXSET のモデルを参考としている [13) 23)]。

$$D_{U4} = K_{2,U4} \cdot T_f^2 \tag{6.5-a}$$

$$K_{2,U4} = e^{-DU401 + DU402 \cdot x_{NO3}} \tag{6.5-b}$$

$DU401 = 3.336$

$DU402 = 1.9331$

（６）亜硝酸の分配比

宝徳らによる試験データ[51]から導出した。

$$D_{NO2} = K_{1,NO2} \cdot T_f \tag{6.6-a}$$

$$K_{1,NO2} = DN0201 \cdot x_H^{-0.280} - DN0202 \cdot x_H^{-0.543} \tag{6.6-b}$$

$DN0201 = 24.8$

$DN0202 = 3.209$

（７）ジルコニウムの分配比

Alcock のデータ等[52)53)]から導出した。

$$D_{ZR} = K_{2,ZR} \cdot T_f^2 \tag{6.7-a}$$

$$K_{2,ZR} = \exp(-DZR01 + DZR02 \cdot x_{NO3}) \tag{6.7-b}$$

$DZR01 = 5.19$

$DZR02 = 1.85$

（８）テクネチウムの分配比

Kolarik によるモデル[54]を参考とした。

$$D_{TC} = D_{TC,0} + D_{TC,U} + D_{TC,PU} + D_{TC,ZR} \tag{6.8-a}$$

$$D_{TC,0} = K_{TC} \cdot \theta, \tag{6.8-b}$$

$$K_{TC} = \frac{N_1}{N_2} \tag{6.8-c}$$

$$N_1 = DTC01 \cdot \exp(DTC02 \cdot \tau) \cdot x_{NO3}^{DTC03 \cdot \exp(DTC04 \cdot \tau)} \tag{6.8-d}$$

$$\begin{aligned} N_2 = 1 &+ DTC05 \cdot \exp(DTC06 \cdot \tau) \cdot x_{NO3}^{DTC07 \cdot \exp(DTC08 \cdot \tau)} \\ &+ DTC09 \cdot \exp(DTC10 \cdot \tau) \cdot x_{NO3}^{DTC11 \cdot \exp(DTC12 \cdot \tau)} \end{aligned} \tag{6.8-e}$$

$$\theta = DTC13 \cdot \exp(-DTC14 \cdot \tau) \cdot T_f^{DTC15 \cdot EXP(DTC16 \cdot \tau)} \tag{6.8-f}$$

$$D_{TC,U} = \frac{y_{U6}^2}{y_{U6} + y_{PU4}} \cdot DTC17 \cdot \exp(-DTC18 \cdot \tau) \cdot (1 + DTC19 \cdot \exp(DTC20 \cdot \tau) \cdot x_{NO3}^{-1.343}) \tag{6.8-g}$$

$$D_{TC,PU} = \frac{y_{PU4}^2}{y_{U6} + y_{PU4}} \cdot DTC21 \cdot \exp(-DTC22 \cdot \tau) \cdot x_{NO3}^{-0.707} \tag{6.8-h}$$

$$D_{TC,ZR} = DTC23 \cdot \exp(DTC24 \cdot \tau) \cdot y_{ZR} \cdot x_{NO3}^{-0.707} \tag{6.8-i}$$

$DTC01 = 2.324$	$DTC02 = 8070$	$DTC03 = 0.848$
$DTC04 = 230$	$DTC05 = 0.157$	$DTC06 = 3240$
$DTC07 = 4.69$	$DTC08 = 410$	$DTC09 = 1.72$
$DTC10 = 3150$	$DTC11 = 1.95$	$DTC12 = 160$
$DTC13 = 0.845$	$DTC14 = 350$	$DTC15 = 1.92$
$DTC16 = 3300$	$DTC17 = 0.331$	$DTC18 = 1060$
$DTC19 = 4.87$	$DTC20 = 980$	$DTC21 = 5.0 \times 6.62$
$DTC22 = 1060$	$DTC23 = 1670$	$DTC24 = 2810$

（９）ネプツニウム(IV)の分配比

Petrich による分配データ集 [55] より導出した。

ユーザ入力により、以下の①又は②のいずれかを選択可能となっている。Np(VI)の分配比計算式の選択と連動していることに注意（8.4.2.1 節(28)、8.3.5 節参照）。

① フリーTBP 濃度の３乗に比例する式

$$D_{NP4} = K_{3,NP4} \cdot T_f^3 \tag{6.9-a}$$

$$K_{3,NP4} = DNP401 \cdot \exp(DNP402 \cdot x_{NO3}) \cdot x_{NO3}^{0.867} \tag{6.9-b}$$

$DNP401 = 0.132$

$DNP402 = 1.87$

② フリーTBP 濃度の２乗に比例する式

$$D_{NP4} = K_{2,NP4} \cdot T_f^2 \tag{6.10-a}$$

$$K_{2,NP4} = 10^{-DNP403 + DNP404 \cdot x_{NO3} - DNP405 \cdot x_{NO3}^2} \tag{6.10-b}$$

$DNP403 = 1.176724$

$DNP404 = 1.055994$

$DNP405 = 0.04123843$

（１０）ネプツニウム(V)の分配比

Advanced-MIXSET [36] のモデルを参考とした。

$$D_{NP5} = K_{1,NP5} \cdot T_f \tag{6.11-a}$$

$$K_{1,NP5} = DNP501 \cdot x_{NO3}^{1.41} \tag{6.11-b}$$

$DNP501 = 0.0234$

（１１）ネプツニウム(VI)の分配比

Petrich による分配データ集 [55] より導出した。

ユーザ入力により、以下の２種類のうちいずれかを選択可能となっている。Np(VI)の分配比計算式の選択と連動していることに注意（8.4.2.1 節(28)参照）。

① フリーTBP 濃度の 3 乗に比例する式

$$D_{NP6} = K_{3,NP6} \cdot T_f^3 \tag{6.12-a}$$

$$K_{3,NP6} = DNP601 \cdot \exp(DNP602 \cdot x_{NO3}) \cdot x_{NO3}^{0.834} \tag{6.12-b}$$

$DNP601 = 2.10$

$DNP602 = 1.56$

② フリーTBP 濃度の 2 乗に比例する式

$$D_{NP6} = K_{2,NP6} \cdot T_f^2 \tag{6.13-a}$$

$$K_{2,NP6} = 10^{-DNP603 + DNP604 \cdot x_{NO3} - DNP605 \cdot x_{NO3}^2} \tag{6.13-b}$$

$DNP603 = 0.01279311$

$DNP604 = 0.844549$

$DNP605 = 0.03396187$

（１２）アジ化水素の分配比

Kelmers らによるデータ [19) 56)] を参考にした。

$$D_{HN3} = K_{1,HN3} \cdot T_f \tag{6.14-a}$$

$$K_{1,HN3} = DHN301 \tag{6.14-b}$$

$DHN301 = 9$

（１３）iso-ブチルアルデヒドの分配比

内山によるモデル [57)] を参考にした。

$$D_{IBAL} = K_{0,IBAL} \tag{6.15-a}$$

$$\begin{aligned} K_{0,IBAL} = {} & DIBAL01 \cdot x_{NO3}^4 + DIBAL02 \cdot x_{NO3}^3 + DIBAL \cdot x_{NO3}^2 \\ & - DIBAL04 \cdot x_{NO3} + DIBAL05 \end{aligned} \tag{6.15-b}$$

$DIBAL01 = 0.00175$　　$DIBAL02 = 0.04555$

$DIBAL03 = 0.4214$　　$DIBAL04 = 1.799$

$DIBAL05 = 4.892$

（１４）n-ブチルアルデヒドの分配比

内山によるモデル [57)] を参考にした。

$$D_{NBAL} = K_{0,NBAL} \tag{6.16-a}$$

$$\begin{aligned} K_{0,NBAL} = {} & DNBAL01 \cdot x_{NO3}^4 + DNBAL02 \cdot x_{NO3}^3 + DNBAL03 \cdot x_{NO3}^2 \\ & - DNBAL04 \cdot x_{NO3} + DNBAL05 \end{aligned} \tag{6.16-b}$$

$DNBAL01 = 0.00175$　　$DNBAL02 = 0.04555$

$DNBAL03 = 0.4214$　　$DNBAL04 = 1.799$

$DNBAL05 = 4.892$

（１５）iso-酪酸の分配比

$$D_{IBAC} = K_{1,IBAC} \cdot T_f \tag{6.17-a}$$

$$K_{1,IBAC} = DIBAC01 \tag{6.17-b}$$

$DIBAC01 = 0.001$

（１６）n-酪酸の分配比

$$D_{NBAC} = K_{1,NBAC} \cdot T_f \tag{6.18-a}$$

$$K_{1,NBAC} = DNBAC01 \tag{6.18-b}$$

$DNBAC01 = 0.001$

（１７）ヨウ素の分配比

原子力機構 NUCEF における抽出分離試験結果より導出した。

$$D_I = K_{0,I} \tag{6.19-a}$$

$$K_{0,I} = \exp(-DI01 \cdot x_{NO3} + DI02) \tag{6.19-b}$$

$DI01 = 0.1336$
$DI02 = 0.1208$

（１８）セシウムの分配比

原子力機構 NUCEF における抽出分離試験結果より導出した。

$$D_{CS} = K_{2,CS} \cdot T_f^2 \tag{6.20-a}$$

$$K_{2,CS} = \exp(-DCS01 \cdot x_{NO3} + DCS02) \tag{6.20-b}$$

$DCS01 = 0.514$
$DCS02 = 0.504$

（１９）ルテニウム(III)の分配比

原子力機構 NUCEF における抽出分離試験結果より導出した。

$$D_{RU3} = K_{2,RU3} \cdot T_f^2 \tag{6.21-a}$$

$$K_{2,RU3} = \exp(-DRU301 \cdot x_{NO3}^2 + DRU302 \cdot x_{NO3} + DRU303) \tag{6.21-b}$$

$DRU301 = 0.133$

$DRU302 = 0.414$

$DRU303 = 0.228$

（２０）プルトニウム(VI)の分配比

A.Kumar のデータ [58] から導出した。

$$D_{PU6} = K_{2,PU6} \cdot T_f^2 \tag{6.22-a}$$

$$K_{2,PU6} = \exp(DPU601 \cdot x_{NO3}^2 - DPU602 \cdot x_{NO3} + DPU603) \tag{6.22-b}$$

$DPU601 = 0.918$

$DPU602 = 0.194$

$DPU603 = 0.462$

（２１）バナジウム(IV)の分配比

$$D_{V4} = K_{0,V4} \tag{6.23-a}$$

$$K_{0,V4} = DV401 \tag{6.23-b}$$

$DV401 = 0.0001$

（２２）バナジウム(V)の分配比

$$D_{V5} = K_{0,V5} \tag{6.24-a}$$

$$K_{0,V5} = DV501 \tag{6.24-b}$$

$DV501 = 0.0001$

（２３）リン酸ジブチル（DBP）の分配比

Hardy のモデル [59]を参考にした。

$$D_{DBP}=(\frac{K_d}{\varphi})\cdot\left\{1+2K_2\cdot(\frac{K_d}{\varphi})\cdot x_{DBP}+K_{TBP}\cdot T_f^{\ \alpha}\right\} \tag{6.25-a}$$

$$\varphi = 1+K_a / x_{\mathrm{H}} \tag{6.25-b}$$

$K_2 = 6.03\times10^5$

$K_{\mathrm{d}} = 0.0110$

$K_{\mathrm{a}} = 0.1$

$\alpha = 1.31$

$K_{\mathrm{TBP}} = 2130$

（２４）リン酸モノブチル（MBP）の分配比

Hardy のモデル [59]を参考にした。

$$D_{MBP}=a\cdot y_{DBP}^{\alpha}+b\cdot T_f^{\ \beta} \tag{6.26}$$

$a = 0.120$

$\alpha = 1.25$

$b = 0.377$

$\beta = 1.83$

（２５）リン酸の分配比

$$D_{PO4} = 1.0 \tag{6.27}$$

（２６）核分裂生成物（FP）の分配比

$$D_{FP} = 10^{-3} \tag{6.28}$$

（２７）過酸化水素の分配比

$$D_{H2O2} = 10^{-3} \tag{6.29}$$

7　ＰＡＲＣの動作環境と実行方法

PARC は Microsoft Windows（コマンドプロンプト）, UNIX, Linux 等、C プログラムが動作可能な計算機環境で動作する。以下に実行例を紹介する。

Windows の場合、コンパイルされ生成された実行形式ファイル名を PARC.exe 、また入力ファイルを example1.inp とした場合、PARC を実行するにはコマンドプロンプトにおいて次のコマンドラインを入力すればよい。ここで実行形式ファイル名及び入力ファイル名は、必要に応じフルパスで指定しても良い。またバッチファイルを用いても良い。

```
PARC.exe   example1.inp (enter)
```

計算に要する時間は、CPU 性能等の計算機環境の他、主にタイムステップの設定（細かさ）や選択化学種の個数によって影響を受ける。

計算の実行途中及び終了後にいくつかのファイルが自動的に生成される。図 7.1 に入出力ファイルの概要を示す。PARC によって生成されるファイルは全てテキスト形式である。ファイルサイズは、抽出器の個数（ncomp）、段数（MSH）、化学種数（nspe）、出力回数（nRFile）によって変化する。

実行が正常に終了した場合には、標準出力及びエラー出力に

```
"**** Normal End ****"
```

と出力される。

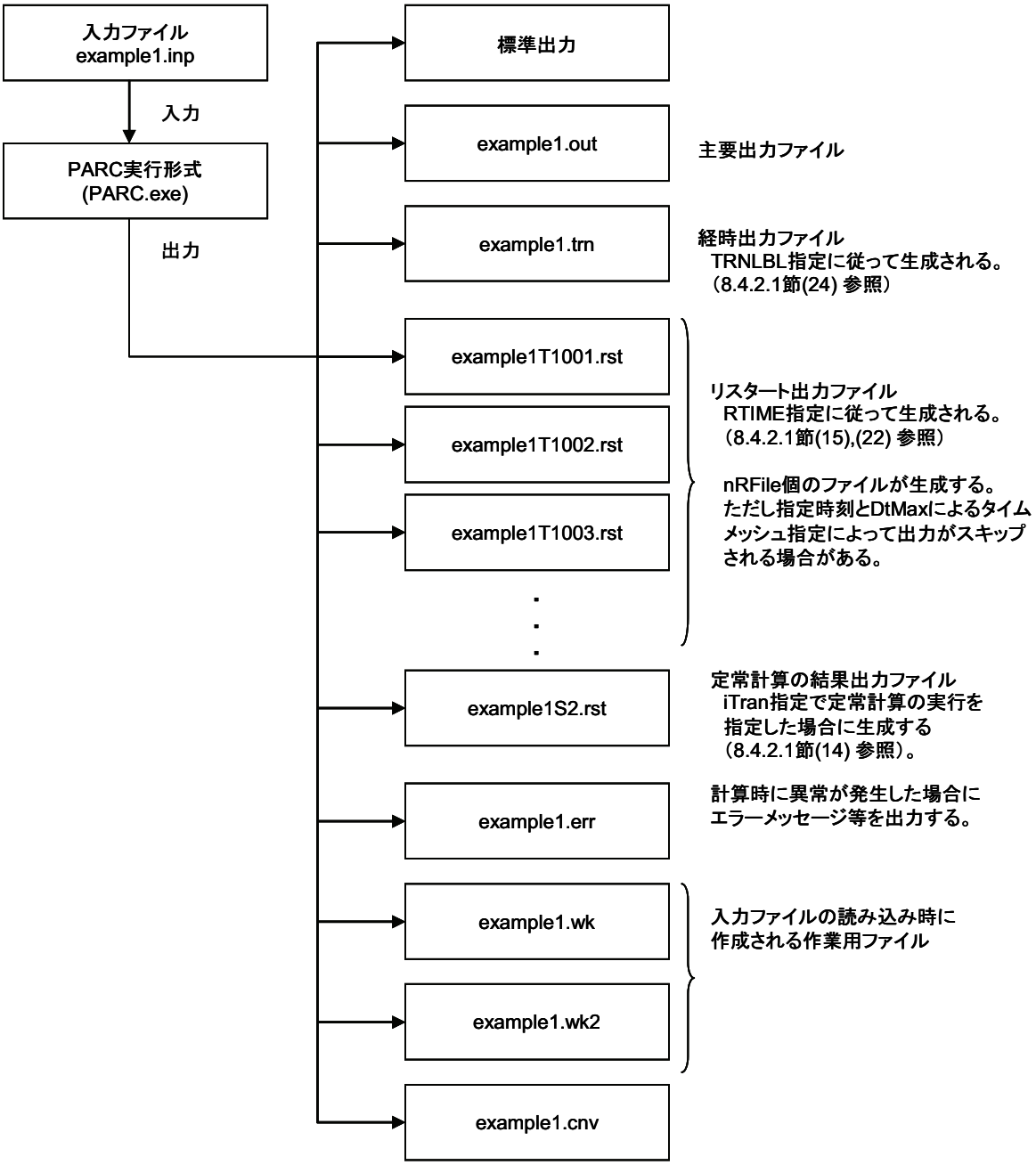


図７．１　PARC に係る入出力ファイル

８　入力ファイルの書式

８．１　入力データの全体構成

８．１．１　基本構造

PARC の入力ファイルは、テキスト形式のファイルである。ファイル作成に当たっては、Microsoft Windows 付属の「メモ帳」等のテキストエディタを用いることができる。

入力データは、全て半角の英数字、記号で記述する（ひらがなや漢字等の全角文字は認識しない。）また特に断らない限り、入力データではアルファベットの大文字と小文字を区別する。

入力ファイルに記述する入力データは、大きく２つの領域に分けられ、キーワードによって入力内容を認識する「キーワードデータ部」とファイル中の位置によって入力内容を認識する「位置データ部」から成る。キーワードデータは、"begin1"及び"end1"で囲まれる部分に入力するものであり、また位置データは、"begin2"及び"end2"で囲まれる部分に入力するものである（8.2 節以降参照）。これら 2 つの領域は、入力ファイル中で次のように配置される。

また、位置データの中に、"begin3"及び"end3"で囲まれる部分が存在する場合がある（8.4.2.1 節(9)-(11)参照）。

```
begin1
    キーワードデータ
end1
begin2
    位置データ
    begin3
    end3
end2.
```

```
begin2
    位置データ
    begin3
    end3
end2
begin1
    キーワードデータ
end1.
```

キーワードデータは、（"begin1", "end1"を含めて）1 つの行に複数のデータを並べて書いてもよい。また、キーワードデータは（"begin1", "end1"を含めて）必ずしも入力する必要はない。"begin2" 及び "end2" は、入力データに含まれる必要があり、各々、1 行を占有する。全データの最後に

は必ず "." （半角ピリオド）を置かなければならない。

図 8.1 に構文グラフを示す。

入力データでは、0 個以上の「空白」のみからなる行も許される。これらは PARC のプリプロセッサによって取り除かれる。

８．１．２　コメントの記述方法

PARC 入力データ内のコメントは、C 言語や C++言語のプログラムにおけるコメントと類似している。"/*" で始まり "*/" で終わる文字列はコメントとみなされる。コメントは読み飛ばされ、PARC の計算には影響を与えない。このコメント部分は、空白 1 文字に置き換えられた上で読み込まれる。このコメントは行中のどこにいくらあってもよい。ただし、ひとつのコメントが複数行にまたがることは許されない。また、このコメントのネスト（コメントの中に "/*" 及び "*/" で囲まれる部分が入れ子状に存在すること）も許されない。

図 8.2 にコメントを認識する決定性有限オートマトン(Determinstic Finite Automaton, DFA) [60] を示す。

許可されるコメントの例

```
begin2
    /* comment ..  input data by JAEA in Dec 2007  */
end2.
```

複数行にまたがるコメント（許可されない例）

```
    /* comment        ....        （改行文字）
       ........................          */
```

コメントのネスト（許可されない例）

```
    /* comment1 ....     /* comment2 */         */
```

また、"/*" 及び "/*" で囲むコメントの他に、"//" によってコメントの先頭を示すことも可能である。この場合、"//"より行末までがコメントと見なされる。

許可されるコメントの例

```
begin2
    // comment ..  input data by JAEA in Dec 2007
end2.
```

８．２　キーワードデータ

5 章に示した反応速度式の中で *RX* xxxx、*RY* xxxx なる名称で示した定数、また 6 章の分配比計算式の中で *D* xxxx なる名称で示した定数名は､PARC の内部でキーワードとして設定されている。

ユーザは、「キーワードデータ」を PARC に入力ファイルに記述することで、PARC に組み込まれている反応速度式や分配比計算式を変更することが可能である。

"begin1"及び"end1"で囲まれた領域に、以下のように定数名（キーワード）及び新たな定数を記述する。

```
begin1
キーワード = 定数; キーワード = 定数;
キーワード = 定数;
...
キーワード = 定数
end1
```

キーワードで指定された定数への数値の代入には "=" を用いる。ここでの"；"（セミコロン）の意味は、"キーワード = 定数" という「文」を複数置く場合に、それらを区切るために置くものであり、文の終了を示すものではない。従って、最後の文と"end1"の間には"；"は置かない（図 8.1）。これは PASCAL 言語の文法と同様である。

定数の表記については 8.3.7 節参照。

例

```
begin1
RX0202 = 22000.0;  RX0204 = 2600.0;
RY0301 = 1.0e-2;
DH01 = 0.13;  DH04 = 20.0
end1
begin2
（位置データ）
end2.
```

８．３　化学反応の入力

PARC では、既に組み込まれた化学反応モデルに加え、ユーザ入力によって新規の化学種、化学反応式、反応速度式、分配比計算式を定義して計算を実行することが可能である。

新規に追加する化学種及び計算式は、以下の書式に従い、入力ファイルの「位置データ部」（"begin2"及び"end2"で囲まれた部分）に記述する（8.4.2.1 節参照）。

PARC は、インタープリタ機能を備えており、ユーザの入力を構文解析し、解釈し、既に組み込まれた計算式と併せて計算を実行することが可能である。

８．３．１　インタープリタの入力データの構造と種類

インタープリタの入力データは次の３つの部分から成る。

① 化学反応式　（存在しない場合もある）
② cond　：条件の記述部
③ case　：計算式の記述部

８．３．２　化学式及び濃度の記述方法

（１）化学式

化学種の識別には化学式を用いる。元素の識別には元素記号を用いる。ここではアルファベットの大文字と小文字を区別する。例えば、プルトニウムは、"PU" ではなく"Pu"と記述する。化学種の価数は、小括弧 "(　)" 並びにローマ数字（″I″、″II″、″III″、″VI″等）で表す。複数の原子を表す下付の数字は、アラビア数字を用いて表す。PARC は、日本語環境に特有な全角文字や特殊文字（″Ⅲ″,″Ⅳ″等）を認識しないので、括弧やローマ数字は半角文字で入力する（表 8.1）。

（２）濃度

化学種の濃度（体積モル濃度 [mol dm^{-3}]）は、大括弧 "[　]"で囲んで表記する。水相濃度と有機相濃度を区別するために化学式の前に"x"又は"y"（小文字）を付す。水相では "[x 化学式]"、有機相では "[y 化学式]" と表記する。

許可される例　　[xH]　[yU(VI)]
許可されない例　[x H]　[xH]　（空白を挿入してはならない）

（３）ユーザによる化学種の追加

新規に化学種を追加する場合には、予約語や既定義の化学種（U, Pu 等）の表記法（表 8.1）と同じにならないように識別子を設定する必要がある。一つの化学種を表す文字列の長さは、半角 16 文字以内に制限されている。

また、新規化学種が x_{NO3} または C_N の算出に寄与するかどうかを指定する必要がある。 x_{NO3} 及び C_N は、5.1 節(2)や(11)にあるようにいずれも溶液中の硝酸根のモル濃度を表しており、反応速度及び分配比の算出に用いられる。現状で、両者は定義が異なっており使い分けがなされている。

（４）計算対象とならない化学種

H_2O , NO_3^- は、インタプリタへの入力は受け付けるが、独立した化学種としての濃度計算は行わない。インタプリタ入力では "H2O", "NO3" と表記する。

硝酸根を表記するには、予約語 C_N 、xNO_3 を用いることができる。この場合、"CN", "xNO3"と表記する（前節参照）。

８．３．３　化学反応式

化学反応式の右辺及び左辺は複数の化学式を '+' で結んで表記する。左辺と右辺の間は" -> "（半角のマイナス及び「大なり」で矢印を表す）で結ぶ。化学式の左には正の整数を書くことができる。化学反応式は複数行にわたることができ、式の最後には ';'（セミコロン）を置く。

化学式、'+'、" -> "、';' の間には複数個のスペースを置くことができる。

例　$U^{4+} + 2\,Pu^{4+} + 2\,H_2O \rightarrow UO_2^{2+} + 2\,Pu^{3+} + 4H^+$ の場合

```
U(IV) + 2Pu(IV) + 2H2O -> U(VI) + 2Pu(III) + 4H;
```

８．３．４　cond 部

（１）構造

cond 部は複数個の条件式を並べたものである。各条件式は複数行にわたることが可能で、' ; '（セミコロン）によってその終わりを示す。最後の条件式は、式の代わりに予約語 ELSE を置くことができる。

例えば、（H^+ 濃度＜0.5 mol dm^{-3}） かつ （U(VI)濃度＞0.1 mol dm^{-3}）の場合は～ といった条件の表記は下記のようになる。

例１　条件式の例

```
( [xH] .LT. 0.5) .AND. ( [xU(VI)] .GT. 0.1 );
```

C1, C2, C3 を各々一つの条件式(論理式)として、例２のように cond 部に並べて表記した場合、

例２

```
C1 ;
C2 ;
C3 ;
```

これを FORTRAN [61] 風に表記すると、次のような IF～THEN 文の並びと解釈される。

```
IF (C1) THEN
   …
ELSE IF (C2) THEN
   …
ELSE IF (C3) THEN
   …
END IF
```

また、例３のように表記した場合、

例３

```
C1；
C2；
ELSE ;
```

次の IF～THEN 文の並びと解釈される。

```
IF (C1) THEN
   …
ELSE IF (C2) THEN
   …
ELSE
   …
```

END IF

Case 部に入力される計算式の適用範囲に制限が無い、すなわち条件式が存在しない場合は、次のように ELSE のみを 1 個置く。

例

```
ELSE;                                          →  cond 部はこの行のみ
d[xNp(V)]/dt=-4.5*[xNp(V)]*[xU(IV)]*A1;        →  case 部
```

（2）文法

条件式では、実数型の他に、整定数を用いることができる。整定数は、定数値の表現に用いられるほか、整数 0 は（FORTRAN でいう）論理定数 ".FALSE." の代わりに用い、また 0 でない整数は論理定数 ".TRUE." の代わりに用いることができる。PARC では ".FALSE." 及び ".TRUE." は直接使うことができない。

cond 部の文法はほぼ FORTRAN と同じであり、以下のような各種演算子が使える。演算子の優先順位及び結合性は FORTRAN と同じである。

① 算術演算子

+	正数を表す単項演算子
-	負数を表す単項演算子
+	加算
-	減算
*	乗算
/	除算
**	べき乗（組込関数としても取り上げた）

② 関係演算子

.LT.	小さい	（＜、less than）
.GT.	大きい	（＞、greater than）
.LE.	小さいか等しい	（≦、less than or equal to）
.GE.	大きいか等しい	（≧、greater than or equal to）
.EQ.	等しい	（＝、equal to）
.NE.	等しくない	（≠、not equal to）

③ 論理演算子

.NOT.	否定

.AND.　　論理積
.OR.　　論理和

次の式は本コードでは文法違反になり、プログラム実行が停止されるので注意が必要である。

```
4.GT.2
```

この入力は、

"4."　"GT"　".2"

のように分解して解釈される。"GT"は解釈できないため、エラーとなる。整数と整数の比較では、下記のように ".GT. " の前後に区切りを表す空白（下線部）を入れなければならない。この場合、"4"　".GT."　"2"と解釈される。

```
4 .GT. 2
```

cond 部では、濃度等の変数は全て倍精度実数型と解釈する。

８．３．５　case 部

（１）構造

case 部での反応速度や分配比の計算式の定義は、実行したい順序に並べたいくつかの代入文の並びで表記される。最後の文は目的とする計算式の記述になっていなければならない。ここで代入文の両辺に同じ変数が現れたり、同じ中間変数が 2 度以上定義されてはならない。各代入文は複数の行にわたって記述可能で、一つの文の終わりを ';'（セミコロン）によって示す。最初の代入文から目的の計算式の記述までを case ブロックと呼ぶことにする。

上記 case 部においてユーザが入力可能な計算式は、次の 4 つのタイプに分類される。分配比に関する計算式として d1 型、d2 型を、化学反応速度に関する計算式として rx 型、ry 型を想定している。

d1：硝酸根だけの関数である見かけの平衡定数（Richardson 型の式）
d2：水相と有機相両相の濃度の関数である分配比計算式
rx ：水相の濃度の関数である水相の化学反応速度式
ry ：有機相の濃度の関数である有機相の化学反応速度式

例　一つの case ブロックの例（rx タイプ）

```
A1=1.6/[xH]**2.0 + 1.42*[xH];
d[xNp(V)]/dt=-4.5*[xNp(V)]*[xU(IV)]*A1;
```

cond 部の条件式（C1, C2, C3 , ...）の個数と case ブロック（ブロック 1, 2, 3, ...）の個数は一致していなければならない。

例

C1 ;	cond 部
C2 ;	
C3 ;	
（case ブロック 1）	case 部
（case ブロック 2）	
（case ブロック 3）	

上記の例の場合、次のように解釈される。

IF (C1) THEN
（case ブロック 1）
ELSE IF (C2) THEN
（case ブロック 2）
ELSE IF (C3) THEN
（case ブロック 3）
END IF

（２）文法

case 部では

左辺 ＝ 右辺 ;

なる等式の形で分配比や反応速度の計算式を記述する。計算式の左辺の表記はその種類（４種類）に応じて以下①～④のように決まっている。case 部では中間変数の使用が許されるため、複数の計算式が一般に存在する。以下の形式の左辺を持つ等式は、case 部の最後部分に入力する。

① d1 型

Richardson 型の分配比計算式であり、みかけの平衡定数を

*K*0[化学式]、*K*1[化学式]、*K* 2[化学式]、*K* 3[化学式]

と表記する。*K* 0、*K* 1、*K* 2、*K* 3 は各々フリーTBP 濃度（T_f）の 0 乗、1 乗、2 乗、3 乗に比例する式であり、0 乗、1 乗、2 乗、3 乗の式を別々に入力すれば PARC 内部でそれらの和をとって分配比計算式として用いる。ただし、フリーTBP の濃度の計算には Richardson 型の式のうちフリーTBP の 0 乗、1 乗、2 乗に比例する式のみが用いられ、3 乗に比例する式は無視される。

例 K0[Np(IV)] = … ; K1[Np(IV)] = … ; K2[Np(IV)] = … ;

この例では、Np(IV)の分配比計算式は、以下のように解釈される。

$$D[\mathrm{Np(IV)}] = K0[\mathrm{Np(IV)}] + K1[\mathrm{Np(IV)}] \cdot T_f + K2[\mathrm{Np(IV)}] \cdot T_f^2$$

② d2 型

一般的な形式の分配比であり、左辺は

D[化学式]

のように表記する。これは見かけの平衡定数ではなく分配比自体を表す。

例 D[Tc] = … ;

③ rx 型

水相の化学反応速度式であり、左辺は

d[x 化学式]/dt

のように記述する。*d* 及び *dt* は英字小文字で入力する。空白は入れない。

許可される例 d[xNp(IV)]/dt = … ;

許可されない例 d[x Np(IV)]/dt d[xNp(IV)] /dt （空白の挿入（下線部））

④ ry 型

有機相の化学反応速度式であり、左辺は

d[y 化学式]/dt

のように記述する。*d* 及び *dt* は英字小文字で入力する。空白は入れない。

許可される例　　d[yPu(IV)]/dt = … ;

case 部では、計算式の記述を整理するために中間変数を用いることができる。中間変数名は英字で始まる英数字（16 文字以内）で表記する。大文字と小文字は区別される。
以下の例では A1 が中間変数である。

例

```
A1=1.6/[xH]**2.0 + 1.42*[xH];
d[xNp(V)]/dt=-4.5*[xNp(V)]*[xU(IV)]*A1;
```

case 部の文法はほぼ FORTRAN と同じであり、以下のような算術演算子が可能である。演算子の優先順位及び結合性は FORTRAN と同じである。

算術演算子

+	（正数を表す単項演算子）
−	（負数を表す単項演算子）
+	（和）
−	（差）
*	（積）
/	（商）
**	（べき乗、組込関数としても取り上げた）

case 部では、濃度等の変数は全て倍精度実数型と解釈する。

８．３．６　予約語及び組込関数

（１）予約語

計算式の種類に応じて予め意味が与えられた以下のような予約語を用いることができる。大文字と小文字は区別される。これらの予約語は cond 部と case 部で共通に使用可能である。

d1 型　:　Frc, tau, ln10, xNO3

d2 型　:　Frc, tau, ln10, xNO3, Tf
rx 型　:　T, ln10, xNO3, CN
ry 型　:　T, ln10

各予約語の意味は以下のとおり。
Frc　:　TBP の体積分率 [-]
tau　:　溶液温度の逆数と常温（25℃）との差（1 / T - 1 / 298）
ln10　:　$\log_e 10$
xNO3　:　硝酸根濃度（大括弧 "[　]" で囲まないこと）
Tf　:　フリーTBP 濃度 [mol dm^{-3}]
T　:　溶液温度 [K]
CN　:　硝酸根濃度（xNO3 とは別定義）

（２）組込関数

予め意味が与えられた以下のような組込関数を用いることができる。全て英字小文字で表記する。これらの組込関数は cond 部と case 部で共通に使用可能である。引数は小括弧"(　)"で囲む。整数型及び実数型については次節参照。

abs　:　絶対値　（引数は整数型または実数型）
exp　:　指数関数　（引数は実数型（整数型は不可））
log　:　自然対数　（引数は実数型（　〃　））
log10　:　常用対数　（引数は実数型（　〃　））
**　:　べき乗　（引数は実数型（　〃　））
sqrt　:　平方根　（引数は実数型（　〃　））
cosh　:　双曲線関数（引数は実数型（　〃　））
sin2h　:　双曲線関数（引数は実数型（　〃　））
tanh　:　双曲線関数（引数は実数型（　〃　））

例　exp([xH])

８．３．７　定数

計算式中に 0.5 、-1.4e-3 等の定数を用いることが可能である。定数は、整数型(integer)／実数型(real)の識別がなされる。図 8.3 に識別のための決定性有限オートマトンを示す。ここでいう整数型とは、文字 '0' ～ '9' の並びであり、正負を示す符号が文字列の先頭につくことがあり、小数点及び指数を示す "E"、"e" を持たない。以下に実数型及び整数型の定数の表記例を示す。

許可される整数型の例　5　-100
許可される実数型の例　.234　1.234　1.234E-5　　1.234E+5　1.E-2
　　1.234e-56　1.234e+56　-1.234　-.234

また、定数は小括弧 "(　　)"で囲むことができる。

例　(12.345)

前節で示した組込関数は、その引数に整数型を許さないものが多いため注意が必要である。

許可される例　　[xU(VI)]**3.0
許可されない例　[xU(VI)]**3　　(整数乗は許可しない。)

８．４　位置データ

８．４．１　位置データの書式

位置データ部では、模擬しようとするプラントの設計・運転の情報（抽出器の寸法、接続、パルス条件、フィード流量、濃度等）を入力する。

位置データに関する書式は、単純であり、各フィールド（一つ一つの入力値）は１個以上の空白（半角）で区切られる。

本入力マニュアル中で１行に表記するデータとして示された複数個のフィールドは、全てのフィールドが満たされるまで入力ファイルの複数行にわたって探索される。従って、入力ファイル中では、１行が長くなりすぎる場合には、適当に改行を入れ複数行とすることが可能である。

例１では、t = 0 でのフィード液の濃度を 14 化学種について設定したものである。15 個全ての入力値を同じ行に並べると行が長くなることから、途中で改行を入れて複数行に分割している（"//"は注釈行を示すもの）。

例１

```
// Concentration table
// time H      U6      Pu4   Pu3   U4   HAN   HYD  HNO2
// min  M      g/L     g/L   g/L   g/L  M     M    M
   0.0  3.0    250.0   2.75  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5
// Zr     Tc      Np4   Np5       Np6       HN3
// g/L    g/L     g/L   g/L       g/L       M
   1.242  0.3399  0.0   0.006095  0.054855  0.0
```

また、入力マニュアルで改行されることとされている部分では、所定個数のデータを読み込んだ後にデータが残っていたとしても、残りのデータは読み込まれない。例２では、8 化学種計算の入力において 9 化学種分設定しているが、読み込みは 1.0e-5 までで終了し、その後の 10.0 は読み込まれない（エラー出力は出ない）。

例２

```
// Concentration table
// time H      U6      Pu4   Pu3   U4   HAN   HYD  HNO2        9th
// min  M      g/L     g/L   g/L   g/L  M     M    M
   0.0  3.0    250.0   2.75  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5      10.0
```

また、n 個の同じ数値の入力では、n を正整数として、"n*"を数値の前に置く表現が可能である。例えば、0.0 を 8 個並べる場合では、次の例 3 及び例 4 がどちらも可能である。

例３

```
0.0   0.0   0.0   0.0   0.0      0.0   0.0   0.0
```

例４

```
8*0.0
```

FORTRAN の free format と異なる点は、入力データのタイトル（8.4.2.1 節 (1)）を除いて、文字列も空白で区切られるものとされる。シングルクォーテーション(‘)等で囲む必要はない。

指数部つきの浮動小数点数を入力ファイルで入力する場合は、指数部を示す文字として E または e を用いる（FORTRAN のように D は使用しない）。

８．４．２　入力データ

８．４．２．１　総合データ

（１）Title

Title：計算のタイトル（LINLEN 以内の文字列）

自由に記述できる。LINLEN=1000。全体が一行に納まっていなければならない。

（２）nMemSiz,　nMemQuadSiz,　nMemVarSiz,　nMemSymSiz

プログラムの動作に必要なメモリを確保する設定を行う。

nMemSiz　：インタプリタ以外の部分のためにプログラム実行時に確保するメモリのサイズ（正整数）　[bytes]

nMemQuadSiz　：中間言語（四つ組）の領域のためにプログラム実行時に確保するメモリのサイズ（正整数）[bytes]

nMemVarSiz　：中間言語で使う変数のためにプログラム実行時に確保するメモリのサイズ（正整数）　[bytes]

nMemSymSiz　：記号表のためにプログラム実行時に確保するメモリのサイズ（正整数）[bytes]

（３）fSpe

fSpe：計算対象の化学種の選択（長さ 29 の文字列）

NFIX（組込み化学種の数、NFIX=29）個の化学種のうち、どの化学種を計算対象とするかを '1' 又は '0' から成る 29 文字の文字列で指定する。対象化学種を表す位置に '1' を指定し、対象としない化学種は '0' を指定する。NFIX 個全てについて指定しなければならない。fSpe 中に現れる'1'の個数を nNFIX とする。各化学種と fSpe 中の位置の関係は、以下のとおり。

左端からの位置	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
選択化学種	H	U(VI)	Pu(IV)	Pu(III)	U(IV)	HAN	HYD	HNO_2	Zr	Tc
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	Np(IV)	Np(V)	Np(VI)	HN_3	iBAL	nBAL	iBAC	nBAC	I	Cs
	21	22	23	24	25	26	27	28	29	
	Ru	Pu(VI)	V(IV)	V(V)	DBP	MBP	H_3PO_4	FP	H_2O_2	

例１　H, U(VI), Pu(IV), Pu(III), U(IV), HAN, HYD, HNO_2, HN_3 を計算対象とする場合(nNFIX = 9)

```
/* fSpe */          111111110000010000000000000000
```

例２　例 1 の化学種に加えて DBP, MBP, H_3PO_4 を計算対象とする場合 (nNFIX = 12)

```
/* fSpe */          111111110000010000000000011100
```

PARC では、ここでの化学種選択に応じて、5 章～6 章に示した化学反応速度や分配比の計算式（以下、「組込み式」等という。）の中から必要なものを自動的に選択する。例えば、Np に係る計算を必要としない場合は、fSpe で指定することにより Np に関係する反応式を省略することができ、計算時間の短縮を図ることができる。ユーザが目的とする化学反応速度式が適切に選択されるよう fSpe を設定する必要がある。例えば、亜硝酸のヒドラジンによる分解反応（５章参照）を考慮しようとする場合は、少なくともヒドラジン、亜硝酸、水素イオン、アジ化水素が fSpe で選択されていなければならない。

（４）nDel

nDel：削除する組込み式の個数（正整数）

組込み式は、ユーザ入力によって削除が可能である。削除するものの個数を入力する。

（５）iFrmTyp,　iFrmNum's

上記 nDel が 1 以上のときのみ、以下を繰り返し、nDel 行のテーブルとする。

iFrmTyp：削除する組込み式の型（d1, d2, rx, ry）。

d1 型の分配比計算式を削除するとき	0
d2 型の分配比計算式を削除するとき	1
rx 型の式（水相での反応速度式）を削除するとき	2
ry 型の式（有機相での反応速度式）を削除するとき	3

iFrmNum：削除する実験式の番号。

iFrmTyp = 0 or 1 のとき　　化学種 ID（4 章参照）を指定（1～29 のいずれかの正整数）
　　= 2　のとき　　反応速度式 ID（5 章参照）（1～26 のいずれかの正整数）
　　= 3　のとき　　分配比計算式 ID（6 章参照）（1～5 のいずれかの正整数）

例　水相での化学反応速度の計算式 3 及び 6 の削除

```
/* nDel */    2
/* iFrmTyp */ 2  /* iFrmNum */ 3
/* iFrmTyp */ 2  /* iFrmNum */ 6
```

（６）nwspe,　ncomp,　ns

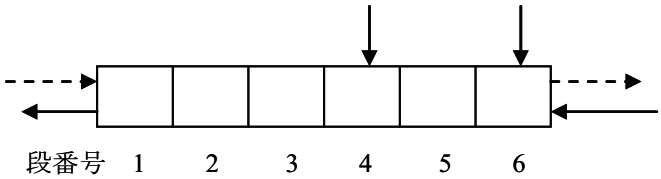
nwspe　：ユーザ入力により新しく追加定義する化学種数（正整数）

ncomp　：コンポーネントの個数（正整数）

（コンポーネントとはパルスカラム、ミキサセトラ、タンク。ここでは、それらの合計個数を指定する。例えば、パルスカラム５基、ミキサセトラ２基、タンク４基を連結したプラントでは、ncomp = 5+2+4 = 11 となる。）

ns　　：1 つのメッシュ（例えばミキサセトラでは 1 段に相当。）への各相あたり流入数の最大値

ここでいう流入数とはフィード数＋他コンポーネントからの流入数である。下図の例では、6 段目の流入数は水相 2 及び有機相 0 で合計 2 であるため、ns≧2 であるような正整数 ns の設定が必要である。）



※ (3)で選択した化学種とユーザ入力により追加定義する化学種の合計数 nspe を次式で定義する。

nspe = nNFIX + nwspe

以下は、新規化学種と関連する反応式を(6)～(11)において設定した例である（"/*" "*/"で囲まれた部分はコメント）。

例

```
/* nwspe    */  2  /* ncomp */ 12  /* ns */  3
/* ChemFrm  */ /* AbbrevNam */ /* Weight */ /* fNO3 */ /* fCN */ /* Valence */
NEWCHEM1(III)     NEW1            239          0           0          3
NEWCHEM2(IV)      NEW2            241          0           0          4
/* nwFrm    */    1
begin3
/* nCond */  1  /* iFrmTyp */ 2
/* Description of chmical reactions */
Pu(IV)+NEWCHEM1(III)->Pu(III)+NEWCHEM2(IV);
ELSE;
k =90.0*exp(58.5*1000.0/8.31*(1.0/(273.15+24.0)-1.0/T));
d[xPu(IV)]/dt= -k*[xPu(IV)] *[xH]*CN*[xNEWCHEM1(III)]**2.0;
end3
```

（７）ChemFrm,　AbbrevNam,　Weight,　fXNO3,　fCN,　Valence

nwspe が 1 以上のときのみ、以下を繰り返し、nwspe 行のテーブルとする。

ChemFrm　：追加定義する化学種の化学式（16 文字以内の文字列）

AbbrevNam：ChemFrm の省略名称（出力時に表示される）（4 文字以内の文字列）

Weight　　：追加定義する化学種の単位変換係数

濃度単位の変換に用いる。g dm^{-3} から mol dm^{-3} への単位変換では Weight で除し、mol dm^{-3} から g dm^{-3} へ変換するときには Weight を乗ずる。入出力ファイルでの単位を g dm^{-3} ではなく mol dm^{-3} とする場合は 1.0 とする。

fXNO3　　：追加定義する化学種が硝酸根濃度 x_{NO3} の算出に寄与するとするか否かの設定

寄与しないとする場合　　0

寄与するとする場合　　1

fCN　　：追加定義する化学種が硝酸根濃度 C_N の算出に寄与するとするか否かの設定

寄与しないとする場合　　0

寄与するとする場合　　1

Valence　：追加定義する化学種の電荷数（正整数）

fXNO3 = 1 又は fCN = 1 とした場合、x_{NO3} 又は C_N に寄与する硝酸根濃度の算出に用いる。

fXNO3, fCN 及び Valence は、ユーザが追加定義した化学種が、例えば陽イオン M^{n+}であるときに、分配比計算式に現れる硝酸根濃度 x_{NO3}、C_N に対して濃度が n×[M^{n+}]の硝酸根を加える必要があるかどうかを設定するものである。x_{NO3} と C_N は、定義が異なっている。

ただし、fXNO3 = 1 の場合、硝酸根濃度の算出への寄与は、組込み分配比計算式（タイプ d1 , d2）に現れる x_{NO3} に対して考慮される一方で、組込み反応速度式（タイプ rx , ry）に現れる x_{NO3} に対して考慮されない。これは fCN = 1 の場合でも同様である。（組込み式に係るプログラムの構造上の理由による。）

組込み反応速度式の x_{NO3} , C_N に対して、追加定義した化学種の濃度 $[M^{n+}]$の影響が及ぶようにするためには、前記 8.4.2.1 節(5)においてその組込み反応速度式を削除する設定をした上で、改めて目的とする反応速度式を 8.4.2.1 節(10)においてインタプリタ入力する必要がある。

（８）nwFrm

nwFrm　：追加定義する反応速度式と分配比計算式の合計個数（正整数）

（９）begin3

"begin3"　：文字列（予約語）

nwFrm が 1 以上の場合に、"begin3" なる文字列を入力ファイルに入れる。これは、入力行 1 行を占有する。

（１０）追加定義する計算式の入力

nwFrm が 1 以上のとき、以下を繰り返し、nwFrm 個分の式を記述する。

（１０．１）nCond,　iFrmTyp

nCond　：追加定義する計算式に現れる条件式の個数。

iFrmTyp　：実験式の種類（d1,d2,rx,ry）。

d1 型の場合	0
d2 型の場合	1
rx 型の場合	2
ry 型の場合	3

（１０．２）化学反応式（rx 型または ry 型のとき）

入力書式は 8.3.3 節を参照のこと。

（１０．３）cond 部

条件式（C1, C2, C3, ...）を必要個数（nCond 個）入力する。入力書式は 8.3.4 節を参照のこと。

（１０．４）case 部

計算式（case ブロック 1, 2, 3, ...）を必要個数（nCond 個）入力する。入力書式は 8.3.5 節を参照のこと。

（１１）end3

"end3" ：文字列（予約語）

nwFrm が 1 以上の場合に、"end3"という文字列を入力する。これは、入力行 1 行を占有する。

（１２）ItMax,　eps,　DtMin,　nDtMax,　DtFac

ItMax　　：ニュートン法の最大繰り返し回数（正整数）

eps　　：収束判定に用いる相対誤差

DtMin　　：タイムステップ幅の最小値　　[min]

nDtMax　：最大タイムステップ幅のテーブル（下記(13)）の長さ（正整数）

DtFac　　：計算の成否に応じてタイムステップ幅を変動させるための係数

タイムステップ幅に乗じる、あるいは除することでステップ幅を変化させる。

（１３）TIME,　DtMax

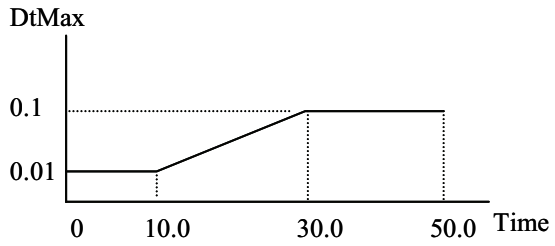
以下を繰り返し、nDtMax 行のテーブルとする。このテーブルは線型内挿して使われる。

TIME　　：時刻 [min]

DtMax　　：時刻 TIME において許される最大タイムステップ幅 [min]

例　入力（nDtMax = 4 の場合）と線形内挿による解釈

```
/* TIME */    /* DtMax */
     0            0.01
    10            0.01
    30            0.1
    50            0.1
```



（１４）iTran

iTran　：過渡計算及び定常計算の繰返し回数（正整数）

過渡計算のみのとき	1
過渡計算の後、定常計算するとき	2
過渡 → 定常 → 過渡　のとき	3
過渡 → 定常 → 過渡 → 定常　のとき	4

（１５）fPrintX,　fPrintR,　fPrintT

以下の 3 種類の出力ファイルについて、iTran で指定された過渡計算、定常計算の一連の流れの中で、どこで出力させるかを指定する。

① 主要出力（X）　：変数名、単位等の説明とともに、多種類の量（濃度、マスバランス等）を一つのファイル（ファイル名：*.out ）に出力する。

② リスタート出力（R）　：ユーザが指定する時刻での濃度等の量を出力する。各時刻ごとに nRFile 個の出力ファイル（ファイル名：*.rst）が生成される（ファイル名は自動生成される）。リスタート計算で使用できる。

③ 経時出力（T）　：ユーザが指定する特定のコンポーネント、メッシュ、化学種の濃度の経時変化を出力する（8.4.2.1 節(23)～(24)参照）。

fPrintX　：主要出力の出力場所を表すフラグ（文字列）
fPrintR　：リスタート出力の出力場所を表すフラグ（文字列）
fPrintT　：経時出力の出力場所を表すフラグ（文字列）

fPrintX , fPrintR , fPrintT は、各々、数字 '0' 及び '1' から成る文字列で、iTran 以上の長さを持たなければならない（余分の文字は無視される）。0 は該当する計算について計算結果を出力しないことを、1 は結果を出力することを示す。

例　iTran = 3 の場合とその解釈

```
/* fPrintX */     /* fPrintR */        /* fPrintT */
   010              110                  101
```

	過渡計算	→	定常計算	→	過渡計算
主要出力	：出力しない		出力する		出力しない
リスタート出力	：出力する		出力する		出力しない
経時出力	：出力する		出力しない		出力する

（１６）Time1,　Dt1,　EndTim1

Time1　：1 回目の過渡計算の開始時刻　[min]
Dt1　：1 回目の過渡計算の初期タイムステップ幅　[min]
EndTim1　：1 回目の過渡計算の終了時刻　[min]

（１７）Time2,　Dt2,　EndTim2

iTran が 3 以上のときのみ入力する。

Time2　　: 2 回目の過渡計算の開始時刻　　[min]

Dt2　　: 2 回目の過渡計算の初期タイムステップ幅　　[min]

EndTim2 : 2 回目の過渡計算の終了時刻　　[min]

（１８）iSoltFr

iSoltFr　: 溶液中の化学種濃度の表現について、体積モル濃度（単位体積溶液中の溶質の物質量）[mol dm^{-3}]から solute-free 濃度（単位体積溶媒中の溶質の物質量、中性基準濃度ともいう。）[mol dm^{-3}]への変換を行うかどうかの設定（正整数）

変換を行わないとき　　0

変換を行うとき　　1

Richardson による分配比モデル（U(VI), Pu(IV)等）は、本来計算式が solute-free 濃度で表現されていることから、体積モル濃度から solute-free 濃度表現に変換した上で分配計算を実行するのが望ましいとされている。現状では、Richardson モデルに加えて、多くの化学種の分配比式を追加しているが、これらの追加式は Richardson のような solute-free 濃度の表現になっておらず、従って solute-free と体積モル濃度が共存した状態になっている。

（１９）iRstFlg

iRstFlg　: 実行しようとする計算が、リスタート計算かどうかの指定（正整数）

リスタート計算ではないとき　　0

リスタート計算であるとき　　1

（２０）CRFILE

CRFILE　: リスタート計算の実行に必要なコンポーネント内の濃度値等を含むファイル名

上記(19)において iRstFlg = 1（リスタート計算を実行する）のときのみ入力する。

文字数は FILLEN 以内とする（FILLEN = 128）。

例

```
/* iRstFlg */        /* CRFILE */
      1              test01T1050.rst
```

上記の例の場合、以前に計算して得た test01T1050.rst なるファイルにある濃度データを読み込み、それを初期濃度として過渡計算を実行する（2 章参照）。

CRFILE として*.rst ファイルを指定することが多いと思われるが、*.rst の中身を見れば分かるとおり、コンポーネント数、メッシュ数、化学種の種類は以前の計算と同一でなければ読み

込むことができない。

（２１）nRFile

nRFile ：時系列出力の回数（正整数または負整数）

出力（X, R, T）への出力時刻の個数を入力する（nRFile は 0 以上の正整数）。ここで nRFile が負整数とした場合は、出力時刻は、最初の時刻、最終の時刻及び出力時刻間隔の 3 つの量を入力することによって指定されるものとみなされる（下記(22)参照）。

（２２）RTIME

nRFile が 0 以外のときのみ以下を入力する。

（２２．１）nRFile が正整数の場合

出力時刻[min]を nRFile 個並べる。

（２２．２）nRFile が負整数の場合

最初の時刻[min]、最終の時刻[min]、出力時刻間隔[min]の 3 つの量をこの順に入力する。

例

```
/* nRFile */      5
/* time   */      0    30    60    90    120
```

（２３）nTrnLbl

nTrnLbl ：経時出力ファイル（*.trn ファイル）に出力させるデータの種類数（正整数、下記(24)参照）

（２４）TRNLBL

nTrnLbl が 1 以上のとき、以下の書式の文字列 ZTiijjjkk を nTrnLbl 個並べる。この文字列は、経時出力ファイルに出力させたいデータ（プロセス内での位置と化学種を指定する）を表しており 9 文字（Z（1 文字）, T（1 文字）, ii（2 文字）, jjj（3 文字）, kk（2 文字）を連接したもの）からなる。

ZTiijjjkk

Z	：水相の場合	″X″
	有機相の場合	″Y″
T	：パルスカラムの場合	″P″
	ミキサセトラのミキサの場合	″M″
	ミキサセトラのセトラの場合	″S″

水相タンクの場合　　"A"
有機相タンクの場合　　"O"
ii ：コンポーネント ID　　（2 桁の正整数）　（例："03","05","12",...）
jjj：メッシュ番号　　（3 桁の正整数）　（例："001","012","135",...）
kk：化学種の通し番号　　（2 桁の正整数）　（例："05","13",...）

ここで言う化学種の通し番号とは、8.4.2.1 節(3) において '1' によって指定した nNFIX 個の化学種を化学種 ID の順序で並べて番号を付したものである。化学種 ID ではないことに注意。8.4.2.1 節(3)の例 2 のように fSpe を設定した場合、各化学種と通し番号の対応は以下のようになる。また 8.4.2.1 節(6)～(7)において新たな化学種を追加した場合は、fSpe で指定した化学種の後に続けて通し番号（nNFIX+1, nNFIX+2, ...）が付される。

通し番号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
化学種	H	U(VI)	Pu(IV)	Pu(III)	U(IV)	HAN	HYD	HNO_2	HN_3	DBP	MBP	H_3PO_4

例　（パルスカラム（ID = 30）の第 5 メッシュの化学種（通し番号 01～04）の有機相濃度の経時変化出力を出力する場合）

```
/* nTrnLbl */  4
/* TRNLBLs */  YP3000501 YP3000502 YP3000503 YP3000504
```

（２５）Delta

Delta　：演算の安定化のために導入したパラメータ（3.1.1 節参照）
化学種の濃度が、0 からのこの幅の区間で強制的に立ち上げられる。

（２６）ck,　dr,　en

ミキサセトラ（ミキサ部）での二相間の界面積計算に用いるパラメータ（3.2.4 節参照）。

ck　：式全体に掛かるファクタ（無次元）
3.2.4 節における K に相当するもの。式(3.61)～(3.63)をそのまま用いるのであれば 100 とする。
dr　：攪拌翼の直径　　[cm]
en　：攪拌翼の回転速度　　[min^{-1}]

（２７）Frc,　PhiS

Frc　：有機相中の TBP の体積分率　　[-]
例えば 30 vol%であれば、0.3 とする。
PhiS：ミキサセトラのセトラ部における水相のホールドアップ　　[-]

（２８）NPREAC,　INPEQ,　NPDIST

ネプツニウムの化学反応、分配に関する設定を行う。

NPREAC：Np(V)のウラナスによる還元反応式(5.26)について反応速度式を選択する。

REACT モデル（式(5.27)）の場合	0
Advanced-MIXSET モデル（式(5.28)）の場合	1

INPEQ　：Np の不均化反応（式(5.39), (5.41)）の考慮について選択

考慮する場合	1
考慮しない場合	1 以外の値

NPDIST　：Np(IV)及び Np(VI)の分配比の計算式の選択

フリーTBP の 3 乗に比例する式（式(6.9),(6.12)）の場合	0
フリーTBP の 2 乗に比例する式（式(6.10),(6.13)）の場合	1

８．４．２．２　フィードデータ

８．４．２．２．１　フィード総括データ

（１）nfa,　nfo

nfa　：水相フィードの個数（正整数）（8.4.2.2.2 節において nfa 個分の設定を行う）

nfo　：有機相フィードの個数（正整数）（8.4.2.2.3 節において nfo 個分の設定を行う）

（２）Tfd

Tfd　：フィード液温度 [℃]

８．４．２．２．２　水相フィードテーブル

以下の（１）～（５）を nfa 回繰り返す。

（１）nXfTab

nXfTab　：以下に示す水相濃度フィードテーブルの長さ（正整数）

（２）TIME,　X1,　X2, ...

以下を繰り返し、nXfTab 行のテーブルとする。

TIME　　：時刻　[min]

X1, X2, ...　：各化学種の水相フィード中濃度（nspe 個の並び）　[g dm^{-3}]または[mol dm^{-3}]

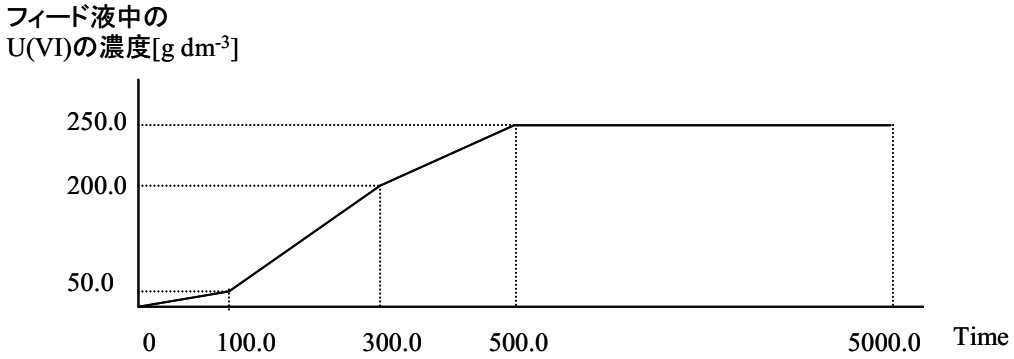
ここで入力する化学種のうち最初の nNFIX 個は主要成分（8.4.2.1 節(3)）であり、残りの nspe-nNFIX 個（nwspe 個）はユーザが追加した成分である。主要成分は化学種 ID の順番で並べる。濃度単位は、以下の通り。

① 水素イオン、HAN、ヒドラジン、亜硝酸、アジ化水素、
iso-, n-ブチルアルデヒド、iso-, n-酪酸、DBP、MBP、リン酸、
FP、過酸化水素 : [mol dm^{-3}]

② ウラン、プルトニウム、ジルコニウム、テクネチウム、
ネプツニウム、ヨウ素、セシウム、ルテニウム、バナジウム : [g dm^{-3}]

例 入力（nXfTab =5, nspe = 9 の場合）と線形内挿による解釈

```
// --- AQUEOUS FEED --- (A1)
/* nXfTab */  5
// time H      U6      Pu4   Pu3   U4   HAN   HYD  HNO2     HN3
   0.0  3.0      0.0   0.0   0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5   0.0  ← 第 1 行
 100.0  3.0     50.0   0.55  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5   0.0  ← 第 2 行
 300.0  3.0    200.0   2.20  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5   0.0
 500.0  3.0    250.0   2.75  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5   0.0
5000.0  3.0    250.0   2.75  0.0   0.0  0.0   0.0  1.0e-5   0.0  ← 第 nXfTab 行
```



（３）nFfTab

nFfTab ：以下に示す水相流量フィードテーブルの長さ（正整数）

（４）TIME, FF

以下を繰り返し、nFfTab 行のテーブルとする。線形内挿の考え方は、濃度テーブルと同様。

TIME ：時刻 [min]

FF ：フィード流量 [dm^3 h^{-1}]

（５）IFDSTA.cmp, IFDSTA.msh

IFDSTA.cmp ：フィード先のコンポーネント ID

IFDSTA.msh ：フィード先のメッシュ番号

メッシュの上流端に注入されるとしてメッシュ内の流量を計算する。

８．４．２．２．３　有機相フィードテーブル

以下の（１）～（５）を nfo 回繰り返す。

（１）nXfTab
nXfTab　：以下に示す有機相濃度フィードテーブルの長さ（正整数）

（２）TIME,　X1,　X2, ...
　以下を繰り返し、nXfTab 行のテーブルとする。書式は水相と同様である。線形内挿の考え方は、濃度テーブルと同様。
TIME　　：時刻　[min]
X1, X2, ..　：各化学種の有機相フィード中濃度（nspe 個の並び）　[g dm^{-3}] または [mol dm^{-3}]

（３）nFfTab
nFfTab　：以下に示す有機相流量フィードテーブルの長さ（正整数）

（４）TIME,　FF
　以下を繰り返し nFfTab 行のテーブルとする。線形内挿の考え方は、濃度テーブルと同様。
TIME　：時刻　　[min]
FF　　：フィード流量　　[dm^3 h^{-1}]

（５）IFDSTO.cmp,　IFDSTO.msh
IFDSTO.cmp　：フィード先のコンポーネント ID
IFDSTO.msh　：フィード先のメッシュ番号
　　メッシュの上流端に注入されるとしてメッシュ内の流量を計算する。

８．４．２．３　コンポーネントデータ

各コンポーネント（ncomp 個）について、以下の入力値を列記する。パルスカラムについて記述する場合には 8.4.2.3.1 及び 8.4.2.3.2 節、ミキサセトラの場合 8.4.2.3.1 及び 8.4.2.3.3 節、水相タンクの場合 8.4.2.3.1 及び 8.4.2.3.4、有機相タンクの場合 8.4.2.3.1 及び 8.4.2.3.5 節に示した項目を入力する。

８．４．２．３．１　共通データの入力

（１）ID,　iType,　MSH,　idisp
ID　　：コンポーネント ID

TRNLBL を指定する場合は、1～99 までの正整数。連番である必要はない。

iType ：コンポーネントの種類を選択（正整数）

パルスカラム	0
ミキサセトラ	1
水相タンク	2
有機相タンク	3

MSH ：コンポーネントを区切るメッシュ数

パルスカラムでは上下分相タンクを含むメッシュ数を、またミキサセトラでは段数を表す。TRNLBL を指定する場合は、1～999 までの正整数。水相又は有機相タンクの場合には入力しない。

idisp ：分散相の選択　タンクの場合には入力しない。

水相分散（有機相連続）	0
有機相分散（水相連続）	1

（２）ICDSTA.cmp,　ICDSTA.msh

パルスカラム、ミキサセトラ又は水相タンクの場合に入力する。有機相タンクでは入力しない。

ICDSTA.cmp ：コンポーネントの水相の出口が接続されている先のコンポーネント ID

どのコンポーネントにも接続されない場合（系外に流出する場合）は 0。

ICDSTA.msh ：コンポーネントの水相の出口が接続されている先のコンポーネントのメッシュ番号

ICDSTA.cmp が 0 の場合は、任意の整数値。

（３）ICDSTO.cmp,　ICDSTO.msh

パルスカラム、ミキサセトラ又は水相タンクの場合に入力する。水相タンクでは入力しない。

ICDSTO.cmp ：コンポーネントの有機相の出口が接続されている先のコンポーネント ID

どのコンポーネントにも接続されない場合は 0。

ICDSTO.msh ：コンポーネントの有機相の出口が接続されている先のコンポーネントのメッシュ番号

ICDSTO.cmp が 0 の場合は、任意の整数値。

（４）T

T ：コンポーネントの運転温度　[℃]

反応速度や分配比計算に用いられる。

（５）rxh,　rxu6,　rxpu4

水相の物性値推算に必要な入力を記述する。パルスカラム、ミキサセトラ又は水相タンクの場合に入力する。有機相タンクでは入力しない。

rxh ：水相の代表硝酸濃度　[mol dm^{-3}]

rxu6　：水相の代表 U(VI)濃度　[g dm^{-3}]
rxpu4　：水相の代表 Pu(IV)濃度　[g dm^{-3}]

（６）ryh,　ryu6,　rypu4
　有機相の物性値推算に必要な入力を記述する。パルスカラム、ミキサセトラ又は有機相タンクの場合に入力する。水相タンクでは入力しない。
ryh　：有機相の代表硝酸濃度　[mol dm^{-3}]
ryu6　：有機相の代表 U(VI)濃度　[g dm^{-3}]
rypu4　：有機相の代表 Pu(IV)濃度　[g dm^{-3}]

８．４．２．３．２　パルスカラムに関する入力

（１）ara,　alp,　amp,　freq,　h,　d0
ara　：パルスカラムの断面積　[cm^2]
alp　：目皿板 free area 分率（0 ～ 1.0 の間の小数）　[-]
amp　：パルス振幅を 2 倍した値（両振幅）　[cm]
freq　：パルス振動数　[min^{-1}]
h　：プレート間隔　[cm]
d0　：プレートの穴直径　[cm]

（２）phi1,　phi2
phi1　：下部分相タンクにおける水相のホールドアップ（0 ～ 1.0 の間の小数）[-]
phi2　：上部分相タンクにおける水相のホールドアップ（0 ～ 1.0 の間の小数）[-]

（３）sa1,　sa2
sa1　：下部分相タンクにおける単位体積当たりの界面積　[cm^{-1}]
sa2　：上部分相タンクにおける単位体積当たりの界面積　[cm^{-1}]

（４）BETAB1,　BETAB2, ...（nspe 個の値の並び）
BETAB1,　BETAB2, ...　：各化学種の下部分相タンクにおける有機相基準の総括物質移動係数　[cm s^{-1}]

（５）BETAT1,　BETAT2, ...（nspe 個の値の並び）
BETAT1,　BETAT2, ...　：各化学種の下部分相タンクにおける有機相基準の総括物質移動係数　[cm s^{-1}]

（６）X1,　X2, ...（nspe 個の値の並び）
　以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。

X1, X2, ... ：各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20)で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（７）Y1, Y2, ...（nspe 個の値の並び）
以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。
Y1, Y2, ...：各化学種の有機相初期濃度　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（８）VB, VT
VB ：下部分相タンクの容積　　[dm^3]
VT ：上部分相タンクの容積　　[dm^3]

（９）DZ1, DZ2, ...（MSH-2 個の値の並び）
DZ1, DZ2, ... ：上下分相タンクを除いた部分（シャフト部）を鉛直方向にメッシュ分割したときの各メッシュの幅（高さ）　　[cm]

８．４．２．３．３　ミキサセトラに関する入力

（１）XM1, XM2, ...（nspe 個の値の並び）
以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。
XM1, XM2, ... ：ミキサ部の各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（２）XS1, XS2, ...（nspe 個の値の並び）
以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。
XS1, XS2, ... ：セトラ部の各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（３）YM1, YM2, ...（nspe 個の値の並び）
以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。

YM1,　YM2, ... ：ミキサ部の各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（４）YS1,　YS2, ...（nspe 個の値の並び）
以下を繰り返し、MSH 行のテーブルとする。
YS1,　YS2, ...　：セトラ部の各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（５）V11,　V12, ...（MSH 個の値の並び）
V11,　V12, ...：各段のミキサ部の容積　　[dm^3]

（６）V21,　V22, ...（MSH 個の値の並び）
V21,　V22, ...：各段のセトラ部の容積　　[dm^3]

（７）FR1,　FR2, ...（MSH 個の値の並び）
FR1,　FR2, ...：各段のリサイクル流量　　[dm^3 h^{-1}]

（８）phi1
phi1　：ミキサ部の水相のホールドアップ（0 ～ 1.0 の間の小数）[-]

８．４．２．３．４　水相タンクに関する入力

（１）X1, X2, ...（nspe 個の値の並び）
X1, X2, ...　：各化学種の水相初期濃度　　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（２）V1
V1　：水相タンクの容積　　[dm^3]

８．４．２．３．５　有機相タンクに関する入力

（１）Y1,　Y2, ...　（nspe 個の値の並び）

Y1, Y2, ...　：各化学種の有機相初期濃度　[g dm^{-3}] 又は [mol dm^{-3}]

化学種の並べる順序は、8.4.2.2.2 節と同様である。8.4.2.1 節(19)において iRstFlg = 1 の場合は、(20) で指定される CRFILE から初期濃度が読み込まれるので入力しない。

（２）V1

V1　：有機相タンクの容積　[dm^3]

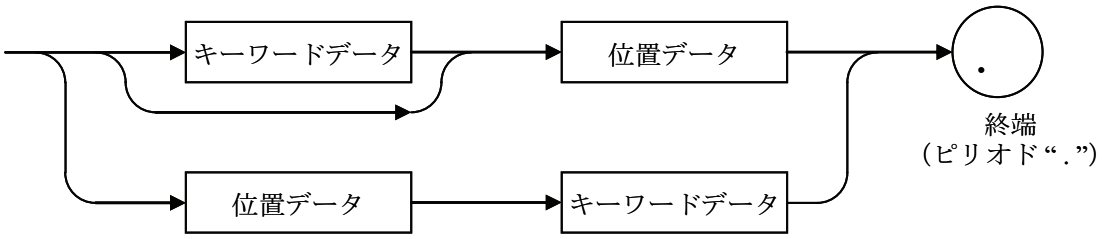
表８．１　インタプリタ入力での各化学種の表記法

インタプリタ入力での表記法（半角英数字で表記）	PARC における解釈		x_{NO3} への寄与 有：○ 無：×	C_N への寄与 有：○ 無：×
H	H^+	水素イオン	○	○
U(VI)	UO_2^{2+}	ウラン 6 価	○	○
Pu(IV)	Pu^{4+}	プルトニウム 4 価	○	○
Pu(III)	Pu^{3+}	プルトニウム 3 価	○	○
U(IV)	U^{4+}	ウラン 4 価	○	○
HAN	NH_3OH^+	ヒドロキシルアミン	×	○
HYD	$N_2H_5^+$	ヒドラジン	×	○
HNO2	HNO_2	亜硝酸	×	×
Zr	Zr	ジルコニウム	×	×
Tc	Tc	テクネチウム	×	×
Np(IV)	Np^{4+}	ネプツニウム 4 価	○	○
Np(V)	NpO_2^+	ネプツニウム 5 価	○	○
Np(VI)	NpO_2^{2+}	ネプツニウム 6 価	○	○
HN3	HN_3	アジ化水素	×	×
iC3H7CHO	iso-C_3H_7CHO	iso-ブチルアルデヒド	×	×
nC3H7CHO	n-C_3H_7CHO	n-ブチルアルデヒド	×	×
iC3H7COOH	iso-C_3H_7COOH	iso-酪酸	×	×
nC3H7COOH	n-C_3H_7COOH	n-酪酸	×	×
I	I	ヨウ素	×	×
Cs	Cs	セシウム	×	×
Ru(III)	Ru^{3+}	ルテニウム 3 価	×	×
V(IV)	V^{4+}	バナジウム 4 価	×	×
V(V)	V^{5+}	バナジウム 5 価	×	×
DBP	DBP	リン酸ジブチル	×	×
MBP	MBP	リン酸モノブチル	×	×
PO4	H_3PO_4	リン酸	×	×
FP	FP	核分裂生成物（注 1）	×	×
H2O2	H_2O_2	過酸化水素	×	×
H2O	H_2O	水（注 2）	－	－
NO3	NO_3^-	硝酸イオン（注 2）	－	－

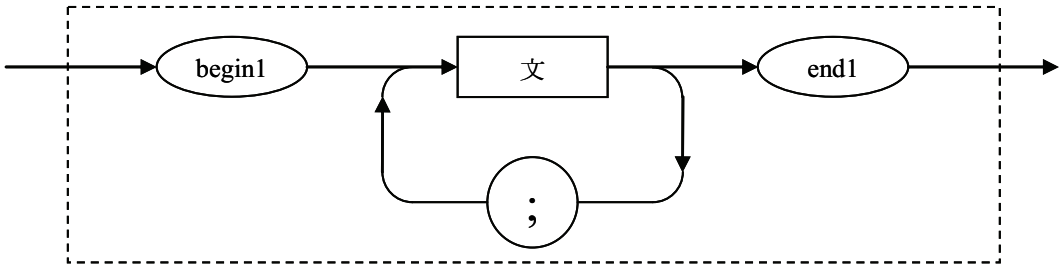
（注 1）既に組み込まれているモデルでは、FP（核分裂生成物）をひとつの元素と同等に扱い、分配比を定義している（6 章参照）。

（注 2）H_2O 及び NO_3^- は、インタプリタ入力は受け付けるが、独立した化学種としての濃度計算は行わない。

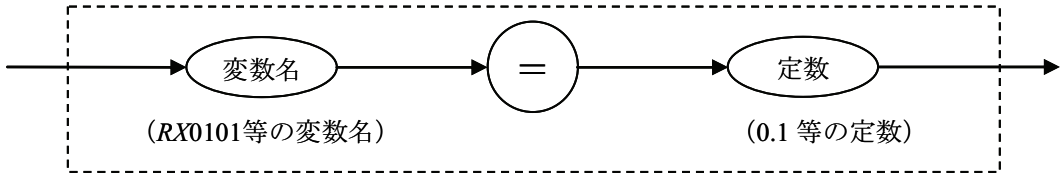
(a) 入力ファイルの構造



(b) キーワードデータの構造



(c) 文の構造



(d) 位置データの構造

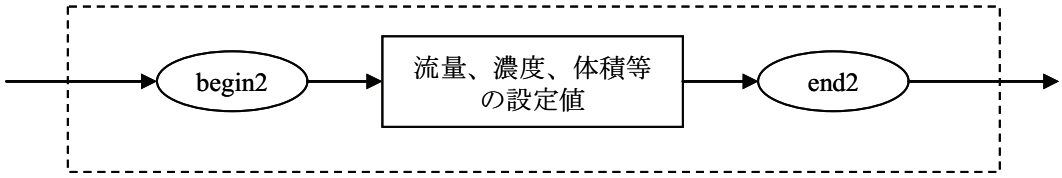
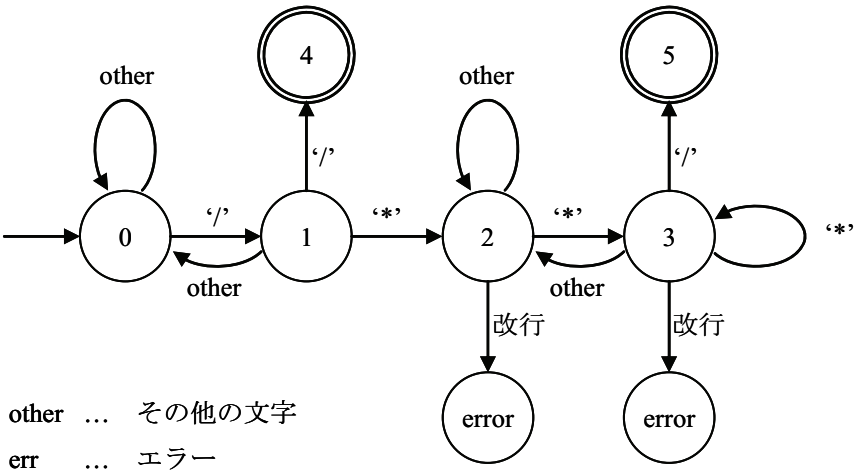
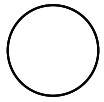


図８．１　PARC 入力データの構文グラフ

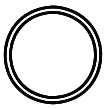


other … その他の文字

err … エラー



… 状態

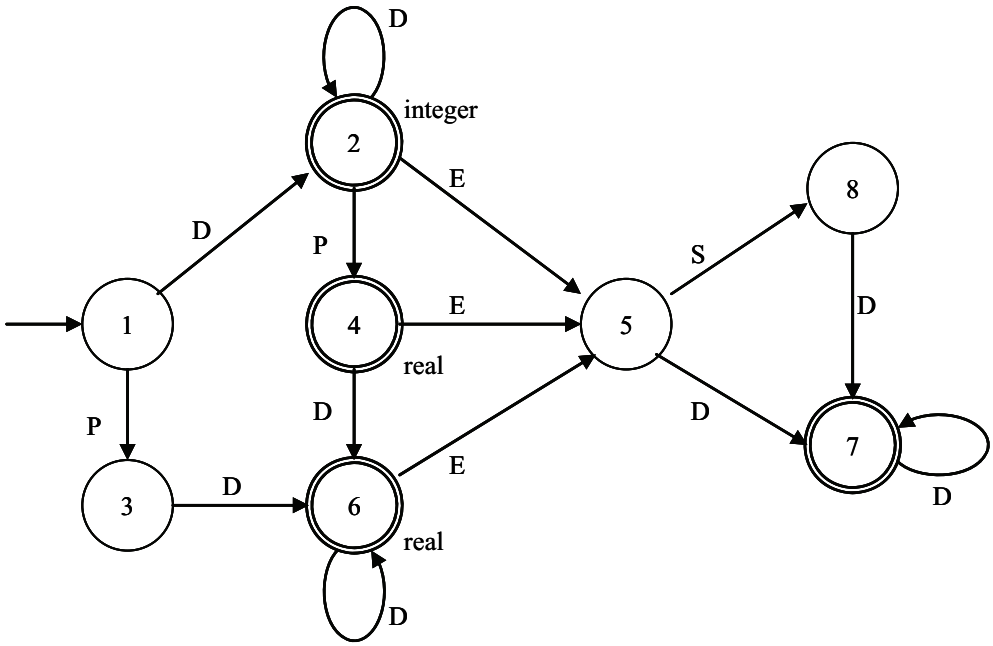


… 受理状態

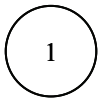
この有限オートマトンは、“//”が入力されると状態4に遷移し受理する（エラーにならない）。

また、“/*（文字列） */”が入力されると、状態5に遷移し受理する。”/*”及び”*/”の間に改行が入るとエラーとなる。

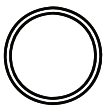
図８．２　入力ファイル中のコメントを認識する決定性有限オートマトン



D … ‘0’, ‘1’, ‘2’ , ... ‘9’ の文字 (digit)
S … 正負を示す’+’, ‘-’の文字 (sign)
P … 小数点 (point)
E … 指数部を表す’E’, ‘e’の文字（’D’は不可）



… 状態 中の数字は状態番号



… 受理状態 受理状態2に至った場合は整数型として受理する。
受理状態4または6に至った場合は実数型として受理する。
最後まで受理状態に到達できなかった場合はエラーとなる。

図８．３ 整数型と実数型を識別する決定性有限オートマトン

９　出力ファイルの書式

本章では、PARC を実行した際に生成するファイルについて説明する。全てのファイルはテキスト形式である。

９．１　主要出力（".out" ファイル）

PARC を実行すると、ファイル名の拡張子が ".out" である主要出力ファイル（テキストファイル）が一つ生成される。以下の内容が順に出力される。" " で囲まれた部分は、文字列を示す。

９．１．１　入力データのエコーバック

入力データの全行を出力する。

９．１．２　パルスカラムに関する出力

各パルスカラムについて以下のように、ユーザ指定のタイミング（8.4.2.1 節(15)参照）で出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（PRINTMIN = 10^{-100}）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）Title

Title　：計算タイトル

（２）Time,　dt,　nStep,　Iter

Time　：時刻
dt　　：タイムステップサイズ
nStep　：計算ステップ数
Iter　　：イタレーション回数

（３）　ID,　TYPE,　idisp

ID　　：コンポーネント ID
TYPE　：コンポーネントタイプ
idisp　：分散相を示すフラグ（0：水相分散、1：有機相分散）

（４）rhoa,　rhoo

rhoa ：水相密度　　（3.4.1 節参照）
rhoo ：有機相密度　　（3.4.1 節参照）

（５）mua,　muo
mua ：水相粘性率　　（3.4.2 節参照）
muo ：有機相粘性率　（3.4.2 節参照）

（６）sig
sig　：界面張力　　（3.4.3 節参照）

（７）"---- Pulsed Column Concentrations (Aqueous) ----"

（８）"mesh"　X 化学種名　"XNO3　　Tf　　ConMSa"
　　"NO. "　濃度単位　　"(mol/l)　(mol/l)　(-)　"
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（９）j+1,　Xn,　xno3,　Tf,　ConFca
　各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。
j+1　　：メッシュ番号（1 ～ nmsh までの整数）
Xn　　：各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）
xno3　：硝酸根濃度
Tf　　：フリーTBP 濃度
ConFca：体積モル濃度から Solute-free 濃度への変換係数

（１０）"---- Pulsed Column Concentrations (Organic) ----"

（１１）"mesh"　Y 化学種名
　　"NO. "　濃度単位　"(mol/l)"　"(mol/l)"　"(-)"
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１２）j+1,　Xn
　各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。
j+1　：メッシュ番号（1～nmsh までの整数）
Xn　：各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

（１３）"---- Distribution Coefficients (Pulsed Column) ----"

（１４）"mesh"　D 化学種名
　　"NO. "　"(-)"

（１５）j+1,　Dis

各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：メッシュ番号（1～nmsh までの整数）

Dis　：各化学種の分配比　[-]

（１６）"---- Mass Transfer Coefficients (Pulsed Column) ----"

（１７）"mesh"　BT 化学種名

"NO. "　"(cm/s)"

（１８）j+1,　Beta's

各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：メッシュ番号（1～nmsh までの整数）

Beta：各化学種の総括物質移動係数（3.1.5 節における β、化学種数 nspe）

（１９）"---- Others (Pulsed Column) ----"

（２０）"mesh　DIV.　SA　PhiA　PhiO　EA　EO　FA　FO"

"NO.　NO.　(1/m)　(-)　(-)　(m2/s)　(m2/s)　(l/h)　(l/h)"

（２１）j+1,　hd+1,　SA,　Phi,　1-Phi,　EA,　EO,　FA,　FO

各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：メッシュ番号（1～nmsh までの整数）

hd+1　：ディヴィジョン番号（整数）

SA　：単位体積当たりの界面積　（3.1.5 節参照）

Phi　：水相ホールドアップ　（3.1.6 節参照）

1-Phi　：有機相ホールドアップ　（3.1.6 節参照）

EA　：水相の逆混合係数　（3.1.4 節参照）

EO　：有機相の逆混合係数　（3.1.4 節参照）

FA　：水相の流量

FO　：有機相の流量

（２２）"---- Values for Mass Balance (Pulsed Column) ----"

（２３）"Item"　化学種名　"Outgo"

（単位）

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（２４）"Total Fd." MssFlwFd's "(-)"

MssFlwFd ：連結されたシステム（全コンポーネント）への単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）の和。（化学種数 nspe）

（２５）"Sum. In" MSSFLWSRC "(-)"

MSSFLWSRC：コンポーネントへの単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）の和（他コンポーネントからの流入＋システム外部からのフィード）。（化学種数 nspe）

（２６）"Out A" MSSOUTA OUTGO

MSSOUTA ：そのコンポーネントから出て行く水相流量（化学種数 nspe）

OUTGO ：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２７）"Out O" MSSOUTO OUTGO

MSSOUTO ：そのコンポーネントから出て行く有機相流量（化学種数 nspe）

OUTGO ：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合"OUT"、他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２８）"Item" 化学種名 "Outgo"
"(%)"

（２９）"Out Rat. A" MSSRATIOA OUTGO

MSSRATIOA ：MSSOUTA と MssFlwFd の比（= MSSOUTA / MssFlwFd）（化学種数 nspe）

OUTGO ：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（３０）"Out Rat. O" MSSRATIOO OUTGO

MSSRATIOO ：MSSOUTO と MssFlwFd の比（= MSSOUTO / MssFlwFd）（化学種数 nspe）

OUTGO ：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（３１）"Item" 化学種名
（単位）

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（３２）"Mass Inv." MSSINV

MSSINV ： マスインベントリ

９．１．３　ミキサセトラに関する出力

各ミキサセトラについて以下のように、ユーザ指定のタイミング（8.4.2.1 節(15)参照）で出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（PRINTMIN = 10^{-100}）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）Title

Title　：計算タイトル

（２）Time,　dt,　nStep,　Iter

Time　：時刻

dt　　：タイムステップサイズ

nStep　：計算ステップ数

Iter　　：イタレーション回数

（３）ID,　TYPE,　idisp

ID　　：コンポーネント ID

TYPE　：コンポーネントタイプ

idisp　：分散相を示すフラグ（0：水相分散、1：有機相分散）

（４）rhoa,　rhoo

rhoa：水相密度　　（3.4.1 節参照）

rhoo：有機相密度　　（3.4.1 節参照）

（５）mua,　muo

mua：水相粘性率　　（3.4.2 節参照）

muo：有機相粘性率　（3.4.2 節参照）

（６）sig,　PhiS

sig　：界面張力　　（3.4.3 節参照）

PhiS：各ミキサセトラのセトラ部の水相ホールドアップ

（７）"---- Mixer Concentrations (Aqueous) ---"

（８）"mesh"　X 化学種名　　"XNO3　　Tf　　ConMSa"

"NO."　濃度単位（注　）"(mol/l)　(mol/l)　(-)　"

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（９）j+1,　Xn,　xno3,　Tf,　ConFca

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：段番号（1～nmsh までの整数）

Xn　　：ミキサ部での各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）

xno3　：硝酸根濃度

Tf　　：フリーTBP 濃度

ConFca：体積モル濃度から Solute-free 濃度への変換係数

（１０）"---- Settler Concentrations (Aqueous) ----"

（１１）"mesh"　X 化学種名　"XNO3"

"NO."　濃度単位　"(mol/l)"

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１２）j+1,　Xn,　xno3

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：段番号

Xn　：セトラ部での各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）

xno3：硝酸根濃度

（１３）"---- Mixer Concentrations (Organic) ----"

（１４）"mesh"　Y 化学種名

"NO."　濃度単位

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１５）j+1,　Xn

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：段番号

Xn　：ミキサ部での各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

（１６）"---- Settler Concentration (Organic) ----"

（１７）"mesh"　Y 化学種名

"NO."　濃度単位

濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１８）j+1,　Xn

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：段番号

Xn　：セトラ部での各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

（１９）"---- Distribution Coefficients (Mixer) ----"

（２０）"mesh"　D 化学種名

"NO. "　"(-)"

（２１）j+1,　Dis

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　：段番号

Dis　：各化学種の分配比

（２２）"---- Mass Transfer Coefficients (Mixer) ----"

（２３）"mesh"　BT 化学種名

"NO. "　"(cm/s)"

（２４）j+1,　Beta's

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：段番号（1～nmsh までの整数）

Beta　：ミキサ部での各化学種の総括物質移動係数（3.1.5 節における β、化学種数 nspe）

（２５）"---- Others (Mixer) ----"

（２６）"mesh　DIV.　SA　PhiA　PhiO　FA　FO"

"NO.　NO.　(1/m)　(-)　(-)　(l/h)　(l/h)"

（２７）j+1,　hd+1,　SA,　Phi,　1-Phi,　FA,　FO

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：段番号（1～nmsh までの整数）

hd+1　：ディヴィジョン番号（整数）

SA　　：単位体積当たりの界面積　（3.2.4 節参照）

Phi　　：水相ホールドアップ　　（3.2.4 節参照）

1-Phi　：有機相のホールドアップ　（3.2.4 節参照）

FA　　：水相の流量

FO　　：有機相の流量

（２８）"---- Values for Mass Balance (Mixer Settler) ----"

（２９）"Item"　化学種名　"Outgo"
　　（単位）
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（３０）"Total Fd."　MssFlwFd　"(-)"
MssFlwFd　：連結されたシステム（全コンポーネント）への単位時間当たりフィード量
　　（水相＋有機相）の和。（化学種数 nspe）

（３１）"Sum. In"　MSSFLWSRC　"(-)"
MSSFLWSRC：そのコンポーネントへの単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）
　　の和（他コンポーネントからの流入＋システム外部からのフィード）。
　　（化学種数 nspe）

（３２）"Out A"　MSSOUTA　OUTGO
MSSOUTA：そのコンポーネントから出て行く水相流量（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（３３）"Out O"　MSSOUTO's　OUTGO
MSSOUTO：そのコンポーネントから出て行く有機相流量（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（３４）"Item"　化学種名　"Outgo"
　　"(%)"

（３５）"Out Rat. A"　MSSRATIOA　OUTGO
MSSRATIOA：MSSOUTA と MssFlwFd の比（= MSSOUTA / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（３６）"Out Rat. O"　MSSRATIOO　OUTGO
MSSRATIOO：MSSOUTO と MssFlwFd の比（= MSSOUTO / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、

他のコンポーネントに流入するとき ″(-)″

（３７）″Item″　化学種名

（単位）

濃度単位の表記は、化学種によって″(mol/l)″又は″(g/l)″のいずれかが選択される。

（３８）″Mass Inv.″　MSSINV

MSSINV ：　マスインベントリ

９．１．４　水相タンクに関する出力

各水相タンクについて以下のように、ユーザ指定のタイミング（8.4.2.1 節(15)参照）で出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（PRINTMIN = 10^{-100}）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）Title

Title　：計算タイトル

（２）Time,　dt,　nStep,　Iter

Time　：時刻

dt　　：タイムステップサイズ

nStep　：計算ステップ数

Iter　　：イタレーション回数

（３）ID,　TYPE

ID　　：コンポーネント ID

TYPE　：コンポーネントタイプ

（４）rhoa

rhoa　：水相密度　　（3.4.1 節参照）

（５）mua

mua　：水相粘性率　　（3.4.2 節参照）

（６）″---- Aqueous Tank Concentration ----"

（７）″mesh″　X 化学種名　″XNO3″

″NO. ″　濃度単位　　″(mol/l)″

濃度単位の表記は、化学種によって″(mol/l)″又は″(g/l)″のいずれかが選択される。

（８）j+1,　Xn,　xno3
j+1　：メッシュ番号　（= 1）
Xn　：各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）
xno3：硝酸根濃度

（９）"---- Others (Aqueous Tank) ----"

（１０）"mesh　DIV.　FA"
"NO.　NO.　(l/h)"

（１１）j+1,　hd+1,　FA
j+1　：メッシュ番号　（= 1）
hd+1　：ディヴィジョン番号（整数）
FA　：水相の流量

（１２）"---- Values for Mass Balance (Aqueous Tank) ----"

（１３）"Item"　化学種名　"Outgo"
（単位）
濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１４）"Total Fd."　MssFlwFd's　"(-)"
MssFlwFd　：連結されたシステム（全コンポーネント）への単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）の和（化学種数 nspe）

（１５）"Sum. In"　MSSFLWSRC　"(-)"
MSSFLWSRC：そのコンポーネントへの単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）の和（他コンポーネントからの流入＋システム外部からのフィード）。（化学種数 nspe）

（１６）"Out A"　MSSOUTA　OUTGO
MSSOUTA：そのコンポーネントから出て行く水相流量。（化学種数 nspe）
OUTGO　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合"OUT"、他のコンポーネントに流入するとき"(-)"

（１７）"Out O"　MSSOUTO　OUTGO
MSSOUTO：そのコンポーネントから出て行く有機相流量。（化学種数 nspe）

OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（１８）"Item"　化学種名　"Outgo"
　　"(%)"

（１９）"Out Rat. A"　MSSRATIOA's　OUTGO
MSSRATIOA ：MSSOUTA と MssFlwFd の比（= MSSOUTA / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２０）"Out Rat. O"　MSSRATIOO　OUTGO
MSSRATIOO ：MSSOUTO と MssFlwFd の比（= MSSOUTO / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
　　他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２１）"Item"　化学種名
　　（単位）
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（２２）"Mass Inv."　MSSINV
MSSINV ：　マスインベントリ

９．１．５　有機相タンクに関する出力

各有機相タンクについて以下のように、ユーザ指定のタイミング（8.4.2.1 節(15)参照）で出力する。
※ 濃度が PRINTMIN（PRINTMIN = 10^{-100}）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）Title
Title　：計算タイトル

（２）Time,　dt,　nStep,　Iter
Time　：時刻
dt　　：タイムステップサイズ
nStep　：計算ステップ数
Iter　　：イタレーション回数

（３）ID,　TYPE
ID　　：コンポーネント ID
TYPE　：コンポーネントタイプ

（４）rhoo
rhoo　：有機相密度　　（3.4.1 節参照）

（５）muo
muo ：　有機相粘性率　　（3.4.2 節参照）

（６）"---- Organic Tank Concentrations ----"

（７）"mesh"　Y 化学種名
　"NO. "　濃度単位
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（８）j+1,　Xn
j+1　：メッシュ番号　（= 1）
Xn　：各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

（９）"---- Others (Organic Tank) ----"

（１０）"mesh　DIV.　FO"
　"NO.　NO.　(l/h)"

（１１）j+1,hd+1,FO
j+1　　：メッシュ番号（= 1）
hd+1　：ディヴィジョン番号（整数）
FO　　：有機相の流量

（１２）"---- Values for Mass Balance (Organic Tank) ----"

（１３）"Item"　化学種名　"Outgo"
　　（単位）
　濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（１４）"Total Fd."　MssFlwFd's　"(-)"
MssFlwFd　：連結されたシステム（全コンポーネント）への単位時間当たりフィード量

（水相＋有機相）の和。（化学種数 nspe）

（１５）"Sum. In"　MSSFLWSRC　"(-)"
MSSFLWSRC：そのコンポーネントへの単位時間当たりフィード量（水相＋有機相）
の和（他コンポーネントからの流入＋システム外部からのフィード）。
（化学種数 nspe）

（１６）"Out A"　MSSOUTA　OUTGO
MSSOUTA ：そのコンポーネントから出て行く水相流量。（化学種数 nspe）
OUTGO　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（１７）"Out O"　MSSOUTO　OUTGO
MSSOUTO ：そのコンポーネントから出て行く有機相流量。（化学種数 nspe）
OUTGO　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（１８）"Item"　化学種名　"Outgo"
"(%)"

（１９）"Out Rat. A"　MSSRATIOA's　OUTGO
MSSRATIOA ：MSSOUTA と MssFlwFd の比（= MSSOUTA / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２０）"Out Rat. O"　MSSRATIOO　OUTGO
MSSRATIOO ：MSSOUTO と MssFlwFd の比（= MSSOUTO / MssFlwFd）（化学種数 nspe）
OUTGO　：他のコンポーネントに流入せず、システムから流出する場合 "OUT"、
他のコンポーネントに流入するとき "(-)"

（２１）"Item"　化学種名
（単位）
濃度単位の表記は、化学種によって"(mol/l)"又は"(g/l)"のいずれかが選択される。

（２２）"Mass Inv."　MSSINV
MSSINV ：　マスインベントリ

９．２　リスタート出力（".rst"ファイル）

PARC を実行すると、ファイル名の拡張子が .rst であるリスタート出力ファイル（テキストファイル）がユーザ指定のタイミングで、指定の個数が生成される。以下の内容が順に出力される。" "で囲まれた部分は、文字列を示す。

９．２．１　共通データ

（１）nspe, ″mesh″, 化学種名, ″XNO3″, ″Tf″, ″FlwRat″
nspe　　：化学種数

（２）ncomp, Time, dt, EndTim
ncomp　：コンポーネント数
Time　　：時刻
dt　　：タイムステップサイズ
EndTim　：計算終了時刻

９．２．２　パルスカラムの濃度に関する出力

各コンポーネントについて濃度データを出力する。
※ 濃度が PRINTMIN（現在 10^{-100} としている。）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）ID, nmsh, ″1″
ID　　：コンポーネント ID
nmsh　：メッシュ数

（２）j+1, Xn, xno3, Tf, FA
各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。
j+1　　：メッシュ番号
Xn　　：各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）
xno3　：硝酸根濃度
Tf　　：フリーTBP 濃度
FA　　：水相流量

（３）ID, nmsh, ″2″
ID　　：コンポーネント ID
nmsh　：メッシュ数

（４）j+1,　Xn,　″0.00000e+000″,　″0.00000e+000″,　FO

各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：メッシュ番号

Xn’s　：各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

FO　　：有機相流量

９．２．３　ミキサセトラの濃度に関する出力

各コンポーネントについて濃度データを出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（現在 10^{-100} としている。）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）ID,　nmsh,　″3″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：段数

（２）j+1,　Xn,　xno3,　Tf,　FA

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：ステージ番号

Xn　　：ミキサ部での各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）

xno3　：硝酸根濃度

Tf　　：フリーTBP 濃度

FA　　：水相流量

（３）ID,　nmsh,　″4″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：段数

（４）j+1,　Xn,　xno3,　0.0,　0.0

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：ステージ番号

Xn　　：セトラでの各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）

xno3　：硝酸根濃度

（５）ID,　nmsh,　″5″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：段数

（６）j+1,　Xn,　0.0,　0.0,　FO

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：ステージ番号

Xn　　：ミキサでの各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

FO　　：有機相流量

（７）ID,　nmsh,　″6″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：段数

（８）j+1,　Xn,　0.0,　0.0,　0.0

各段（段数 nmsh）について以下を出力する。

j+1　　：ステージ番号

Xn　　：セトラ部での各化学種の有機相濃度（化学種数 nspe）

９．２．４　水相タンクの濃度に関する出力

各コンポーネントについて濃度データを出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（現在 10^{-100} としている。）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）ID,　nmsh,　″7″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：メッシュ数　(=1)

（２）j+1,　Xn,　xno3,　0.0,　FA

j+1　　：メッシュ番号　(=1)

Xn　　：各化学種の水相濃度（化学種数 nspe）

xno3　：硝酸根濃度

FA　　：水相流量

９．２．５　有機相タンクの濃度に関する出力

各コンポーネントについて濃度データを出力する。

※ 濃度が PRINTMIN（現在 10^{-100} としている。）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）ID,　nmsh,　″8″

ID　　：コンポーネント ID

nmsh　：メッシュ数　(=1)

（２）j+1,　Xn,　0.0,　0.0,　FO
j+1　　：メッシュ番号　(=1)
Xn　　：有機相濃度。nspe 個
FO　　：有機相流量

９．２．６　パルスカラムの分配比に関する出力

各コンポーネントについて分配比データを出力する

（１）ID,　nmsh,　″9″
ID　　：コンポーネント ID
nmsh　：メッシュ数

（２）j+1,　Dis
　各メッシュ（メッシュ数 nmsh）について以下を出力する。
j+1　：メッシュ番号
Dis　：各化学種の分配比（化学種数 nspe）

９．２．７　ミキサセトラの分配比に関する出力

各コンポーネントについて分配比データを出力する

（１）ID,　nmsh,　″10″
ID　　：コンポーネント ID
nmsh　：段数

（２）j+1,　Dis’s
　各段（段数 nmsh）について以下を出力する。
j+1　：ステージ番号
Dis　：分配比。nspe 個

９．３　経時出力（".trn"ファイル）

PARC を実行すると、ファイル名の拡張子が .trn である経時出力ファイル（テキストファイル）が生成される。以下の内容が順に出力される。" "で囲まれた部分は、文字列を示す。
※ 濃度が PRINTMIN（現在 10^{-100} としている。）より小さい場合は 0 として表示する。

（１）"Time", TrnLbl

TrnLbl　：過渡データのラベル（8.4.2.1 節(23)～(24)参照）。nTrnLbl（入力データ）個

（２）Time, Xn's

以下を nRFile（8.4.2.1 節(21)参照）回繰り返す

Time　：時刻　[min]

Xn　：指定した化学種の濃度（nTrnLbl 個）

９．４　収束状態出力（".cnv"ファイル）

Newton 法による計算の繰返し回数が最大数 ItMax に達しても収束しなかった場合に、各コンポーネント毎、各化学種毎の濃度の収束状況を出力する。

（１）Time, dt, nStep, ItMax

Time　：時刻　[min]

dt　：タイムステップ幅　[min]

nStep　：計算ステップ数

ItMax　：最大イタレーション回数

（２）"Cmp. ID", "Type", 化学種名

（３）ID, コンポーネントタイプ, 相対誤差

全コンポーネントのコンポーネントタイプの数だけ繰り返す

ID　：コンポーネント ID

コンポーネントタイプ：パルスカラム水相、有機相　PA, PO

ミキサセトラミキサ部水相、有機相　MA, MO

同　セトラ部水相、有機相　SA, SO

水相タンク　AA

有機相タンク　OO

相対誤差　：各メッシュの濃度変化量（繰返し計算前後での変化量）の二乗和の平方根。

１０　ＰＡＲＣによる計算実行例

本章では、PARC を用いた PUREX プロセスの計算例を示す。図 10.1 はプルトニウム精製工程のフローシートの例であり、公開文献[62-63] を参考に作成した。図 10.2 に入力ファイル example1.inp の例を示す。

図 10.3 は、PARC 実行後のフォルダ内のファイル生成の様子を示している。この実行例は、DELL 社製 PC、Optiplex GX520（CPU : Pentium 4 (3.2 GHz)、主記憶 : 2 GBytes）で実行したものである。過渡計算と定常計算は 3～4 分程度で終了し、フォルダ内には 1 個の example1.out ファイル、14 個の example1T1***.rst ファイル（過渡計算結果）及び 1 個の example1S2.rst ファイル（定常計算結果）が生成されたほか、エラー出力、標準出力、ワークファイルが生成された。

図 10.4 は、定常計算の結果（example1S2.rst）をプロットしたものである。横軸は抽出器のメッシュ番号（段番号）、縦軸は各化学種の濃度を表している。

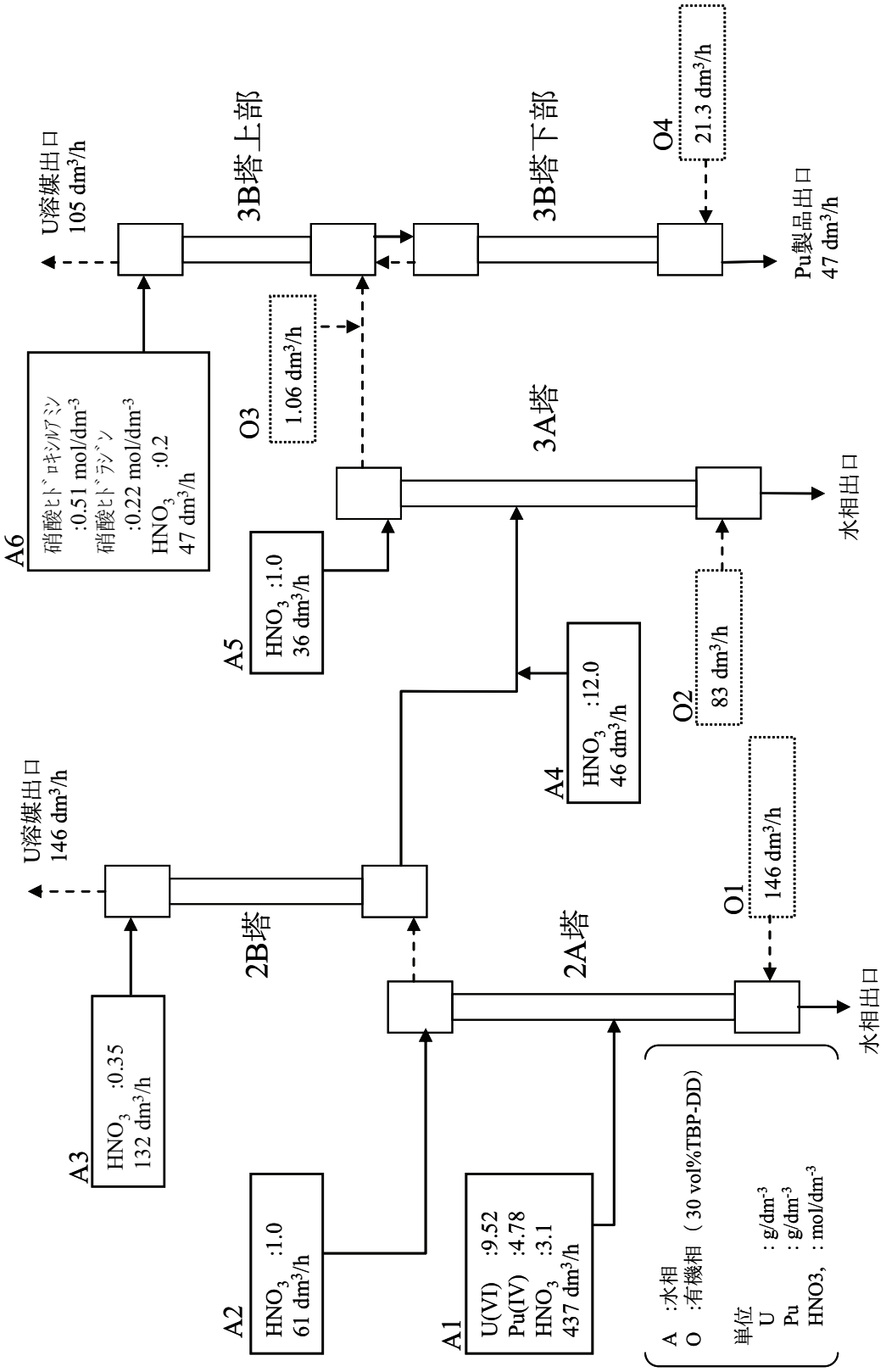


図１０．１　PUREXプロセスの計算例

```
//
//    input -- example1.inp                 2007.9
//    INPUT DATA SHEET for PARC_L01 CODE
//

// *** header block ***

//begin1
//end1

begin2
/* Title */
 An example of PUREX Plant

/* nMemSiz */  /* nMemQuadSiz */ /* nMemVarSiz */ /* nMemSymSiz */
   160000000      2000000           2000000          2000000

// 29 chemicals
//          1 2  3   4   5  6   7   8      9  10 11  12  13
//          H U6 Pu4 Pu3 U4 HAN HYD HNO2 - Zr Tc Np4 Np5 Np6
//          14  15   16   17   18     19 20 21 22  23 24   25  26  27      28   29
//        - HN3 iBAL nBAL iBAC nBAC - I  Cs Ru Pu6 V4 V5 - DBP MBP H3PO4 - FP - H2O2

/* fSpe     */  111111110000010000000000000       // 9 chemicals
/* nDel     */  0
/* iFrmTyp  */     /* lFrmNum   */
/* nwspe    */  0  /* ncomp     */  5  /* ns */  3
/* ChemFrm  */     /* AbbrevNam */     /* Weight */ /* fXNO3 */ /* fCN */ /* Valence */
/* nwFrm    */  0

// begin3
/* nCond    */     /* iFrmTyp   */
/* Description of chmical reactions */
// end3

/* ItMax */  50  /* eps */  1.0e-10  /* DtMin */  1.0e-5  /* nDtMax */  3  /* DtFac */  2.0
// TabDtMax(Time, DtMax)
   0.0    0.1
 600.0    1.0
1200.0   20.0

/* iTran   */  2
/* fPrintX */  11   /* fPrintR */  11    /* fPrintT */  00
/* Time1   */  0.0  /* Dt1     */  0.01  /* EndTim1 */  6000.0

/* iSoltFr */  0

/* iRstFlg */  0
/* CRFILE  */  /* test01T1050.rst */
/* nRFile  */  14
/* RTIMES  */      0.0   100.0   200.0   300.0   600.0
                1200.0  1800.0  2400.0  3000.0  3600.0
                4200.0  4800.0  5400.0  6000.0

/* nTrnLbl */  0
/* TRNLBLs */

/* Delta   */  5.0e-10

// Parameters for Mixer-Settlers
/* ck      */  100.0  /* dr      */  25.0  /* en      */  700.0
/* Frc     */  0.3    /* PhiS    */  0.5
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（１／８）

```
// Parameters for Neptunium
/* NPREAC  */  0      /* INPEQ   */  1     /* NPDIST  */  1

// <Feed data>

/* nfa     */  6      /* nfo     */  4
/* Tfd     */  30.0

// --- AQUEOUS FEED ---
// (A1) ------------------------------------------------------------ (A1)

/* nXfTab  */   2
// Concentration table ( 9 Chemicals )
// time H      U6     Pu4    Pu3    U4     HAN    HYD    HNO2
// min  M      g/L    g/L    g/L    g/L    M      M      M
   0.0  3.1    9.52   4.78   0.0    0.0    0.0    0.0    1.0e-5
//      Zr     Tc     Np4    Np5    Np6    HN3
//      g/L    g/L    g/L    g/L    g/L    M
                                           0.0

6000.0  3.1    9.52   4.78   0.0    0.0    0.0    0.0    1.0e-5
                                           0.0
/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   437.0
6000.0   437.0

/* IFDSTA.cmp */  1  /* IFDSTA.msh */  10


// (A2) ------------------------------------------------------------ (A2)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time H
// min  M
   0.0  1.0  7*0.0     0.0
6000.0  1.0  7*0.0     0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   61.0
6000.0   61.0

/* IFDSTA.cmp */  1  /* IFDSTA.msh */  20

// (A3) ------------------------------------------------------------ (A3)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time H
// min  M
   0.0  0.35  7*0.0   0.0
6000.0  0.35  7*0.0   0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   132.0
6000.0   132.0
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（２／８）

```
/* IFDSTA.cmp */  2  /* IFDSTA.msh */  20

// (A4) ------------------------------------------------------------ (A4)

/* nXfTab */  2
// Concentration table
// time H
// min  M
   0.0  12.0  7*0.0   0.0
6000.0  12.0  7*0.0   0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   46.0
6000.0   46.0

/* IFDSTA.cmp */  3  /* IFDSTA.msh */  10

// (A5) ------------------------------------------------------------ (A5)

/* nXfTab */  2
// Concentration table
// time H    U6    Pu4  Pu3  U4     HAN  HYD  HNO2  HN3
   0.0  1.0  0.0   0.0  0.0  0.0    0.0  0.0  0.0   0.0
6000.0  1.0  0.0   0.0  0.0  0.0    0.0  0.0  0.0   0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   36.0
6000.0   36.0

/* IFDSTA.cmp */  3  /* IFDSTA.msh */  20

// (A6) ------------------------------------------------------------ (A6)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time H    U6   Pu4  Pu3  U4   HAN    HYD    HNO2  HN3
   0.0  0.2  0.0  0.0  0.0  0.0  0.506  0.217  0.0   0.0
6000.0  0.2  0.0  0.0  0.0  0.0  0.506  0.217  0.0   0.0

/* nFfTab  */  2
//Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   47.0
6000.0   47.0

/* IFDSTA.cmp */  5  /* IFDSTA.msh */  30

// --- ORGANIC FEED ---
// (O1) ------------------------------------------------------------ (O1)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time
// min
   0.0   9*0.0
6000.0   9*0.0
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（３／８）

```
/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   146.0
6000.0   146.0

/* IFDST0.cmp */  1  /* IFDST0.msh */  1


// (02) ------------------------------------------------------------ (02)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time
// min
   0.0   9*0.0
6000.0   9*0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   83.0
6000.0   83.0

/* IFDST0.cmp */  3  /* IFDST02.msh */  1

// (03) ------------------------------------------------------------ (03)

/* nXfTab  */  2
// Concentration table
// time
// min
   0.0   9*0.0
6000.0   9*0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0   1.06
6000.0   1.06

/* IFDST0.cmp */  5  /* IFDST02.msh */  1

// (04) ------------------------------------------------------------ (04)

/* nXfTab */  2
// Concentration table
// time
// min
   0.0  9*0.0
6000.0  9*0.0

/* nFfTab  */  2
// Flowrate table
// min  [dm3/h]
   0.0  21.3
6000.0  21.3

/* IFDST0.cmp */  4  /* IFDST02.msh */  1
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（４／８）

```
// < Component Data >
// (Component 1 = Pulsed Column 1) --------------------------------

/* ID */  1  /* iType */  0  /* MSH */  20  /* idisp */  1
/* ICDSTA.cmp */  0  /* ICDSTA.msh */  0
/* ICDSTO.cmp */  2  /* ICDSTO.msh */  1
/* T   */  30.0
/* rxh */  2.0  /* rxu6 */  5.0  /* rxpu4 */  5.0
/* ryh */  0.5  /* ryu6 */  5.0  /* rypu4 */  5.0

// Pulsed Column Data
/* ara */ 314.0   /* alp */ 0.25 /* amp */ 2.0 /* freq */ 60.0 /* h */ 5.0 /* d0 */ 0.2
/* phi1*/ 0.99    /* phi2*/ 0.5
/* sa1 */ 3.48e-3 /* sa2 */ 1.03e-2

/* BETAB */
9*0.0
/* BETAT */
9*0.0

// Aqueous initial concentration (mesh 1 - 20)
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

// Organic initial concentration (mesh 1 - 20)
0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

/* VB [dm3] */  20  /* VT [dm3] */  40
/* DZ [cm]  */  18*62 // mesh 2 - 19

// (Component 2 = Pulsed Column 2) --------------------------------

/* ID */  2  /* iType */  0  /* MSH */  20  /* idisp */  1
/* ICDSTA.cmp */  3  /* ICDSTA.msh */  10
/* ICDSTO.cmp */  0  /* ICDSTO.msh */  0
/* T   */  30.0
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（５／８）

```
/* rxh */  0.3  /* rxu6 */  10.0 /* rxpu4 */  5.0
/* ryh */  0.03 /* ryu6 */  20.0 /* rypu4 */  5.0

// Pulsed Column Data
/* ara */ 314.0   /* alp */ 0.23 /* amp */ 2.0 /* freq */ 60.0 /* h */ 5.0 /* d0 */ 0.2
/* phi1*/ 0.99    /* phi2*/ 0.5
/* sa1 */ 3.48e-3 /* sa2 */ 1.03e-2

/* BETAB */
9*0.0
/* BETAT */
9*0.0

// Aqueous initial concentration (mesh 1 - 20)
0.35  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.35  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.35  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

// Organic initial concentration (mesh 1 - 20)
0.03  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.03  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.03  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

/* VB [dm3] */  20  /* VT [dm3] */  40
/* DZ [cm]  */  18*39 // mesh 2 - 19

// (Component 3 = Pulsed Column 3) --------------------------------

/* ID */  3  /* iType */  0  /* MSH */  20  /* idisp */  1
/* ICDSTA.cmp */  0  /* ICDSTA.msh */  0
/* ICDSTO.cmp */  5  /* ICDSTO.msh */  1
/* T   */  30.0

/* rxh */  2.0  /* rxu6 */  3.0  /* rxpu4 */  10.0
/* ryh */  0.2  /* ryu6 */  20.0 /* rypu4 */  20.0

// Pulsed Column Data
/* ara */ 177.0   /* alp */ 0.25 /* amp */ 2.0 /* freq */ 60.0 /* h */ 5.0 /* d0 */ 0.2
/* phi1*/ 0.99    /* phi2*/ 0.5
/* sa1 */ 3.48e-3 /* sa2 */ 1.03e-2

/* BETAB */
9*0.0
/* BETAT */
9*0.0

// Aqueous initial concentration (mesh 1 - 20)
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

3.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
```

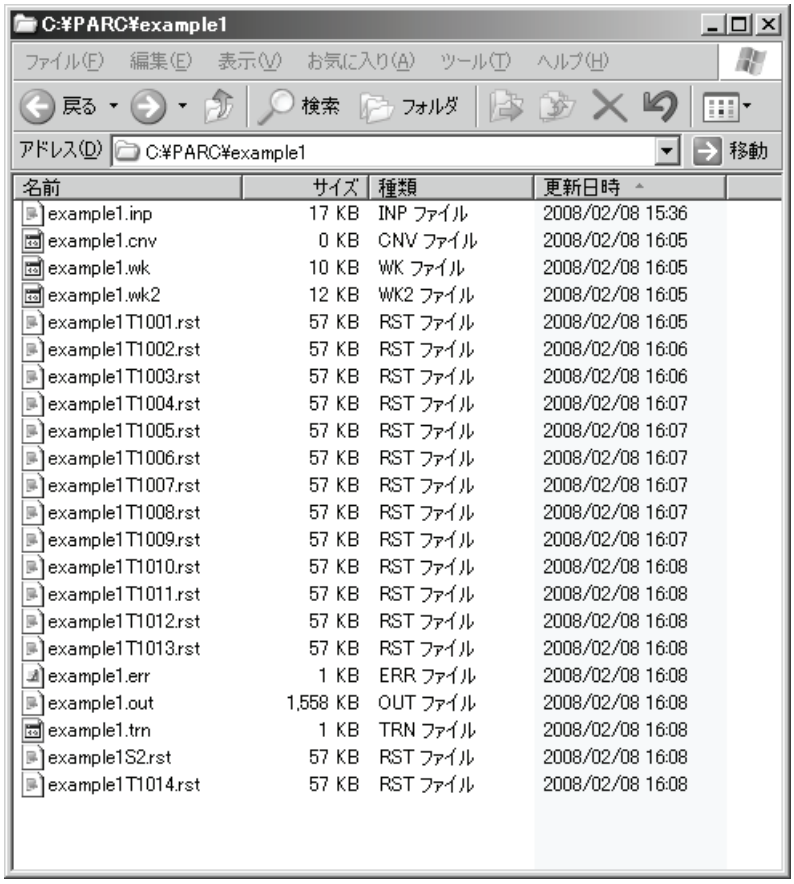
図１０．２　PARC 入力ファイルの例（６／８）

```
// Organic initial concentration (mesh 1 - 20)
0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.3  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

/* VB [dm3] */  20  /* VT [dm3] */  40
/* DZ [cm]  */  18*62 // mesh 2 - 19

// (Component 4 = Pulsed Column 4) --------------------------------

/* ID */  4  /* iType */  0  /* MSH */  20  /* idisp */  1
/* ICDSTA.cmp */  0  /* ICDSTA.msh */  0
/* ICDSTO.cmp */  5  /* ICDSTO.msh */  1
/* T   */  40.0
/* rxh */  0.2  /* rxu6 */  2.2   /* rxpu4 */  0.0
/* ryh */  0.02 /* ryu6 */  22.0  /* rypu4 */  0.0
// AtomStrct
//

// Pulsed Column Data
/* ara */ 177.0   /* alp */ 0.25 /* amp */ 2.0 /* freq */ 60.0 /* h */ 5.0 /* d0 */ 0.2
/* phi1*/ 0.99    /* phi2*/ 0.5
/* sa1 */ 3.48e-3 /* sa2 */ 1.03e-2

/* BETAB */
9*0.0
/* BETAT */
9*0.0

// Aqueous initial concentration (mesh 1 - 20)
0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

// Organic initial concentration (mesh 1 - 20)
0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

（省略）

0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

/* VB [dm3] */  20  /* VT [dm3] */  40
/* DZ [cm]  */  18*15.6 // mesh 2 - 19

// (Component 5 = Pulsed Column 5) --------------------------------

/* ID */  5  /* iType */  0  /* MSH */  30  /* idisp */  1
/* ICDSTA.cmp */  4  /* ICDSTA.msh */  20
/* ICDSTO.cmp */  0  /* ICDSTO.msh */  0
/* T   */  40.0
/* rxh */  0.5  /* rxu6 */  1.0  /* rxpu4 */  50.0
/* ryh */  0.05 /* ryu6 */  0.0  /* rypu4 */  0.0
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（７／８）

```
// Pulsed Column Data
/* ara */ 254.3   /* alp */ 0.25 /* amp */ 2.0 /* freq */ 60.0 /* h */ 5.0 /* d0 */ 0.2
/* phi1*/ 0.99    /* phi2*/ 0.5
/* sa1 */ 3.48e-3 /* sa2 */ 1.03e-2

/* BETAB */
9*0.0
/* BETAT */
9*0.0

// Aqueous initial concentration (mesh 1 - 30)
0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

 (省略)


0.2  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

// Organic initial concentration (mesh 1 - 30)
0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0
0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

 (省略)

0.0  0.0  0.0e-5  5*0.0    0.0

/* VB [dm3] */  20  /* VT [dm3] */  40
/* DZ [cm]  */  28*34.7 // mesh 2 - 29

end2.
```

図１０．２　PARC 入力ファイルの例（８／８）



名前	サイズ	種類	更新日時
example1.inp	17 KB	INP ファイル	2008/02/08 15:36
example1.cnv	0 KB	CNV ファイル	2008/02/08 16:05
example1.wk	10 KB	WK ファイル	2008/02/08 16:05
example1.wk2	12 KB	WK2 ファイル	2008/02/08 16:05
example1T1001.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:05
example1T1002.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:06
example1T1003.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:06
example1T1004.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1005.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1006.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1007.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1008.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1009.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:07
example1T1010.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08
example1T1011.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08
example1T1012.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08
example1T1013.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08
example1.err	1 KB	ERR ファイル	2008/02/08 16:08
example1.out	1,558 KB	OUT ファイル	2008/02/08 16:08
example1.trn	1 KB	TRN ファイル	2008/02/08 16:08
example1S2.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08
example1T1014.rst	57 KB	RST ファイル	2008/02/08 16:08

図１０．３　PARC 実行後のフォルダ内構成（例）

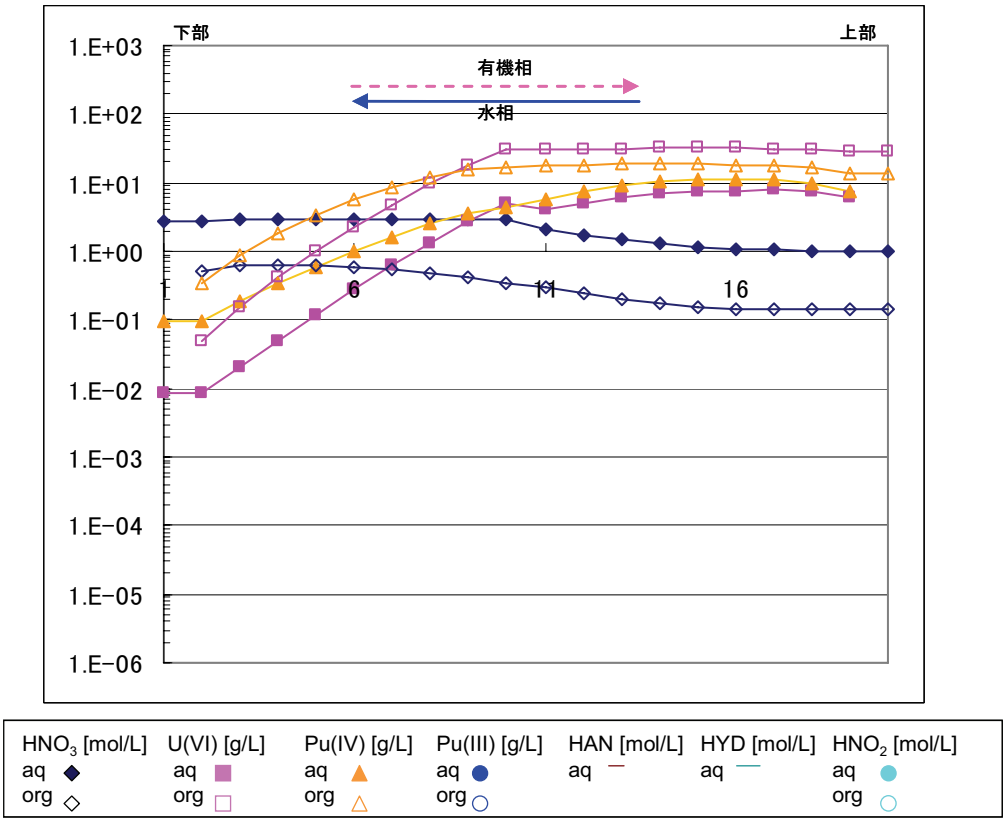


図１０．４－１　２Ａ塔の計算結果

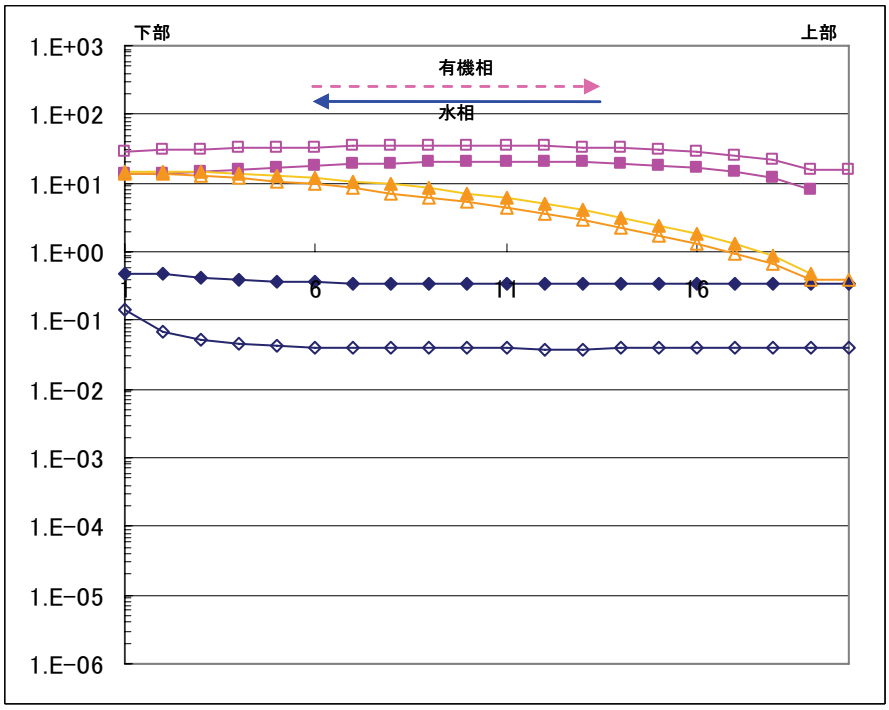


図１０．４－２　２Ｂ塔の計算結果

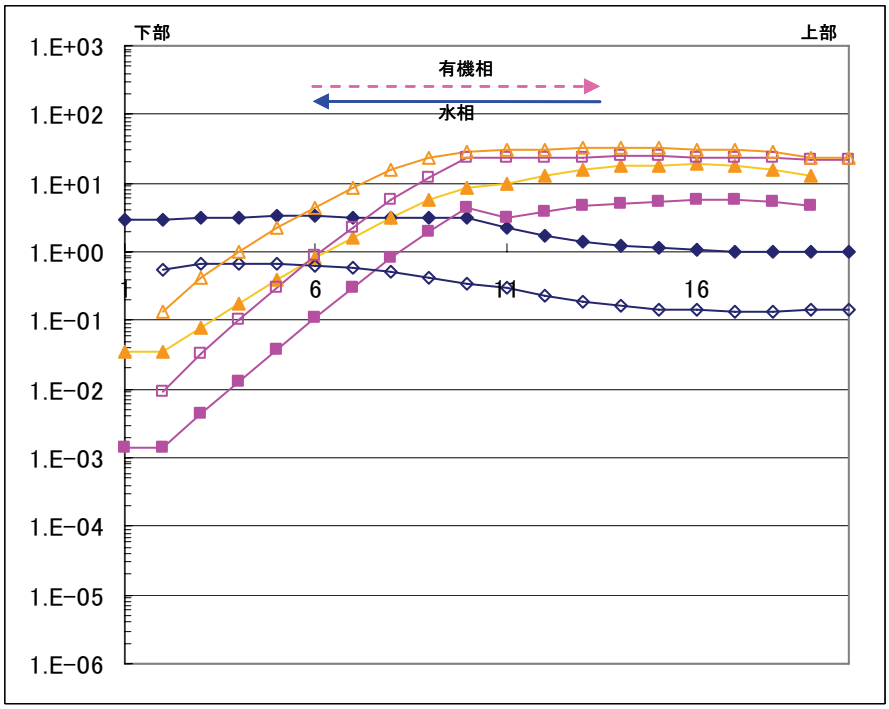


図１０．４－３　３Ａ塔の計算結果

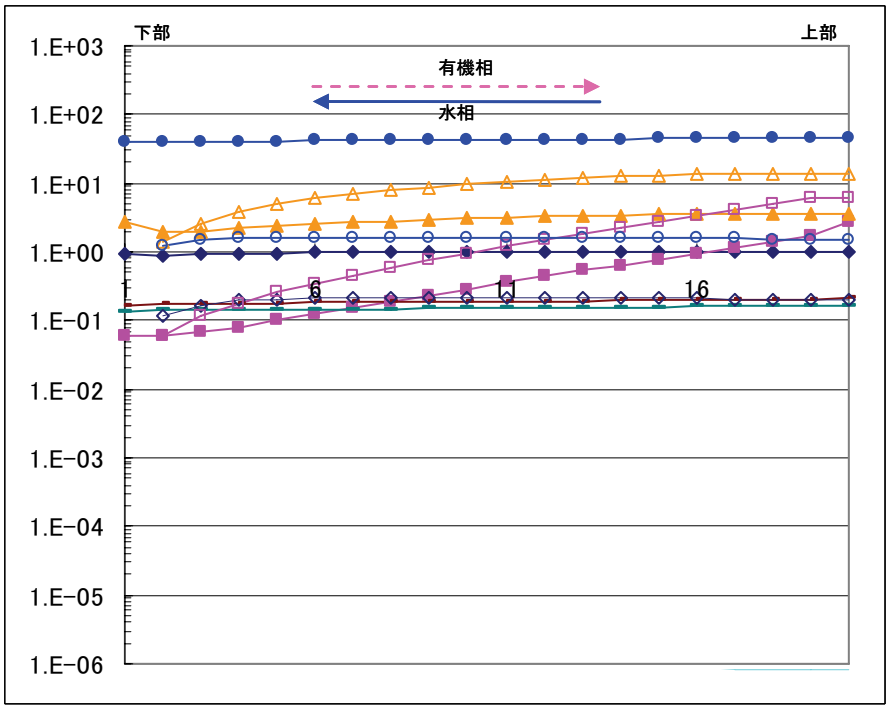


図１０．４－４　３Ｂ塔下部の計算結果

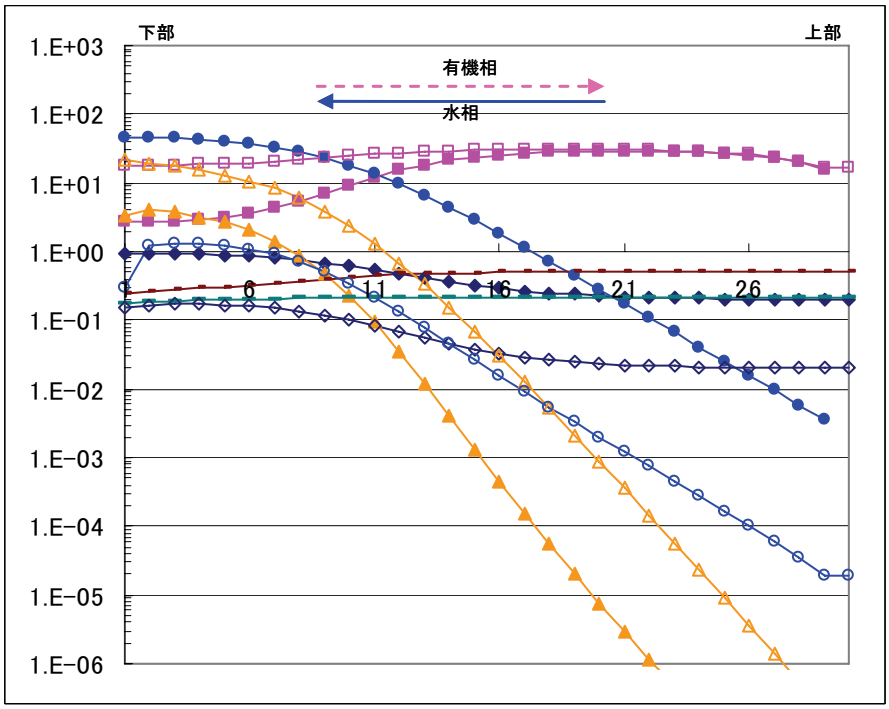


図１０．４－５　３Ｂ塔上部の計算結果

謝　　辞

本研究の実施および報告書の作成にあたり、安全研究センター　内山 軍藏氏、原子力基礎工学研究部門　後藤 実氏から多くの助言、情報を頂きました。また、コードの整備作業では、大崎 浩氏、松村 正和氏をはじめ、歴代の多くの方々の協力を頂きました。心より感謝いたします。

参考文献

1) T.Asakura, S.Hotoku, Y.Ban, M.Matsumura, Y.Morita : "Technetium Separation for Future Reprocessing", J. Nucl. Radiochem. Sci., 6, p.271 (2005).
2) G.L.Richardson, J.L.Swanson："Plutonium Partitioning in the Purex Process with Hydrazine-Stabilized Hyroxylamine Nitrate", HEDL-TME-75-31 (1975).
3) 辻野嘉宏："コンパイラ", 昭晃堂 (1996).　他
4) 久保田光一、伊理正夫："アルゴリズムの自動微分と応用 現代非線形科学シリーズ３", コロナ社 (1998).
5) B.W.Kernighan, D.M.Ritchie（著）、石田晴久（訳）："プログラミング言語 C 第 2 版", 共立出版 (1989).　他
6) A.Kumar, S.Hartland："Prediction of Drop Size in Pulsed Perforated-Plate Extraction Columns", Chem. Eng. Commun., 44, p.163 (1986).
7) A.Kumar, S.Hartland："Prediction of Continuous-Phase Axial Mixing Coefficients in Pulsed Perforated-Plate Extraction Columns", Ind. Eng. Chem. Res. Process., 28, p.1507 (1989).
8) A.Kumar, S.Hartland："Prediction of Dispersed Phase Holdup in Pulsed Perforated-Plate Extraction Columns", Chem. Eng. Process., 23, p.41 (1988).
9) M.Maeda, et al.："Simulation Code of Extraction Contactor for Analyzing Transient Behavior", Solvent Extraction in the Process Industries (Proc. of ISEC '93), Vol.3, Elsevier Applied Science, p.1517 (1993).
10) 藤根幸雄、前田充："パルスカラム工程解析コード SAFE", 第 8 回原子力におけるソフトウェア開発研究会報告集, JAERI-M 93-033, p.164 (1993).
11) 権田浩三、松田照夫："パルスカラムにおける Purex プロセス計算コード PULCO", PNC-TN 841-82-19 (1982).
12) G.Petrich：" Computer-Simulation of the PUREX Process ", Nukleare Entsorgung Band 2, Verlag Chemie, p.317 (1983).
13) 権田浩三、岡紘一郎、福田章二："Purex プロセス計算コード Revised MIXSET", PNC-TN841 -79-26 (1979).
14) 内藤大志、須藤俊幸、麻川和裕、柏木栄介："抽出計算コード（MIXSET-X）", JNC-TN8400 99-005 (1999).
15) 館盛勝一："EXTRA-M：再処理ピュレックス工程（ミキサーセトラ）解析用過渡計算コードシステム", JAERI 1331 (1994).

16) 化学工学協会編："改訂五版　化学工学便覧", 丸善, p.565 (1988).
17) Hanford Atomic Products Operation："Purex Technical Manual", HW-31000, Chapter 4-B (1955).
18) J.D.Moore, R.L.Walser, J.J.Fritch："Purex Technical Manual", RHO-MA-116 (1980).
19) 燃料サイクル安全工学部："再処理プロセス・化学ハンドブック", JAERI-Review 2001-038 (2001).
20) P.Biddle, H.A.C.McKay, J.H.Miles：" The Role of Nitrous Acid in the Reduction of Plutonium(IV) by Uranium(IV) in TBP Systems ", Solvent Extraction Chemistry of Metals, Macmillan, London (1965).
21) G.S.Barney, "A Kinetic Study of the Reaction of Plutonium(IV) with Hydroxylamine", J. Inorg. Nucl. Chem., 38, p.1677 (1976).
22) A.L.Slade, "Oxidation of Uranium(IV) by Oxygen and Nitrous Acid", DP-554 (1961).
23) H.A.C.McKay, R.J.W. Streeton, A.G.Wain："Mixer-settler Runs to Study Uranium(IV) as a Reductant in Uranium/Plutonium Separation", AERE-R 4381 (1963).
24) J.Halpern, J.G.Smith："Kinetics of the Oxidation of Uranium(IV) by Molecular Oxygen in Aqueous Perchloric Acid Solution", Can. J. Chem., 34, p.1419 (1956).
25) J.R.Perrot, G.Stedman, N.Uysal：" Kinetic and Product Study of the Reaction between Nitrous Acid and Hydrazine", J. Chem. Soc. Dalton Trans., p.2058 (1976).
26) G.S.Barney："The Reaction of Hydroxylamine with Nitrous Acid", ARH-SA-97 (1971).
27) J.Garraway, P.D.Wilson, "The Technetium-Catalysed Oxidation of Hydrazine by Nitric Acid", J. Less-Common Metals, 97, p.191 (1984).
28) P.D.Wilson, J.Garraway, "The Impact of Technetium on Reprocessing Chemistry", Proc. of Int. Meet. on Fuel Reprocessing and Waste Management, Jackson, Vol.1, p.467 (1984).
29) B.Guillaume, J.P.Moulin, Ch.Maurice："Chemical Properties of Neptunium Applied to Neptunium Management in Extraction Cycles of Purex Process", I. Chem. E. Symposium Series 88 (Proc. of Extraction '84, Dounreay), p.267 (1984).
30) D.Goulise："Oxydation du Neptunium(V) par les Solutions Aqueuses d'Acide Nitrique en Presence d'Acide Nitreux", J. Inorg. Nucl. Chem., 33, p.831 (1971).
31) J.P.Moulin："Cinetiques des Reactions d'Oxydo-Reduction du Neptunium en Solution Nitrique - Oxidation du Neptunium(IV) en Neptunium(V), Oxydation du Neptunium(V) en Neptunium(VI) par l'Acide Nitrique, Catalysees par l'Acide Nitreux", CEA-R-4912 (1978).
32) L.Salomon, E.L.Menchero, J.L.Manterola, G.Leynen："Etude sur la Recuperation du Neptunium dans le Cycle du Combustible et sur sa Purification", ETR-233 (1968).
33) 館盛勝一："REACT-Mod: U-Pu-Np-Tc-硝酸水溶液系化学反応の過渡計算モデル", JAERI-Data/Code 96-030 (1996).
34) 館盛勝一："アクチニド元素の硝酸水溶液系化学反応数値モデル：REACT", JAERI-M 90-018 (1990).
35) I.V.Shilin, T.A.Rumyantseva："Kinetics of the Reactions of Neptunium(V) - Uranium(IV) in Nitrate Solutions", Soviet Radiochem., 20, p.460 (1978).
36) 私信.

37) N.K.Shastri, E.S.Amis："Kinetics of the Reduction of Neptunium(V) with Uranium(IV) in Aqueous Perchlorate and Chloride Media", J. Inorg. Nucl. Chem., 27, p.2413 (1965).
38) V.S.Koltunov, M.F.Tikhonov：" Kinetics of the Reduction of Actinides by Hydroxylamine - I. Reduction of Neptunium(VI) in Nitric Acid Solution", Soviet Radiochem., 19, p.502 (1977).
39) V.S.Koltunov, M.F.Tikhonov：" Kinetics of Reduction of Neptunium by Hydrazine - II. Reduction of Np(VI) to Np(V) in Nitric Acid", Soviet Radiochem., 15, p.190 (1973).
40) V.S.Koltunov, V.I.Marchhenko, G.I.Zhuravleva, M.F.Tikhonov, M.P.Shapovalov：" Kinetics of the Reactions of Oxidation of Np(IV) by Pu(IV), Fe(III), and V(V) Ions and the Reduction of Np(V) by Hydrazine", Soviet Radiochem., 18, p.59 (1976).
41) R.B.Fulton and T.W.Newton："The Kinetics of the Oxidation pf Plutonium(III) by Neptunium(VI)", J. Phys. Chem., 74, p.1661 (1970).
42) V.S.Koltunov, et al.："New Investigations in the Field of the Kinetics and Mechanism of Reactions of Neptunium and Plutonium", Soviet Radiochem., 24, p.504 (1982).
43) H.Escure："Contribution a l'Etude de la Dismutation du Neptunium Pentavalent en Solution Acide", CEA-R-4574 (1974).
44) L.M.Frolova, G.A.Timofeev, A.G.Rykov：" Kinetics of the Reaction of Neptunium(IV) -Neptunium(VI) in Tributyul Phosphate", Soviet Radiochem., 14, p.127 (1972).
45) A.G.Rykov, G.N.Yakovlev："Investigations of the Oxidation-Reduction Reactions of the Actinide Elements II. Kinetics of the Reaction between Neptunium(IV) and Neptunium(VI) in Nitrate Solutions", Soviet Radiochem., 8, p.26 (1966).
46) G.Uchiyama, S.Hotoku, S.Fujine, M.Maeda："Reduction of Neptunium(VI) by Butyraldehyde Isomers in Nitric Acid Solution", Nucl. Technol., 122, p.222 (1998).
47) G.Uchiyama, S.Fujine, S.Hotoku and M.Maeda："New Separation Process for Neptunium, Plutonium, and Uranium Using Butyraldehydes as Reductants in Reprocessing", Nucl. Technol., 102, p.341 (1993).
48) T.W.Newton："The Kinetics of the Oxidation-Reduction Reactions of Uranium, Neptunium, Plutonium, and Americium in Aqueous Solutions", TID-26506 (1975).
49) L.Stieglitz and R.Becker："Chemical and Radiolytic Solvent Degradation in the Purex Process", Nukleare Entsorgung, Band 2 (Proc. of the Seminar "Reprocessing of Breeder Fuel"), Verlag Chemie, p.333 (1983).
50) G.L.Richardson, "The Effect of High Solvent Radiation Exposures on TBP Processing of Spent LMFBR Fuels", HEDL-TME 73-51 (1973).
51) 宝徳忍、木原武弘、内山軍蔵、藤根幸雄、前田充："亜硝酸の再処理溶液中での分配平衡", JAERI-M 93-095 (1993).
52) K.Alcock, F.C.Bedford, W.H.Hardwick, H.A.C.McKay："Tri-n-butyl Phosphate as an Extracting Solvent for Inorganic Nitrates - I Zirconium Nitrate", J. Inorg. Nucl. Chem., 4, p.100 (1957).
53) Hanford Atomic Products Operation："Purex Technical Manual", HW-31000, Chapter 4-C (1955).
54) Z.Kolarik and P.Dressler："Extraction and Coextraction of Tc(VII), Zr(IV), Np(IV,VI), Pa(V) and

Nb(V) with Tributyl Phosphate from Nitric Acid Solutions", Solv. Extra. and Ion Exch., 7, p.625 (1989).

55) G.Petrich："The 1981 Purex Distribution Data Index" , KfK-3080 (1981).

56) A.D.Kelmers and D.N.Browning："Hydrazoic Acid Distribution between TBP-Dodecane and Nitric Acid Solutions", Inorg. Nucl. Chem. Letters, 13, p.505 (1977).

57) G.Uchiyama, S.Hotoku, S.Fujine and M.Maeda："Distribution of n- and iso-Butyraldehydes Between Tri-n-Butyl Phosphate / n-Dodecane and Nitric Acid", Solv. Ext. and Ion Exch., 15, p.863 (1997).

58) A.Kumar, A.C.Deb, S.K.Mukerjee, V.N.Vaidya, D.D.Sood："Distribution of Pu(VI) from Nitric Acid to Tri-n-butyl Phosphate Saturated with Uranium(VI)", J. Radioanal. Nucl. Chem., 240, p.375 (1999).

59) C.J.Hardy and D.Scargill："Studies on Mono- and Di-n-Butylphosphoric Acids - II The Solubility and Distribution of Mono- and Di-n-butylphosphoric Acids in Aqueous-Organic Solvent Systems", J. Inorg. Nucl. Chem., 11, p.128 (1959).

60) 都倉信樹："オートマトンと形式言語", 昭晃堂 (1995). 他

61) 浦昭二："FORTRAN 77 入門　改訂版", 培風館 (1990). 他

62) M.Benedict, T.H.Pigford, H.W.Levi（著）、清瀬量平（訳）："燃料再処理と放射性廃棄物管理の化学工学", 日刊工業新聞社 (1983).

63) K.J.Schneider, et al.："Technology, Safety, and Costs of Decommissioning a Reference Nuclear Fuel Reprocessing Plant", NUREG-0278 (1977).

付録　エラーコード表

各サブルーチン関数のエラーコード、エラーコードの変数名、エラーの内容を下記の各欄に示す。エラー発生時に、拡張子が ".err" であるテキストファイルに出力される。

（１）SlvFlw (system.c)

100000	SLVFLW0	水相フィードの接続先が有機相タンクである。
100001	SLVFLW1	メッシュカウンタ icount の値が全メッシュ数 n を越えた。
100002	SLVFLW2	コンポーネントの水相出口の接続先が有機相タンクである。
100003	SLVFLW3	有機相フィードの接続先が水相タンクである。
100004	SLVFLW4	メッシュカウンタ icount の値が全メッシュ数 n を越えた。
100005	SLVFLW5	コンポーネントの有機相出口の接続先が水相タンクである。

（２）Systm (system.c)

101000	SYSTM0	一つのメッシュに入る水相流入数のカウンタ icount の値が、流入数の最大値 ns を越えた。
101001	SYSTM1	一つのメッシュに入る水相流入数のカウンタ icount の値が、流入数の最大値 ns を越えた。
101002	SYSTM2	一つのメッシュに入る有機相流入数のカウンタ icount の値が、流入数の最大値 ns を越えた。
101003	SYSTM3	一つのメッシュに入る有機相流入数のカウンタ icount の値が、流入数の最大値 ns を越えた。
101004	SYSTM4	nMemSiz で確保したメモリが不足している。
101005	SYSTM5	nMemSiz で確保したメモリが不足している。

（３）ChgNmr (chgnmr.c)

102000	CHGNMR0	水相フィードの注入先のコンポーネント ID に一致するコンポーネント ID が見つからない。
102001	CHGNMR1	有機相フィードの注入先のコンポーネント ID に一致するコンポーネント ID が見つからない。
102002	CHGNMR2	コンポーネントの水相出口の注入先のコンポーネント ID に一致するコンポーネント ID が見つからない。
102003	CHGNMR3	コンポーネントの有機相出口の注入先のコンポーネント ID に一致するコンポーネント ID が見つからない。

（４）prodm2m (matrixop.c)

103000	PRODM2M0	行列または部分行列のサイズが不法である。

（５）prod2mm (matrixop.c)

104000	PROD2MM0	行列または部分行列のサイズが不法である。

（６）DecomB (solverb.c)

105000	DECOMB0	ブロック三重対角のうち中央のブロックの逆行列を求めるときにエラーが発生した。
105002	DECOMB2	ブロック三重対角のうち中央のブロックの逆行列と右側のブロックの積を作るときにエラーが発生した。
105003	DECOMB3	ブロック三重対角のうち中央のブロックの逆行列と右側のブロックの積を右側のブロック配列にコピーするときにエラーが発生した。
105005	DECOMB5	ブロック三重対角のうち左側のブロックと右側のブロックの積を作るときにエラーが発生した。
105006	DECOMB6	ブロック三重対角のうち左側のブロックと右側のブロックの積を中央のブロックから引くときにエラーが発生した。
105007	DECOMB7	ブロック三重対角のうち中央のブロックの逆行列を求めるときにエラーが発生した。

（７）SolveB (solverb.c)

106000	SOLVEB0	LU 分解後のブロック三重対角のうち中央のブロックの逆行列と方程式の右辺の定数ベクトルの積を作るときにエラーが発生した。
106001	SOLVEB1	ワーク配列から方程式の右辺のベクトルの配列へ値をコピーするときにエラーが発生した。
106003	SOLVEB3	LU 分解後のブロック三重対角の左側のブロックと方程式の右辺のベクトルの積を作るときにエラーが発生した。
106004	SOLVEB4	方程式の右辺のベクトルからワーク配列（ベクトル）を引くときにエラーが発生した。
106005	SOLVEB5	LU 分解後のブロック三重対角のうち真ん中のブロックの逆行列と方程式の右辺のベクトルの積を作るときにエラーが発生した。
106006	SOLVEB6	ワークベクトルから方程式の右辺のベクトルに値をコピーするときにエラーが発生した。
106007	SOLVEB7	LU 分解後のブロック三重対角のうち右側のブロックと方程式の右辺のベクトルの積を作るときにエラーが発生した。
106008	SOLVEB8	方程式の右辺のベクトルから、LU 分解後のブロック三重対角の右側のブロックと方程式の右辺のベクトルの積を引くときにエラーが発生した。
106009	SOLVEB9	Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列のゼロクリアの際にエラーが

		発生した。
106010	SOLVEB10	LU 分解後のブロック三重対角の中央のブロックの逆行列を、Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列にコピーする際にエラーが発生した。
106011	SOLVEB11	LU 分解後のブロック三重対角の左側のブロックと、Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列の積を計算するときにエラーが発生した。
106012	SOLVEB12	LU 分解後のブロック三重対角の中央のブロックの逆行列とワーク配列の積を作るときにエラーが発生した。
106013	SOLVEB13	Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列の符号を変えるときにエラーが発生した。
106014	SOLVEB14	LU 分解後の三重対角の右側のブロックと、Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列（forward substitution の後の）との積を作るときにエラーが発生した。
106015	SOLVEB15	Capacitance matrix 法の E 行列の部分行列（forward substitution の後の）とワーク配列の差を作るときにエラーが発生した。
106016	SOLVEB16	方程式の右辺のベクトルにブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものに、さらに Capacitance matrix 法の R 行列を掛けたものの保存用のワーク配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
106017	SOLVEB17	方程式の右辺のベクトルにブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものに、Capacitance matrix 法の R 行列を掛けるときにエラーが発生した。（部分ベクトルと部分行列の積）
106018	SOLVEB18	方程式の右辺のベクトルにブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものと、Capacitance matrix 法の R 行列の積（部分ベクトルと部分行列の積）をワーク配列に加えるときにエラーが発生した。
106019	SOLVEB19	ブロック三重対角行列の逆行列と Capacitance matrix 法の E 行列の積に同法の R 行列を掛けたものを蓄えるワーク配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
106021	SOLVEV21	ブロック三重対角行列の逆行列と Capacitance matrix 法の E 行列の積に、同法の R 行列を掛けるときにエラーが発生した。（部分行列と部分行列の積）
106022	SOLVEB22	Capacitance matrix の LU 分解のときにエラーが発生した。
106023	SOLVEB23	方程式の右辺のベクトルにブロック三重対角行列の逆行列を掛け、さらに Capacitance matrix 法の R 行列を掛けたものに Capacitance matrix の逆行列を掛けるときにエラーが発生した。
106024	SOLVEB24	Capacitance matrix 法の E 行列にブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものを、Capacitance matrix 法の y ベクトルに掛けるときにエラーが発生した。（部分行列と部分ベクトルの積）

106025	SOLVEB25	方程式の右辺のベクトルにブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものから、Capacitance matrix 法の E 行列にブロック三重対角行列の逆行列を掛けたものと Capacitance matrix 法の y ベクトルの積を引くときにエラーが発生した。（部分ベクトルの差）

（８）MakPhi (makephi.c)

108000	MAKPHI0	パルスカラムでの分散相と連続相のホールドアップを計算する際にエラーが発生した。

（９）PhiP (makephi.c)

109000	PHIP0	分散相の指示子 idisp に異常な値が入っている。

（１０）MakeE (mekee.c)

110000	MAKEE0	パルスカラムの逆混合係数の計算の際にエラーが発生した。

（１１）DispCo (makee.c)

111000	DISPCO0	分散相の指示子 idisp に異常な値が入っている。

（１２）MakeSa (makesa.c)

112000	MAKESA0	パルスカラムでの二相の界面積を計算するときにエラーが発生した。
112001	MAKESA1	ミキサセトラでの二相の界面積を計算するときにエラーが発生した。

（１３）SaP (makesa.c)

113000	SAP0	分散相の指示子 idisp に異常な値が入っている。

（１４）SaM (makesa.c)

114000	SAM0	分散相の指示子 idisp に異常な値が入っている。

（１５）MakeCC (makecc.c)

115000	MAKECC0	パルスカラムの物質移動項と化学反応項以外の係数を求める際にエラーが発生した。
115001	MAKECC1	ミキサセトラの物質移動項と化学反応項以外の係数を求める際にエラーが発生した。
115002	MAKECC2	異常なコンポーネント型が現れた。

（１６）CcP (makecc.c)

116000	CCP0	ループ変数の値がメッシュ数で決まる範囲の外に出た。

116001	CCP1	メッシュの型を示す変数 icase が異常な値である。

（１７）CcM (makecc.c)

117000	CCM0	ループ変数の値がメッシュ数で決まる範囲の外に出た。
117001	CCM1	メッシュの型を示す変数 icase が異常な値である。

（１８）ReactZ (reactz.c)

121000	REACTZ0	水相の化学反応項用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121001	REACTZ1	有機相の化学反応項用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121002	REACTZ2	水相の化学反応項の微分係数用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121003	REACTZ3	有機相の化学反応項の微分係数用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121004	REACTZ4	水相の化学反応項と微分係数を求める際にエラーが発生した。（組込式）
121005	REACTZ5	有機相の化学反応項と微分係数を求める際にエラーが発生した。（組込式）
121006	REACTZ6	水相の化学反応項用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121007	REACTZ7	水相の化学反応項の微分係数用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121008	REACTZ8	水相の化学反応項と微分係数を求める際にエラーが発生した。（組込式）
121009	REACTZ9	水相の化学反応項の微分係数用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121010	REACTZ10	有機相の化学反応項の微分係数用の配列のゼロクリアの際にエラーが発生した。
121011	REACTZ11	有機相の化学反応項と微分係数を求める際にエラーが発生した。（組込式）
121012	REACTZ12	水相と有機相の組み合わせの型 iChem に異常な値が入っている。
121013	REACTZ13	インタプリタによる水相の化学反応項と微分係数の計算でエラーが発生した。
121014	REACTZ14	インタプリタによる有機相の化学反応項と微分係数の計算でエラーが発生した。
121015	REACTZ15	インタプリタによる水相の化学反応項と微分係数の計算でエラーが発生した。
121016	REACTZ16	インタプリタによる有機相の化学反応項と微分係数の計算でエラーが発生した。

（１９）MassTr (masstr.c)

124000	MASSTR0	分配比とその微分係数の計算でエラーが発生した。

（２０）MssTr2 (msstr.c)

125000	MSSTR20	分配比とその微分係数の計算でエラーが発生した。

（２１）Distri (masstr.c)

126000	DISTRI0	フリーTBP の 0 乗に対応する見かけの平衡定数の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126001	DISTRI1	フリーTBP の 1 乗に対応する見かけの平衡定数の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126002	DISTRI2	フリーTBP の 2 乗に対応する見かけの平衡定数の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126003	DISTRI3	フリーTBP の 3 乗に対応する見かけの平衡定数の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126004	DISTRI4	フリーTBP の 0 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126005	DISTRI5	フリーTBP の 1 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126006	DISTRI6	フリーTBP の 2 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126007	DISTRI7	フリーTBP の 3 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126008	DISTRI8	フリーTBP の 0 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126009	DISTRI9	フリーTBP の 1 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126010	DISTRI10	フリーTBP の 2 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126011	DISTRI11	フリーTBP の 3 乗に対応する見かけの平衡定数の硝酸根による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126012	DISTRI12	フリーTBP の 0 乗に対応する見かけの平衡定数の各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126013	DISTRI13	フリーTBP の 1 乗に対応する見かけの平衡定数の各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126014	DISTRI14	フリーTBP の 2 乗に対応する見かけの平衡定数の各化学種による 1 階微

		分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126015	DISTRI15	フリーTBP の 3 乗に対応する見かけの平衡定数の各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126016	DISTRI16	フリーTBP の濃度を求めるための 2 次方程式で、フリーTBP の 2 乗の係数になっている量の、各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126017	DISTRI17	フリーTBP の濃度を求めるための 2 次方程式で、フリーTBP の 1 乗の係数になっている量の、各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126018	DISTRI18	分配比の各化学種による 1 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126019	DISTRI19	フリーTBP の 0 乗に対応する見かけの平衡定数の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126020	DISTRI20	フリーTBP の 1 乗に対応する見かけの平衡定数の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126021	DISTRI21	フリーTBP の 2 乗に対応する見かけの平衡定数の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126022	DISTRI22	フリーTBP の 3 乗に対応する見かけの平衡定数の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126023	DISTRI23	フリーTBP の濃度を求めるための 2 次方程式で、フリーTBP の 2 乗の係数になっている量の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126024	DISTRI24	フリーTBP の濃度を求めるための 2 次方程式で、フリーTBP の 1 乗の係数になっている量の、各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126025	DISTRI25	分配比の各化学種による 2 階微分係数用の配列のゼロクリアでエラーが発生した。
126026	DISTRI26	見かけの平衡定数とそれの硝酸根による各種微分係数を計算する際にエラーが発生した。
126027	DISTRI27	一般的な表現の分配比とそれの各化学種による微分係数を計算する際にエラーが発生した。
126028	DISTRI28	インタプリタで、見かけの平衡定数とそれの硝酸根による各種微分係数を計算する際にエラーが発生した。
126029	DISTRI29	インタプリタで、一般的な表現の分配比とそれの各化学種による微分係数を計算する際にエラーが発生した。

（２２）JacobP (make.c)

127000	JACOBP0	ループ変数の値が 0 以上（メッシュ数）－1 以下という範囲外になった。
127001	JACOBP1	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127002	JACOBP2	物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127007	JACOBP7	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127008	JACOBP8	分相タンク用に物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127015	JACOBP15	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127016	JACOBP16	分相タンク用に物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
127023	JACOBP23	メッシュの種類（内部メッシュ、下部分相タンク、上部分相タンク）が異常である。

（２３）JacobM (make.c)

128000	JACOBM0	ループ変数の値が 0 以上（ステージ数）－1 以下という範囲外になった。
128001	JACOBM1	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128002	JACOBM2	物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128003	JACOBM3	水相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128004	JACOBM4	有機相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128011	JACOBM11	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128012	JACOBM12	物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128013	JACOBM13	水相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128014	JACOBM14	有機相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128021	JACOBM21	両相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128022	JACOBM22	物質移動項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128023	JACOBM23	水相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。

128024	JACOBM24	有機相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。
128031	JACOBM31	ステージの種類（内部ステージ、左端ステージ、右端ステージ）が異常である。

（２４）JacobA (make.c)

129000	JACOBA0	水相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。

（２５）JacobO (make.c)

130000	JACOBO0	有機相の化学反応項とその微分係数を計算するときにエラーが発生した。

（２６）Make (make.c)

131001	MAKE1	ヤコビアンのブロック三重対角のうち、左側のブロックのゼロクリアでエラーが発生した。
131002	MAKE2	ヤコビアンのブロック三重対角のうち、中央のブロックのゼロクリアでエラーが発生した。
131003	MAKE3	ヤコビアンのブロック三重対角のうち、右側のブロックのゼロクリアでエラーが発生した。
131004	MAKE4	Capacitance matrixs 法の R 行列のゼロクリアでエラーが発生した。
131005	MAKE5	パルスカラムのヤコビアンの計算でエラーが発生した。
131006	MAKE6	ミキサセトラのヤコビアンの計算でエラーが発生した。
131007	MAKE7	水相タンクのヤコビアンの計算でエラーが発生した。
131008	MAKE8	有機相タンクのヤコビアンの計算でエラーが発生した。
131009	MAKE9	コンポーネントの型（P、M、A、O）が異常である。

（２７）RdCard (tools.c)

132000	RDCARD0	バッファに改行以外の文字が（最大数）＋1 個現れた。
132001	RDCARD1	バッファ中のコメントを取り除く際、コメントの内部に改行記号が現れた。
132002	RDCARD2	バッファ中のコメントを取り除く際、コメントの内部に改行記号が現れた。
132003	RDCARD3	有限オートマトンで予期していなかった状態が現れた。
132004	RDCARD4	ファイルの最後に達しているべきなのに達していない。
132005	RDCARD5	入力ファイルとワークファイルの入出力でエラーが発生していた。

（２８）MssP (output.c)

133000	MSSP0	ループ変数の値が 0 以上（メッシュ数）－1 以下という範囲外になった。

（２９）MassBalance (output.c)

134000	MASSBALANCE0	パルスカラムのマスバランス出力データを作るときにエラーが発生した。
134001	MASSBALANCE1	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。

（３０）OutputX (output.c)

135000	OUTPUTX0	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。

（３１）OutputR (output.c)

136000	OUTPUTR0	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。
136001	OUTPUTR1	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。

（３２）DivPath (tools.c)

137000	DIVPATH0	ファイル名のうち拡張子とピリオドを除いた本体が存在しない。
137001	DIVPATH1	ファイル名のうち拡張子とピリオドを除いた本体が存在しない。

（３３）RelErr (output.c)

138000	RELERR0	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。
138001	RELERR1	コンポーネントの型（P、M、A、O）に予期しないものが現れた。

（３４）ReadChr (tools.c)

139000	READCHR0	バッファに文字列を読み込むことができない。
139001	READCHR1	バッファに文字列を読み込むことができない。
139002	READCHR2	入力データ中のデータ文字列の長さが、予期していたものより長い。

（３５）ReadDbl (tools.c)

140000	READDBL0	バッファに文字列を読み込むことができない。
140001	READDBL1	バッファに文字列を読み込むことができない。
140002	READDBL2	データ文字列を倍精度実数型に変換するときにエラーが発生した。

（３６）ReadInt (tools.c)

141000	READINT0	バッファに文字列を読み込むことができない。
141001	READINT1	バッファに文字列を読み込むことができない。

141002	READINT2	データ文字列を long 型に変換するときにエラーが発生した。

（３７）RdXf (main.c)

144000	RDXF0	濃度のフィードテーブルのうち、時間を読み込むときにエラーが発生した。
144001	RDXF1	濃度のフィードテーブルのうち、濃度部分を読み込むときにエラーが発生した。

（３８）RdFf (main.c)

145000	RDFF0	流量のフィードテーブルのうち、時間を読み込むときにエラーが発生した。
145001	RDFF1	流量のフィードテーブルのうち、流量部分を読み込むときにエラーが発生した。

（３９）RdDBet (main.c)

146000	RDDBET0	下部分相タンクの総括物質移動係数を読み込むときにエラーが発生した。
146001	RDDBET1	下部分相タンクの総括物質移動係数を読み込むときにエラーが発生した。
146002	RDDBET2	上部分相タンクの総括物質移動係数を読み込むときにエラーが発生した。
146003	RDDBET3	上部分相タンクの総括物質移動係数を読み込むときにエラーが発生した。

（４０）RdP (main.c)

147000	RDP0	リスタート計算のときに、パルスカラムの整数ダミーデータを読み込む際にエラーが発生した。
147001	RDP1	パルスカラムの水相濃度データを読み込むときにエラーが発生した。
147002	RDP2	パルスカラムの水相濃度データを読み込むときにエラーが発生した。
147003	RDP3	リスタート計算のときに、パルスカラムの整数ダミーデータを読み込む際にエラーが発生した。
147004	RDP4	リスタート計算のときに、パルスカラムの水相濃度データを読み込む際にエラーが発生した。
147005	RDP5	リスタート計算のときに、パルスカラムの整数ダミーデータを読み込む際にエラーが発生した。
147006	RDP6	パルスカラムの有機相濃度データを読み込むときにエラーが発生した。
147007	RDP7	パルスカラムの有機相濃度データを読み込むときにエラーが発生した。

147008	RDP8	リスタート計算のときに、パルスカラムの整数ダミーデータを読み込む際にエラーが発生した。
147009	RDP9	リスタート計算のときに、パルスカラムの有機相濃度データを読み込む際にエラーが発生した。
147010	RDP10	パルスカラムの下部分相タンクの体積を読み込むときにエラーが発生した。
147011	RDP11	パルスカラムの上部分相タンクの体積を読み込むときにエラーが発生した。
147012	RDP12	パルスカラムのメッシュ幅を読み込むときにエラーが発生した。
147013	RDP13	パルスカラムのメッシュ幅を読み込むときにエラーが発生した。

（４１）RdM (main.c)

148000	RDM0	リスタート計算のとき、水相ミキサの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148001	RDM1	ミキサの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148002	RDM2	ミキサの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148003	RDM3	リスタート計算のとき、水相ミキサの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148004	RDM4	リスタート計算のとき、ミキサの水相濃度の読み込みの際にエラーが発生した。
148005	RDM5	リスタート計算のとき、水相セトラの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148006	RDM6	セトラの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148007	RDM7	セトラの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148008	RDM8	リスタート計算のとき、水相セトラの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148009	RDM9	リスタート計算のとき、セトラの水相濃度の読み込みの際にエラーが発生した。
148010	RDM10	リスタート計算のとき、有機相ミキサの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148011	RDM11	ミキサの有機相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148012	RDM12	ミキサの有機相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148013	RDM13	リスタート計算のとき、有機相ミキサの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148014	RDM14	リスタート計算のとき、ミキサの有機相濃度の読み込みの際にエラーが発生した。
148015	RDM15	リスタート計算のとき、有機相セトラの整数ダミーデータの読み込みの際

		にエラーが発生した。
148016	RDM16	セトラの有機相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148017	RDM17	セトラの有機相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
148018	RDM18	リスタート計算のとき、有機相セトラの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
148019	RDM19	リスタート計算のとき、セトラの有機相濃度の読み込みの際にエラーが発生した。
148020	RDM20	ミキサの体積の読み込みの際にエラーが発生した。
148021	RDM21	ミキサの体積の読み込みの際にエラーが発生した。
148022	RDM22	セトラの体積の読み込みの際にエラーが発生した。
148023	RDM23	セトラの体積の読み込みの際にエラーが発生した。
148024	RDM24	ミキサセトラのリサイクル流量の読み込みの際にエラーが発生した。
148025	RDM25	ミキサセトラのリサイクル流量の読み込みの際にエラーが発生した。

（４２）RdA (main.c)

149000	RDA0	リスタート計算のとき、水相タンクの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
149001	RDA1	水相タンクの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
149002	RDA2	水相タンクの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
149003	RDA3	リスタート計算のとき、水相タンクの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
149004	RDA4	水相タンクの水相濃度を読み込むときにエラーが発生した。
149005	RDA5	水相タンクの体積を読み込むときにエラーが発生した。

（４３）RdO (main.c)

150000	RDO0	リスタート計算のとき、有機相タンクの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
150001	RDO1	有機相タンクの有機相濃度の読み込みでエラーが発生した。
150002	RDO2	有機相タンクの有機相濃度の読み込みでエラーが発生した。
150003	RDO3	リスタート計算のとき、有機相タンクの整数ダミーデータの読み込みの際にエラーが発生した。
150004	RDO4	リスタート計算のとき、有機相タンクの有機相濃度の読み込みの際にエラーが発生した。
150005	RDO5	有機相タンクの体積の読み込みでエラーが発生した。

（４４）invgj (solver.c)

152000	INVGJ0	行列のオーダーが 0 以下である。

152001	INVGJ1	1 次の行列のときに、行列が非正則である。
152002	INVGJ2	2 次以上の行列のときに、行列が非正則である。

（４５）decomp (solver.c)

153000	DECOMP0	行列のオーダーが 0 以下である。
153001	DECOMP1	行列が非正則である。

（４６）solve (solver.c)

154000	SOLVE0	行列のオーダーが 0 以下である。

（４７）prodmm (matrixop.c)

155000	PRODMM0	行列のオーダーが 0 以下のものがある。

（４８）movevv (matrixop.c)

156000	MOVEVV0	計算オプションに予期しないものが現れた。
156001	MOVEVV1	ベクトルのオーダーが 0 以下である。

（４９）addvv (matrixop.c)

157000	ADDVV0	計算オプションに予期しないものが現れた。
157001	ADDVV1	ベクトルのオーダーが 0 以下である。

（５０）clearv (matrixop.c)

158000	CLEARV0	ベクトルのオーダーが 0 以下である。

（５１）prodmd (matrixop.c)

159000	PRODMD0	行列のサイズに異常なものが現れた。

（５２）proddm (matrixop.c)

160000	PRODDM0	行列のサイズに異常なものが現れた。

（５３）prodsv (matrixop.c)

161000	PRODSV0	ベクトルのオーダーが 0 以下である。

（５４）ReactX14 (reactz.c)

162000	REACTX14_0	NPREAC の値に予期しないものが現れた。

（５５）DistriH (msstr.c)

163000	DISTRIH0	水素イオンが計算すべき化学種になっていない。

（５６）DistriU6 (masstr.c)

164000	DISTRIU6_0	ウラン(VI)が計算すべき化学種になっていない。

（５７）DistriPu4 (masstr.c)

165000	DISTRIPU4_0	プルトニウム(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（５８）DistriPu3 (masstr.c)

166000	DISTRIPU3_0	プルトニウム(III)が計算すべき化学種になっていない。

（５９）DistriU4 (masstr.c)

167000	DISTRIU4_0	ウラン(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（６０）DistriZr (masstr.c)

168000	DISTRIZR0	ジルコニウムが計算すべき化学種になっていない。

（６１）DistriNp4 (masstr.c)

169000	DISTRINP4_0	ネプツニウム(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（６２）DistriNp5 (masstr.c)

170000	DISTRINP5_0	ネプツニウム(V)が計算すべき化学種になっていない。

（６３）DistriNp6 (masstr.c)

171000	DISTRINP6_0	ネプツニウム(VI)が計算すべき化学種になっていない。

（６４）DistriHN3 (masstr.c)

172000	DISTRIHN3_0	アジ化水素が計算すべき化学種になっていない。

（６５）DistriIBAL (masstr.c)

173000	DISTRIIBAL0	iso-ブチルアルデヒドが計算すべき化学種になっていない。

（６６）DistriNBAL (masstr.c)

174000	DISTRINBAL0	n-ブチルアルデヒドが計算すべき化学種になっていない。

（６７）DistriIBAC (masstr.c)

175000	DISTRIIBAC0	iso-酪酸が計算すべき化学種になっていない。

（６８）DistriNBAC (masstr.c)

176000	DISTRINBAC0	n-酪酸が計算すべき化学種になっていない。

（６９）DistriI (masstr.c)

177000	DISTRII0	ヨウ素が計算すべき化学種になっていない。

（７０）DistriCs (masstr.c)

178000	DISTRICS_0	セシウムが計算すべき化学種になっていない。

（７１）DistriRu3 (masstr.c)

179000	DISTRIRU3_0	ルテニウムが計算すべき化学種になっていない。

（７２）DistriPu6 (masstr.c)

180000	DISTRIPU6_0	プルトニウム(VI)が計算すべき化学種になっていない。

（７３）DistriV4 (masstr.c)

181000	DISTRIV4_0	バナジウム(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（７４）DistriV5 (masstr.c)

182000	DISTRIV5_0	バナジウム(V)が計算すべき化学種になっていない。

（７５）DistriNO2 (masstr.c)

184000	DISTRINO2_0	水素イオンまたは亜硝酸が計算すべき化学種になっていない。

（７６）DistriTc_0 (masstr.c)

185000	DISTRITC_0_0	テクネチウムが計算すべき化学種になっていない。

（７７）DistriTc_U (masstr.c)

186000	DISTRITC_U_0	ウラン(VI)又はプルトニウム(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（７８）DistriTc_Pu (masstr.c)

187000	DISTRITC_PU_0	ウラン(VI)又はプルトニウム(IV)が計算すべき化学種になっていない。

（７９）DistriTc_Zr (masstr.c)

188000	DISTRITC_ZR_0	ジルコニウムが計算すべき化学種になっていない。

（８０）DistriTc (masstr.c)

189000	DISTRITC0	テクネチウムが計算すべき化学種になっていない。
189001	DISTRITC1	テクネチウムの分配比のうち、$D_{TC,0}$ を計算するときにエラーが発生した。
189002	DISTRITC2	テクネチウムの分配比のうち、$D_{TC,U}$ を計算するときにエラーが発生した。
189003	DISTRITC3	テクネチウムの分配比のうち、$D_{TC,PU}$ を計算するときにエラーが発生した。
189004	DISTRITC4	テクネチウムの分配比のうち、$D_{TC,ZR}$ を計算するときにエラーが発生した。

（８１）prod2sm (matrixop.c)

190000	PROD2SM0	行列のサイズに異常なものが現れた。

（８２）prodm2s (matrixop.c)

191000	PRODM2S0	行列のサイズに異常なものが現れた。

（８３）RdCard2 (tools.c)

192000	RDCARD2_0	"begin2" が見つからなかった。
192001	RDCARD2_1	タイトルカードが見つからなかった。
192002	RDCARD2_2	n*x を展開するときにエラーが発生した。
192003	RDCARD2_3	"end2" または "end2." が見つからないまま入力ファイル終端に達した。
192004	RDCARD2_4	ファイルを読みきったのに入力ファイル終端に達しない。
192005	RDCARD2_5	入出力に際しエラーが発生した。

（８４）ExpandNX (tools.c)

193000	EXPANDNX0	最初のトークンが STRING でない。
193001	EXPANDNX1	3 番目のトークンが STRING でない。
193002	EXPANDNX2	n*x の n が整数でない。
193003	EXPANDNX3	n*x の n が 0 以下の整数である。
193004	EXPANDNX4	2 番目のトークンに予期しないものが現れた。

（８５）PickUpConst (tools.c)

194000	PICKUPCONST0	入力行の読み込みがうまくいかない。

194001	PICKUPCONST1	新しい入力行の読み込みがうまくいかない。
194002	PICKUPCONST2	ネームリスト文のトークンの読み込みの際にエラーが発生した。
194003	PICKUPCONST3	ネームリスト文の記号名と数値の区切り文字として予期しないものが現れた。

（８６）GetKeyWord(tools.c)

195000	GETKEYWORD0	キーワードを探すための二分探索法が失敗した。

（８７）RdExpParam (main.c)

197000	RDEXPPARAM0	ネームリスト入力の変数名（キーワード）の探索でエラーが発生した。
197001	RDEXPPARAM1	キーワードの探索で異常なトークンが返された。
197002	RDEXPPARAM2	ネームリスト入力の "=" の探索でエラーが発生した。
197003	RDEXPPARAM3	トークンが "=" でなかった。
197004	RDEXPPARAM4	ネームリスト入力の数値の探索でエラーが発生した。
197005	RDEXPPARAM5	見つかったトークンが数値でなかった。
197006	RDEXPPARAM6	数値文字列を倍精度実数に変換するときにエラーが発生した。
197007	RDEXPPARAM7	数値文字列の後のトークンを探索するときにエラーが発生した。
197008	RDEXPPARAM8	見つかったトークンが予期しないものであった。

（８８）InterpretDistri1 (interpret_d1.c)

198000	INTERPRETDISTRI1_0	インタプリタ中間言語の条件部（Richardson 型分配比）の処理でエラーが発生した。
198001	INTERPRETDISTRI1_1	インタプリタ中間言語の実行プログラム部（Richardson 型分配比）の処理でエラーが発生した。

（８９）CondDistri1 (interpret_d1.c)

199000	CONDDISTRI1_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
199001	CONDDISTRI1_1	四つ組の演算子の中に予期しないものが現れた。

（９０）CaseDistri1 (interpret_d1.c)

200000	CASEDISTRI1_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
200001	CASEDISTRI1_1	演算子 B_MULRR_L の引数が 1 以外である。
200002	CASEDISTRI1_2	演算子 B_MULRR_R の引数が 1 以外である。
200003	CASEDISTRI1_3	演算子 B_MULRR_B の引数が 1 以外である。
200004	CASEDISTRI1_4	演算子 B_DIVRR_L の引数が 1 以外である。
200005	CASEDISTRI1_5	演算子 B_DIVRR_R の引数が 1 以外である。

200006	CASEDISTRI1_6	演算子 B_DIVRR_B の引数が 1 以外である。
200007	CASEDISTRI1_7	演算子 B_ABSR_L の引数が 1 以外である。
200008	CASEDISTRI1_8	演算子 B_EXPR_L の引数が 1 以外である。
200009	CASEDISTRI1_9	演算子 B_LOGR_L の引数が 1 以外である。
200010	CASEDISTRI1_10	演算子 B_LOG10R_L の引数が 1 以外である。
200011	CASEDISTRI1_11	演算子 B_POWRR_L の引数が 1 以外である。
200012	CASEDISTRI1_12	演算子 B_POWRR_R の引数が 1 以外である。
200013	CASEDISTRI1_13	演算子 B_POWRR_B の引数が 1 以外である。
200014	CASEDISTRI1_14	演算子 B_SQRTR_L の引数が 1 以外である。
200015	CASEDISTRI1_15	演算子 B_COSHR_L の引数が 1 以外である。
200016	CASEDISTRI1_16	演算子 B_SINHR_L の引数が 1 以外である。
200017	CASEDISTRI1_17	演算子 B_TANHRR_L の引数が 1 以外である。
200018	CASEDISTRI1_18	演算子 T_MULRR_L の引数が 3 以外である。
200019	CASEDISTRI1_19	演算子 T_MULRR_R の引数が 3 以外である。
200020	CASEDISTRI1_20	演算子 T_DIVRR_L の引数が 3 以外である。
200021	CASEDISTRI1_21	演算子 T_DIVRR_R の引数が 3 以外である。
200022	CASEDISTRI1_22	演算子 T_EXPR_L の引数が 3 以外である。
200023	CASEDISTRI1_23	演算子 T_LOGR_L の引数が 3 以外である。
200024	CASEDISTRI1_24	演算子 T_LOG10R_L の引数が 3 以外である。
200025	CASEDISTRI1_25	演算子 T_POWRR_L の引数が 3 以外である。
200026	CASEDISTRI1_26	演算子 T_POWRR_R の引数が 3 以外である。
200027	CASEDISTRI1_27	演算子 T_SQRTR_L の引数が 3 以外である。
200028	CASEDISTRI1_28	演算子 T_COSHR_L の引数が 3 以外である。
200029	CASEDISTRI1_29	演算子 T_SINHR_L の引数が 3 以外である。
200030	CASEDISTRI1_30	演算子 T_TANHR_L の引数が 3 以外である。
200031	CASEDISTRI1_31	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。
200032	CASEDISTRI1_32	出力値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。

（９１）InterpretDistri2 (interpret_d2.c)

201000	INTERPRETDISTRI2_0	インタプリタ中間言語の条件部（一般型の分配比）の処理でエラーが発生した。
201001	INTERPRETDISTRI2_1	インタプリタ中間言語の実行プログラム部（一般型の分配比）の処理でエラーが発生した。

（９２）CondDistri2 (interpret_d2.c)

202000	CONDDISTRI2_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
202001	CONDDISTRI2_1	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。

（９３）CaseDistri2 (interpret_d2.c)

203000	CASEDISTRI2_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
203001	CASEDISTRI2_1	演算子 B_MULRR_L の引数の数が 1 以外である。
203002	CASEDISTRI2_2	演算子 B_MULRR_R の引数の数が 1 以外である。
203003	CASEDISTRI2_3	演算子 B_MULRR_B の引数の数が 1 以外である。
203004	CASEDISTRI2_4	演算子 B_DIVRR_L の引数の数が 1 以外である。
203005	CASEDISTRI2_5	演算子 B_DIVRR_R の引数の数が 1 以外である。
203006	CASEDISTRI2_6	演算子 B_DIVRR_B の引数の数が 1 以外である。
203007	CASEDISTRI2_7	演算子 B_ABSR_L の引数の数が 1 以外である。
203008	CASEDISTRI2_8	演算子 B_EXPR_L の引数の数が 1 以外である。
203009	CASEDISTRI2_9	演算子 B_LOGR_L の引数の数が 1 以外である。
203010	CASEDISTRI2_10	演算子 B_LOG10R_L の引数の数が 1 以外である。
203011	CASEDISTRI2_11	演算子 B_POWRR_L の引数の数が 1 以外である。
203012	CASEDISTRI2_12	演算子 B_POWRR_R の引数の数が 1 以外である。
203013	CASEDISTRI2_13	演算子 B_POWRR_B の引数の数が 1 以外である。
203014	CASEDISTRI2_14	演算子 B_SQRTR_L の引数の数が 1 以外である。
203015	CASEDISTRI2_15	演算子 B_COSHR_L の引数の数が 1 以外である。
203016	CASEDISTRI2_16	演算子 B_SINHR_L の引数の数が 1 以外である。
203017	CASEDISTRI2_17	演算子 B_TANHR_L の引数の数が 1 以外である。
203018	CASEDISTRI2_18	演算子 B_TF の引数の数が 0 である。
203019	CASEDISTRI2_19	演算子 B_XNO3 の引数の数が 0 である。
203020	CASEDISTRI2_20	演算子 T_MULRR_L の引数の数が 3 以外である。
203021	CASEDISTRI2_21	演算子 T_MULRR_R の引数の数が 3 以外である。
203022	CASEDISTRI2_22	演算子 T_DIVRR_L の引数の数が 3 以外である。
203023	CASEDISTRI2_23	演算子 T_DIVRR_R の引数の数が 3 以外である。
203024	CASEDISTRI2_24	演算子 T_EXPR_L の引数の数が 3 以外である。
203025	CASEDISTRI2_25	演算子 T_LOGR_L の引数の数が 3 以外である。
203026	CASEDISTRI2_26	演算子 T_LOG10R_L の引数の数が 3 以外である。
203027	CASEDISTRI2_27	演算子 T_POWRR_L の引数の数が 3 以外である。
203028	CASEDISTRI2_28	演算子 T_POWRR_R の引数の数が 3 以外である。
203029	CASEDISTRI2_29	演算子 T_SQRTR_L の引数の数が 3 以外である。
203030	CASEDISTRI2_30	演算子 T_COSHR_L の引数の数が 3 以外である。
203031	CASEDISTRI2_31	演算子 T_SINHR_L の引数の数が 3 以外である。
203032	CASEDISTRI2_32	演算子 T_TANHR_L の引数の数が 3 以外である。
203033	CASEDISTRI2_33	演算子 T_TF の引数の数が 0 である。
203034	CASEDISTRI2_34	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。

203035	CASEDISTRI2_35	出力値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。

（９４）InterpretReactX (interpret_rx.c)

204000	INTERPRETREACTX_0	インタプリタ中間言語の条件部（水相の化学反応）の処理でエラーが発生した。
204001	INTERPRETREACTX_1	インタプリタ中間言語の実行プログラム部（水相の化学反応）の処理でエラーが発生した。

（９５）CondReactX (interpret_rx.c)

205000	CONDREACTX_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
205001	CONDREACTX_1	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。

（９６）CaseReactX (interpret_rx.c)

206000	CASEREACTX_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
206001	CASEREACTX_1	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。
206002	CASEREACTX_2	Damping factor g にも化学反応速度式にも現れない化学種が現れた。
206003	CASEREACTX_3	出力値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。

（９７）InterpretRactY (interpret_ry.c)

207000	INTERPRETREACTY_0	インタプリタ中間言語の条件部（有機相の化学反応）の処理でエラーが発生した。
207001	INTERPRETREACTY_1	インタプリタ中間言語の実行プログラム部（有機相の化学反応）の処理でエラーが発生した。

（９８）CondReactY (interpret_ry.c)

208000	CONDREACTY_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
208001	CONDREACTY_1	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。

（９９）CaseReactY (interpret_ry.c)

209000	CASEREACTY_0	初期値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。
209001	CASEREACTY_1	四つ組内の演算子として予期しないものが現れた。
209002	CASEREACTY_2	Damping factor g にも化学反応速度式にも現れない化学種が現れた。
209003	CASEREACTY_3	出力値配列の仮引数の位置の中に予期しないものが現れた。

（１００）DistriDBP (masstr.c)

210000	DISTRIDBP_0	水素イオンまたは DBP が計算すべき化学種になってない。

（１０１）DistriMBP (masstr.c)

211000	DISTRIMBP_0	DBP または MBP が計算すべき化学種になっていない。

（１０２）DistriPO4 (masstr.c)

212000	DISTRIPO4_0	リン酸が計算すべき化学種になっていない。

（１０３）DistriFP (masstr.c)

213000	DISTRIFP_0	核分裂生成物（FP）が計算すべき化学種になっていない。

（１０４）DistriH2O2 (masstr.c)

214000	DISTRIH2O2_0	過酸化水素が計算すべき化学種になっていない

This is a blank page.

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m^2
体積	立法メートル	m^3
速さ，速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s^2
波数	毎メートル	m-1
密度（質量密度）	キログラム毎立法メートル	kg/m^3
質量体積（比体積）	立法メートル毎キログラム	m^3/kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m^2
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
（物質量の）濃度	モル毎立方メートル	mol/m^3
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m^2
屈折率	（数の） 1	1

表５．SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10^{24}	ヨタ	Y	10^{-1}	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10^{-2}	センチ	c
10^{18}	エクサ	E	10^{-3}	ミリ	m
10^{15}	ペタ	P	10^{-6}	マイクロ	μ
10^{12}	テラ	T	10^{-9}	ナノ	n
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	p
10^{6}	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f
10^{3}	キロ	k	10^{-18}	アト	a
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z
10^{1}	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	y

表３．固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン[(a)]	rad		$m \cdot m^{-1}=1$[(b)]
立体角	ステラジアン[(a)]	sr[(c)]		$m^2 \cdot m^{-2}=1$[(b)]
周波数	ヘルツ	Hz		s^{-1}
力	ニュートン	N		$m \cdot kg \cdot s^{-2}$
圧力，応力	パスカル	Pa	N/m^2	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
エネルギー，仕事，熱量	ジュール	J	N・m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
工率，放射束	ワット	W	J/s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
電荷，電気量	クーロン	C		s・A
電位差（電圧），起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-2}$
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^3 \cdot A^2$
磁束	ウエーバ	Wb	V・s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
磁束密度	テスラ	T	Wb/m^2	$kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-2}$
セルシウス温度	セルシウス度[(d)]	℃		K
光束	ルーメン	lm	cd・sr[(c)]	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot cd=cd$
照度	ルクス	lx	lm/m^2	$m^2 \cdot m^{-4} \cdot cd=m^{-2} \cdot cd$
（放射性核種の）放射能	ベクレル	Bq		s^{-1}
吸収線量，質量エネルギー分与，カーマ	グレイ	Gy	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$
線量当量，周辺線量当量，方向性線量当量，個人線量当量，組織線量当	シーベルト	Sv	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$

(a)ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときのいくつかの用例は表４に示されている。
(b)実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号“１”は明示されない。
(c)測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
(d)この単位は、例としてミリセルシウス度m℃のようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表６．国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	°	1° =(π/180) rad
分	’	1’ =(1/60)° =(π/10800) rad
秒	”	1” =(1/60)’ =(π/648000) rad
リットル	l、L	1l=1 $dm^3=10^{-3}m^3$
トン	t	1t=10^3 kg
ネーパ	Np	1Np=1
ベル	B	1B=(1/2)ln10(Np)

表７．国際単位系と併用されこれに属さない単位でSI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	1eV=1.60217733(49)×10^{-19}J
統一原子質量単位	u	1u=1.6605402(10)×10^{-27}kg
天文単位	ua	1ua=1.49597870691(30)×10^{11}m

表８．国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里		1海里=1852m
ノット		1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1 a=1 $dam^2=10^2m^2$
ヘクタール	ha	1 ha=1 $hm^2=10^4m^2$
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=1000hPa=10^5Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=10^{-10}m
バーン	b	1 b=100$fm^2=10^{-28}m^2$

表４．単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘度	パスカル秒	Pa・s	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-1}$
力のモーメント	ニュートンメートル	N・m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	$kg \cdot s^{-2}$
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}=s^{-1}$
角加速度	ラジアン毎平方秒	rad/s^2	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}=s^{-2}$
熱流密度，放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	$kg \cdot s^{-3}$
熱容量，エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
質量熱容量（比熱容量），質量エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg・K)	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
質量エネルギー（比エネルギー）	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot K^{-1}$
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m^3	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	$m \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
体積電荷	クーロン毎立方メートル	C/m^3	$m^{-3} \cdot s \cdot A$
電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	$m^{-2} \cdot s \cdot A$
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	$m \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-2}$
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot mol^{-1}$
モルエントロピー，モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$
照射線量（X線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	$kg^{-1} \cdot s \cdot A$
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^2 \cdot s^{-3}$
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3}=m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 \cdot sr)$	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3}=kg \cdot s^{-3}$

表９．固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	1 erg=10^{-7} J
ダイン	dyn	1 dyn=10^{-5}N
ポアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm^2=0.1Pa・s
ストークス	St	1 St =$1cm^2/s=10^{-4}m^2/s$
ガウス	G	1 G ≙10^{-4}T
エルステッド	Oe	1 Oe ≙(1000/4π)A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx ≙10^{-8}Wb
スチルブ	sb	1 sb =$1cd/cm^2=10^4cd/m^2$
ホト	ph	1 ph=10^4lx
ガル	Gal	1 Gal =$1cm/s^2=10^{-2}m/s^2$

表10．国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10^{10}Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10^{-4}C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10^{-2}Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10^{-2}Sv
X線単位		1X unit=1.002×10^{-4}nm
ガンマ	γ	1γ=1 nT=10^{-9}T
ジャンスキー	Jy	1 Jy=$10^{-26}W \cdot m^{-2} \cdot Hz^{-1}$
フェルミ		1 fermi=1 fm=10^{-15}m
メートル系カラット		1 metric carat = 200 mg = 2×10^{-4}kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリー	cal	
ミクロン	μ	1 μ =1μm=10^{-6}m

（第７版，1998年改訂）

この印刷物は再生紙を使用しています