



JAEA-Data/Code

2021-008

DOI:10.11484/jaea-data-code-2021-008

JAEA-Data/Code

## SCHERN-V2：再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故での 化学的挙動解析プログラム解説書

SCHERN-V2: Technical Guide of Computer Program for Chemical Behavior  
in Accident of Evaporation to Dryness by Boiling of Reprocessed High Level Liquid Waste  
in Fuel Reprocessing Facilities

吉田 一雄 玉置 等史 桧山 美奈

Kazuo YOSHIDA, Hitoshi TAMAKI and Mina HIYAMA

安全研究・防災支援部門

安全研究センター

原子炉安全研究ディビジョン

Reactor Safety Research Division

Nuclear Safety Research Center

Sector of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness

August 2021

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発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。本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。本レポートの成果（データを含む）に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の条件で利用してください。（<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>）  
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト（<https://www.jaea.go.jp>）より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課  
〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 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.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>).

Even if the results of this report (include data) are not copyrighted, they must be used under the same terms and conditions as CC-BY.

For inquiries regarding this report, please contact Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department, Japan Atomic Energy Agency.

2-4 Shirakata, 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

SCHERN-V2 :  
再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故での  
化学的挙動解析プログラム解説書

日本原子力研究開発機構 安全研究・防災支援部門 安全研究センター  
原子炉安全研究ディビジョン

吉田 一雄、玉置 等史、桧山 美奈\*

(2021年5月20日受理)

再処理施設で想定される重大事故の一つに高レベル廃液貯槽の蒸発乾固事故がある。高レベル廃液には、再処理の過程で取り除かれた核分裂生成物の硝酸塩が含まれ、それらの崩壊熱で発熱するため常時冷却する必要がある。このため全電源の喪失などにより冷却機能が全喪失した状態が継続した場合、廃液が沸騰しいずれ乾固する。この間、ルテニウムの揮発性化学種が硝酸-水混合蒸気とともに気相へ移行し、施設外へ放出される可能性がある。乾固時には、廃液に含まれる硝酸塩の熱分解による脱硝反応が進行し  $\text{NO}_x$  ガスが発生する。 $\text{NO}_x$  はルテニウムの施設内での移行挙動に影響することが実験的に確認されており、硝酸及び水が共存する環境では気液各相で複雑に化学変化することが知られている。そこで建屋区画内での熱流動条件を境界条件として Ru を含む各化学種の濃度変化を解析する計算プログラム：SCHERN の開発を進めている。本報は、SCHERN-V2 として新たに整備した解析モデルを含め、当該プログラムが解析対象とする事故の概要、解析モデル、連立微分方程式、使い方等を説明する解説書である。

SCHERN-V2: Technical Guide of Computer Program for Chemical Behavior  
in Accident of Evaporation to Dryness by Boiling of Reprocessed High Level Liquid Waste  
in Fuel Reprocessing Facilities

Kazuo YOSHIDA, Hitoshi TAMAKI and Mina HIYAMA\*

Reactor Safety Research Division  
Nuclear Safety Research Center  
Sector of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness  
Japan Atomic Energy Agency  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received May 20, 2021)

An accident of evaporation to dryness by boiling of high level liquid waste (HLLW) is postulated as one of the severe accidents caused by the loss of cooling function at a fuel reprocessing plant. In this case, volatile radioactive materials, such as ruthenium (Ru) are released from the tanks with water and nitric-acid mixed vapor into atmosphere. In addition to this, nitrogen oxides (NO<sub>x</sub>) are also released formed by the thermal decomposition of metal nitrates of fission products (FP) in HLLW. It has been observed experimentally that NO<sub>x</sub> affects to the migration behavior of Ru at the anticipated atmosphere condition in cells and/or compartments of the facility building. Chemical reactions of NO<sub>x</sub> with water and nitric acid are also recognized as the complex phenomena to undergo simultaneously in the vapor and liquid phases. The analysis program, SCHERN has been under developed to simulate chemical behavior including Ru coupled with the thermo-hydraulic condition in the flow paths in the facility building. This technical guide for SCHERN-V2 presents the overview of covered accident, analytical models including newly developed models, differential equations for numerical solution, and user instructions.

Keywords: SCHERN, Reprocessing Plant, High Level Liquid Waste, Accident of Evaporation to Dryness by Boiling, Ruthenium, Nitrogen Oxide, Thermal Decomposition, Chemical Reaction, Thermal-hydraulic Behavior

---

\* Frontier System Inc.

目次

1. はじめに	1
2. 解析対象とする事故	2
2.1 事故の概要	2
2.2 想定される事象の進展	2
3. 物理、化学的挙動の解析モデル	4
3.1 化学反応のモデル化	4
3.2 各化学種の生成速度の定式化	5
3.3 気液間の移行のモデル化	6
3.4 Ru の気液間移行のモデル化	9
4. 熱流動解析との連携	10
4.1 蒸気の流れに伴う気相部の濃度変化	10
4.2 ミスト流に伴う液相部の濃度変化	10
4.3 気液間の移動に伴う気液各相の濃度変化	10
5. 連立1次微分方程式	12
5.1 気相部の微分方程式群	12
5.2 液相部の微分方程式群	13
5.3 境界条件	14
5.4 Ru の移行に係る微分方程式	15
6. SCHERN のプログラム構造	16
6.1 DVODE の入手	16
6.2 SCHERN での処理の流れ	16
7. 計算の実行	19
7.1 SCHERN の実行手順	19
7.2 入力変数の説明	20
7.3 計算結果の表示	25
8. まとめ	30
参考文献	30
付録	32

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Objective accident .....	2
2.1 Overview of accident .....	2
2.2 Anticipated accident scenario .....	2
3. Analytical model of physical and chemical behaviors .....	4
3.1 Modeling of chemical reactions .....	4
3.2 Formulations of gelation rate of each chemical element .....	5
3.3 Modeling of transfer between vapor and liquid phase .....	6
3.4 Modeling of Ru transfer from vapor to liquid phase .....	9
4. Coupling with thermal-hydraulic behavior analysis .....	10
4.1 Concentration change in vapor phase with vapor flow in vapor phase .....	10
4.2 Concentration change in liquid phase with mist flow in liquid phase .....	10
4.3 Concentration change with crossing between vapor and liquid phases .....	10
5. System of first-order differential equations .....	12
5.1 Differential equations in vapor phase .....	12
5.2 Differential equations in liquid phase .....	13
5.3 Boundary conditions .....	14
5.4 Differential equations of Ru migration .....	15
6. Program structure of SCHERN .....	16
6.1 Implementation of DVODE .....	16
6.2 Process flow in SCHERN .....	16
7. Execution of simulation .....	19
7.1 Executive procedure of SCHERN .....	19
7.2 Descriptions of input .....	20
7.3 Display of simulation results .....	25
8. Summary .....	30
References .....	30
Appendix .....	32

## 1. はじめに

再処理施設で想定される事故のリスクを評価する上では、施設外へ移行する放射性物質の量を精度良く評価することが重要である。このためには、気相中に移行した放射性物質の挙動を評価することが不可欠である。例えば、「再処理施設の位置、構造及び設備の基準に関する規則」（原子力規制委員会、2013年11月27日）において重大事故の一つと位置づけられている高レベル廃液貯槽の冷却機能喪失に起因する「蒸発乾固事故」では、放射性物質（硝酸塩として廃液中に溶解している核分裂生成物（Fission Products：FP）を含む大量の硝酸及び水の混合蒸気が発生する。沸騰が継続し廃液が乾固するとFPの硝酸塩の熱分解に伴う脱硝反応により $\text{NO}_x$ ガスが発生する。これらの気体は通常の廃ガス処理系を経由しないでセル等に流出し、セルあるいは建屋排気系を経由して施設外へ移行するシナリオが想定される<sup>1)</sup>。セル等の施設内の区画に流出した混合蒸気は、区画内の壁面あるいは構造物表面で凝縮し、硝酸を含む凝縮水として停留する。 $\text{NO}_x$ を含む硝酸－水混合蒸気及び凝縮水中では、化学反応により硝酸、亜硝酸を含む多様な窒素化合物が生成される。

高レベル廃液貯槽の蒸発乾固事故において、周辺公衆への被ばく影響で重要な化学種の一つとしてルテニウム（Ru）がある。Ruは事故の進展に伴い揮発性化学種である $\text{RuO}_4$ に変化する<sup>2)</sup>。 $\text{RuO}_4$ は混合蒸気あるいは $\text{NO}_x$ とともに貯槽から流出するが、施設内を移動する混合蒸気の凝縮に合わせて凝縮水に移行すること、さらに凝縮水中の亜硝酸（ $\text{HNO}_2$ ）がRuの凝縮水への移行を促進することが実験で確認されている<sup>3)</sup>。このことから当該事故での被ばく評価の精度向上には、施設内での混合蒸気の熱流動それに伴う硝酸、 $\text{NO}_x$ などの化学挙動解析に基づくRuの移行挙動の解析が不可欠である。

このような物理・化学的な複合現象は、実験室規模での実験的な方法により確認可能<sup>4)</sup>であるが、経時的な変化を連続的に測定することは計測系の構築を必要とする。また実施規模での経時的な変化の実験的な再現は困難である。このようなケースでは解析コードを用いた熱流動解析及び化学反応のシミュレーションにより解析的に解明する方法が有効な手段である。

日本原子力研究開発機構では、再処理施設の高レベル廃液の蒸発乾固事故に特化して、硝酸－水混合蒸気、その凝縮水及び $\text{NO}_x$ が存在する気相及び液相で構成される系において想定される化学反応を伴う多様な化学種の濃度変化を、化学反応速度を考慮した連立一次微分方程式の数値解を求める計算プログラム：SCHERN（Simulation of Chemical Reaction of Nitroxide）を作成した。すでに、使用マニュアルとしてJAEA-Data/Code 2019-006、「SCHERN：再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故での $\text{NO}_x$ の化学的挙動解析プログラム」<sup>5)</sup>を刊行している。本報では、その後のプログラムの改良を含めたSCHERN-V2として、解析モデルの概要、熱流動解析から得られる入力データとしての境界条件、出力情報などについて解説している。

## 2. 解析対象とする事故

### 2.1 事故の概要

再処理施設の機器には、放射性物質の崩壊熱により内包する溶液の温度が沸点まで上昇するものがある。このような機器の沸騰を防止するために、例えば六ヶ所再処理施設では、信頼度の高い独立2系統の安全冷却水システムを設置し、維持管理している<sup>6),7)</sup>。また、このような対策にもかかわらず、冷却機能が全喪失した場合でも沸騰までに時間余裕があり、種々の対策を施すことで沸騰を防止できる。敢えてこれらの対策を考慮せず、冷却機能が全喪失した状態が継続すると仮定すれば、溶液が沸騰しいずれ乾固する。乾固時には、含有硝酸塩の脱硝反応が進行し $\text{NO}_x$ ガスが発生し始めると考えられる。溶液の沸騰および脱硝反応に伴い発生する気体（蒸気あるいはガス）とともに貯槽から放出される放射性物質は、貯槽の圧力上昇を防止する目的で設置される廃ガスシールポットから廃ガス処理セル内に流出することとなる<sup>1)</sup>。セルに流出した放射性物質を含む気体は、セル排気系から排気筒放出されるかまたはセルから建屋内へ逆流し建屋排気系から排気筒放出される。事故時の蒸気等の流れを図2.1に示す。

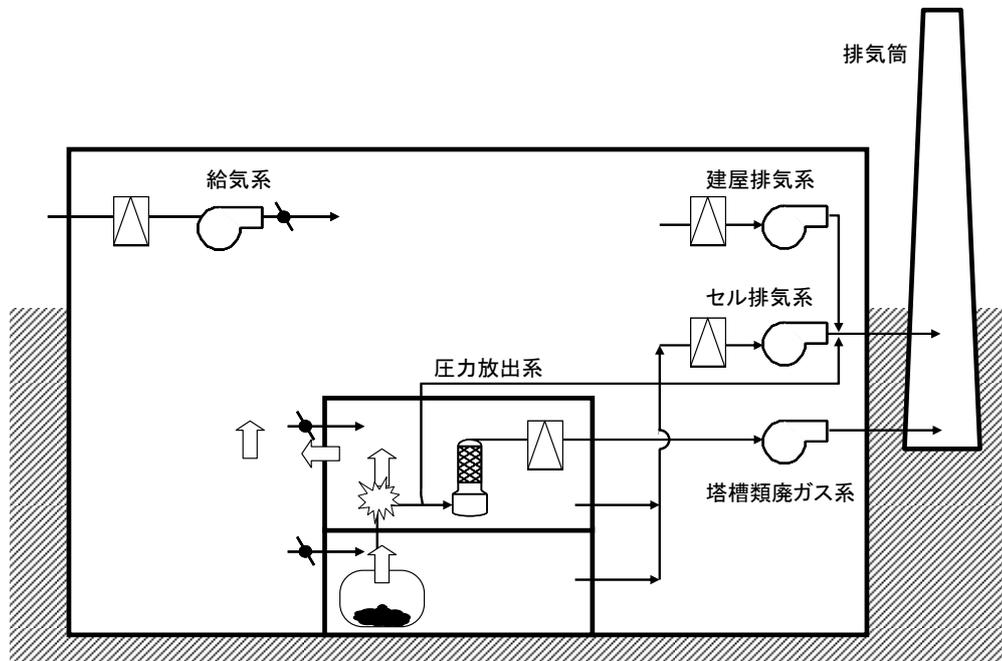


図 2.1 想定される放射性物質の移行経路（参考文献 1)より転載）

### 2.2 想定される事象の進展

図 2.2 には、文献 8)で示された当該事象での貯槽およびセル内の温度挙動に関する解析結果および文献 9)の実液を用いた実験結果をもとに推定した廃液の温度挙動の概要を示す。図 2.2 に示すように温度挙動は、沸騰初期、沸騰晩期および乾固段階に分けられる。廃液の温度上昇が急激になること、 $\text{Ru}$  の気化が急激になり始めることの2つの現象進展の特徴から、本報では沸騰初期と晩期の境界は廃液温度：120°Cとする。

文献 8) の解析では、廃液の発熱を 5W/L と仮定した場合、冷却機能が喪失して約 16 時間で沸騰が始まるとしている。沸騰が始まると溶液成分が蒸発し廃液が徐々に濃縮され、それにつれて溶液温度は徐々に上昇し約 120°Cに至る。この期間では、廃液の沸騰で発生した気泡の破裂で生

じる飛沫が上向蒸気流に同伴される。主としてこのメカニズムにより放射性物質が気相へ移行しエアロゾル化する。

廃液温度が 120°C以上になると温度上昇は、沸騰初期に比して急になる。この沸騰晩期では、廃液中の溶液成分の蒸発が進み溶解物の一部が析出するとともに溶液の粘性の高い状態を経て水、硝酸の溶液成分が徐々に消失し、約 160°Cでほとんど消失し乾固に至る。この期間の放射性物質の気相への移行は、Ru の揮発性のガス状物質：RuO<sub>4</sub> が主になると想定される<sup>9)</sup>。この期間での貯槽からの流出気体には、水および硝酸蒸気（以降、蒸気という）、NO<sub>x</sub>ガス、揮発性のガス状物質が含まれる。これらの気体に加え、廃ガス処理セル以降の建屋区画内での温度低下による凝縮水を含めた物質間での化学反応により揮発性のガス状物質は不揮発性の物質に変化し、気体からエアロゾルへ変化、液相へ移行、あるいはコンクリート壁面へ沈着することが想定される。気化した RuO<sub>4</sub> は、NO<sub>x</sub> を含む硝酸及び水の混合蒸気とともに建屋区画内へ移行し凝縮水へ移行すると考えられる。このような凝縮を伴う状況では NO<sub>x</sub> が存在することにより Ru の凝縮水への移行が促進することが実験的に確認されている<sup>3), 4)</sup>。

乾固後は約 400°Cまでに多くの化学種の硝酸塩の脱硝反応が進む<sup>1)</sup>。貯槽内で発生した放射性物質を含む蒸気等が、セル内へ流出し換気系を経由して建屋内の区画へ移行する。この期間での貯槽からの流出気体は、揮発性のガス状物質を含む NO<sub>x</sub> ガスが主である。廃ガス処理セルあるいは直近の建屋区画内では、高温の NO<sub>x</sub> ガスの流入でコンクリート壁面の温度が上昇し、沈着した物質が再浮遊あるいはガス化する可能性がある。一方、下流側の建屋内区画では、NO<sub>x</sub> ガスの温度も低下して流入してくるため、セル内気相部の温度上昇は起こらず、沸騰晩期と同様に、凝縮水を含めた物質間での化学反応による揮発性ガスの不揮発性物質への変化によるガスからエアロゾル、液相への移行、あるいはコンクリート壁面への沈着が継続すると考えられる。

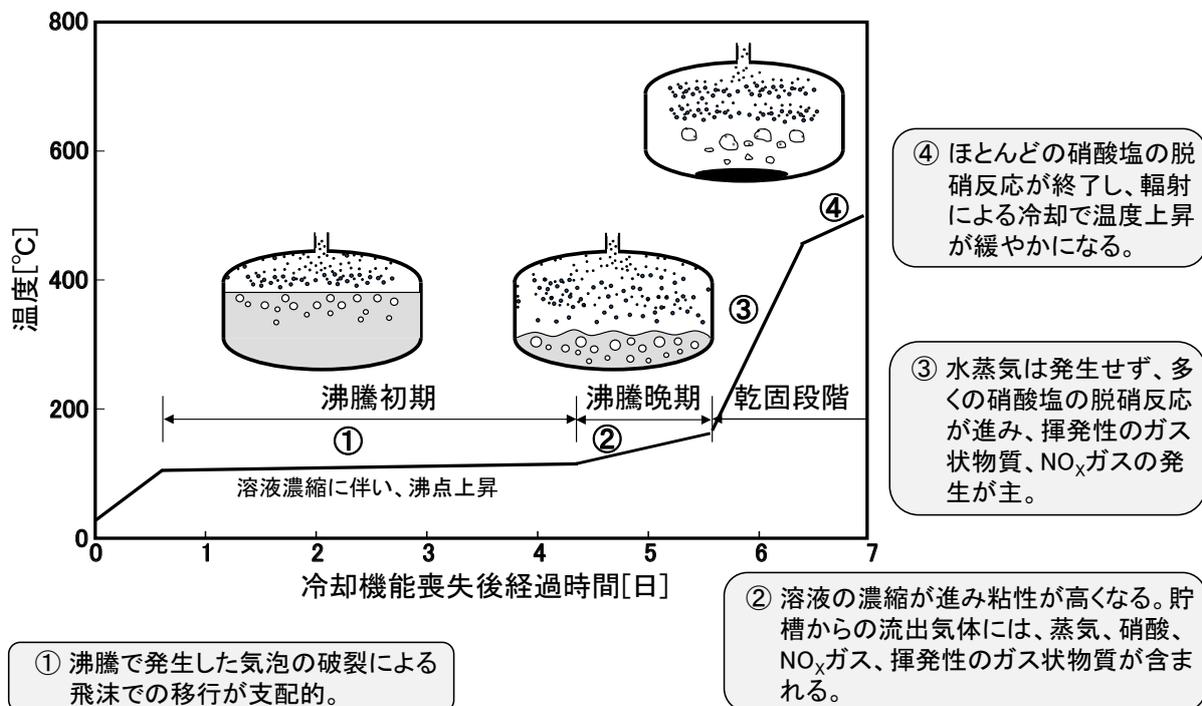


図 2.2 熱流動解析による事象進展予測（参考文献 1)より転載）

### 3. 物理、化学的挙動の解析モデル

#### 3.1 化学反応のモデル化

SCHERN では文献 10) 及び 11) に記載の NO<sub>x</sub> に係る気液各相での化学反応をモデル化している。反応に関わる化学種は NO、NO<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>、HNO<sub>2</sub>、HNO<sub>3</sub>、H<sub>2</sub>O、O<sub>2</sub> である。各化学反応の平衡定数及び反応速度定数は、プログラム内に組み込まれている。

##### (1) 気相部での化学反応

気相部でモデル化している化学反応式を(3.1)～(3.5)式に示す。表 3.1 に各化学反応の平衡定数、正方向及び逆方向の反応速度定数を示す。文献 10)及び 11)とも同様の反応式及び反応速度定数が示されている。

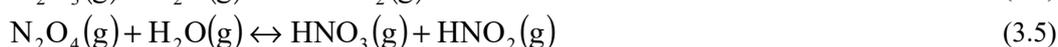
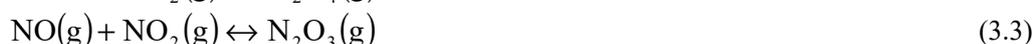


表 3.1 気相部での化学反応の平衡定数、正方向及び逆方向の反応速度定数

反応式 番号	正方向反応速度定数 : $k_{iF}$	平衡定数 : $K_i$	逆方向反応速 度定数 : $k_{iB}$
3.1	$10^{(652.1/T-0.7356)} \times (RT/101.325)^2$ a)	—	—
3.2	$10^9$ b)	$10^{(2993/T-9.226)} \times (RT/101.325)$ c)	$k_{2F}/K_2$
3.3	$10^9$ b)	$10^{(2072/T-7.234)} \times (RT/101.325)$ c)	$k_{3F}/K_3$
3.4	$4.1 \times 10^4$ b)	$10^{(-20.83/T-0.5012)}$ d)	$k_{4F}/K_4$
3.5	$250$ b)	$10^{(-965.5/T-1.481)}$ d)	$k_{5F}/K_5$

a): [(m<sup>3</sup>/kmol)<sup>2</sup>/s], b): [m<sup>3</sup>/kmol/s], c): [m<sup>3</sup>/kmol], d): [-], T : Gas phase temp. [K], R = 8.31446 [J/mol/K]

##### (2) 液相部での化学反応

液相部の化学反応式を(3.6)～(3.11)式に示す。表 3.2 に各化学反応の平衡定数、正方向及び逆方向の反応速度定数を示す。文献 10)では(3.9)及び(3.10)式の反応は平衡反応としているのに対して文献 11) では、不可逆反応としている。ここでは平衡反応を仮定する。また、(3.6)及び(3.7)式は文献 10) のみに、(3.8)及び(3.11)式は文献 11)のみに示されている。

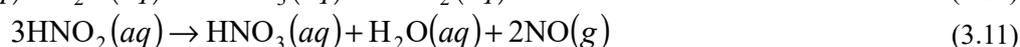
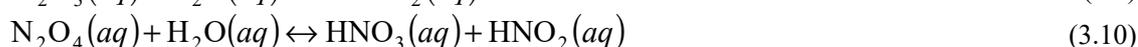
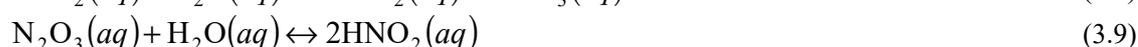
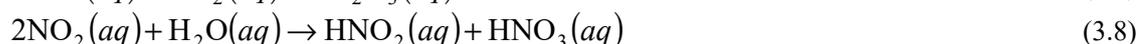


表 3.2 気相部での化学反応の平衡定数、正方向及び逆方向の反応速度定数

反応式 番号	正方向反応速度定数： $k_{iF}$	平衡定数： $K_i$	逆方向反応速度定数： $k_{iB}$
3.6	$\cong k_{7F}$ <sup>a)</sup>	$6.54 \times 10^4$ <sup>c)</sup>	$k_{6F}/K_6$
3.7	$1.37 \times 10^6$ <sup>a)</sup>	$1.37 \times 10^4$ <sup>c)</sup>	$k_{7F}/K_7$
3.8	$10^{4.67209}$ <sup>a)</sup>	—	—
3.9	868 <sup>b)</sup>	330 <sup>d)</sup>	$k_{9F}/K_9$
3.10	0.1572 <sup>b)</sup>	$5.81 \times 10^4$ <sup>d)</sup>	$k_{10F}/K_{10}$
3.11	$10^{(-6200/T+20.1979)}$ <sup>e)</sup>	—	—

a): [m<sup>3</sup>/kmol/s], b): [m<sup>3</sup>/kmol/s], c): [m<sup>3</sup>/kmol], d): [—], e): [atm<sup>2</sup>m<sup>12</sup>/kmol<sup>4</sup>/s],  $T$ : Liquid phase temp [K]

### 3.2 各化学種の生成速度の定式化

3.1 節において(3.1)～(3.5)式で示した気相部での化学反応での生成速度は(3.12)～(3.16)式で表される。 $[X(g)]$ は、気相中での化学種: $X$ の濃度[kmol/m<sup>3</sup>]を表す。(3.12)～(3.16)式で表される生成速度を、それぞれ A～E とし、5 章 5.1 節で示す気相における濃度の経時変化を表す式で参照する。

$$-\frac{d}{dt}[NO(g)] = k_1[NO(g)]^2[O_2(g)] = A \quad (3.12)$$

$$-\frac{d}{dt}[NO_2(g)] = k_{2F}[NO_2(g)]^2 - k_{2B}[N_2O_4(g)] = B \quad (3.13)$$

$$-\frac{d}{dt}[NO(g)] = k_{3F}[NO(g)][NO_2(g)] - k_{3B}[N_2O_3(g)] = C \quad (3.14)$$

$$-\frac{d}{dt}[N_2O_3(g)] = k_{4F}[N_2O_3(g)][H_2O(g)] - k_{4B}[HNO_2(g)]^2 = D \quad (3.15)$$

$$-\frac{d}{dt}[N_2O_4(g)] = k_{5F}[N_2O_4(g)][H_2O(g)] - k_{5B}[HNO_2(g)][HNO_3(g)] = E \quad (3.16)$$

同様に (3.6)～(3.11)式で示した液相部での化学反応の反応速度は(3.17)～(3.22)式で表される。 $[X(aq)]$ は、液相中での化学種: $X$ の濃度[kmol/m<sup>3</sup>]を表す。(3.17)～(3.22)式で表される生成速度を、それぞれ F～K とし、5 章 5.2 節で示す液相における濃度の経時変化を表す式で参照する。

$$-\frac{d}{dt}[NO_2(aq)] = k_{6F}[NO_2(aq)]^2 - k_{6B}[N_2O_4(aq)] = F \quad (3.17)$$

$$-\frac{d}{dt}[NO(aq)] = k_{7F}[NO(aq)][NO_2(aq)] - k_{7B}[N_2O_3(aq)] = G \quad (3.18)$$

$$-\frac{d}{dt}[NO_2(aq)] = k_8[NO_2(aq)]^2 = H \quad (3.19)$$

$$-\frac{d}{dt}[N_2O_3(aq)] = k_{9F}[N_2O_3(aq)] - k_{9B}[HNO_2(aq)]^2 = I \quad (3.20)$$

$$-\frac{d}{dt}[N_2O_4(aq)] = k_{10F}[N_2O_4(aq)] - k_{10B}[HNO_2(aq)][HNO_3(aq)] = J \quad (3.21)$$

$$-\frac{d}{dt}[HNO_2(aq)] = k_{11}[HNO_2(aq)]^4 / p_{no}^2 = K \quad (3.22)$$

### 3.3 気液間の移行のモデル化

高レベル廃液貯槽の蒸発乾固事故では、沸騰に伴い蒸気が施設内に流出する期間（沸騰時）と、蒸気発生がなくなり廃液中のFP硝酸塩の熱分解による脱硝反応でNO<sub>x</sub>が発生する期間（乾固時）に大きく分けられ、それぞれの期間で気液間の物質の移行のメカニズムが異なる。

2章で述べたように沸騰時の実規模施設では、セル等の建屋の区画に流出した蒸気は、蒸気の飽和温度が100℃未満の場合、コンクリート壁面等の区画内の構造物表面で除熱され凝縮し液膜を形成し、気相部にはミストが発生する。液膜は徐々に床面に移動しプール水として停留すると想定される。気相部の温度が100℃より低い場合、除熱により温度が低下して飽和温度になると気相部にミストが発生する。気相部に浮遊できるミストには上限があり、これを超えるとプール水として床面に停留すると考えられる。この期間ではミスト及び壁面液膜において瞬時に平衡状態となる溶解を仮定し、化学種が平衡状態で溶解したミスト及び壁面液膜水がプール水へ追加される仮定しモデル化している。

一方、乾固時には、気相中のミスト及び壁面液膜は発生しない。この場合の気液間の物質の移動はプール水の気液界面を介しての分子拡散での移行が考えられる。物質の拡散に関する基本法則であるFickの法則では、溶解速度（液相濃度の増加速度）は境界膜厚さ、溶媒中の溶質の拡散係数等で表される。

#### (1) 凝縮に伴う移行のモデル化

凝縮液量は、ミスト及びプール水の和であると仮定し、それぞれの体積を $V_{\text{cond}}$ 、 $V_{\text{mist}}$ 及び $V_{\text{pool}}$ とする。SCHERNで提案する液相への溶解のモデルでは、ミスト及び壁面液膜において瞬時に平衡状態となる溶解を仮定し、化学種が平衡状態で溶解したミスト及び壁面液膜水がプール水へ追加されることになる。このため単位時間当たりの各化学種の気相から液相水への移行量は、 $V_{\text{cond}}$ の単位時間当たりの増加分に溶解する量としている。また、プール水と気相部は、Henryの法則に従う平衡にほぼ近い状態にあることから、凝縮水が増加する状況ではプール水界面を介しての移行はないと仮定する。

表3.3にNIST Chemistry WebBook<sup>12)</sup>のサイトに掲載されている水に対するHenry定数を定数項と温度依存項に分けて示す。Henry定数は、これら2項の積で表される。化学種： $X$ のHenry定数： $h_X$  [kmol/m<sup>3</sup>/kPa]に分圧： $p_X$  [kPa]を乗ずれば液相中の平衡状態での化学種 $X$ の濃度が求まるが、気液各相の濃度の経時変化を解析するためには、単位時間当たりの気液間の移行量が必要となる。蒸気凝縮に伴い発生するミスト及び液膜に溶解する化学種 $X$ の移行速度： $S_X$  [kmol/s]は、(3.23)式で表される。同式の中辺の気相の化学種 $X$ の濃度： $[X(g)]$  [kmol/m<sup>3</sup>]以外の項をまとめて $K_X$  [m<sup>3</sup>/s]とする。凝縮液量が減少する場合、即ち $K_X$ が負の場合では、 $S_X$ をゼロとし、凝縮液の減少による濃度増加を考慮する。

$$S_X = h_X p_X \frac{d}{dt} V_{\text{cond}} = h_X \frac{[X(g)]}{M_{\text{tot}}} p_{\text{tot}} \frac{d}{dt} V_{\text{cond}} = [X(g)] \text{MIN}(K_X, 0.0) \quad (3.23)$$

ここで、気相部全圧： $p_{\text{tot}}$  [kPa]、気相部全モル濃度： $M_{\text{tot}}$  [kmol/m<sup>3</sup>]である。(3.23)式で得られる値は、気相から液相への単位時間当たりの移動量 [kmol/s]である。一方、気液各相での各化学種の存在量は、濃度[kmol/m<sup>3</sup>]で表すため、気相から液相への移動に伴う気相部の濃度減少及び液相部（凝縮液）の濃度増加に換算するには、それぞれの体積（気相部体積： $V_{\text{stm}}$ 、凝縮液体積： $V_{\text{cond}}$ ）

で除する必要がある。

表 3.3 水に対する Henry 定数[kmol/m<sup>3</sup>/kPa]

化学種(X)	定数項 (@298.15 K)	温度依存項
NO	1.84×10 <sup>-5</sup>	exp(1500 (1/T-1/298))
NO <sub>2</sub>	1.18×10 <sup>-4</sup>	exp(2500 (1/T-1/298))
N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.98×10 <sup>-3</sup>	
N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1.38×10 <sup>-2</sup>	
O <sub>2</sub>	1.30×10 <sup>-5</sup>	exp(4800 (1/T-1/298))
HNO <sub>2</sub>	4.80×10 <sup>-1</sup>	exp(1700 (1/T-1/298))
HNO <sub>3</sub>	2.10×10 <sup>3</sup>	exp(8700 (1/T-1/298))

(2) 分子拡散による移行のモデル化

乾固後に蒸気の凝縮が生じない状態では、気液界面を介した化学種の移動が主体と考えられる。SCHERN では、このような現象を Whiteman の薄膜理論<sup>13)</sup> による気液界面での物質の移動を仮定してモデル化している。気液界面における化学物質の移動を分子拡散と考えると、化学種の移動量束： $N$  [kmol/m<sup>2</sup>/s] は Fick の第一法則に従い (3.24)式で表される。

$$N = -D \frac{dC}{dz} \tag{3.24}$$

ここで、 $C$  は濃度 [kmol/m<sup>3</sup>]、 $D$  は拡散係数 [m<sup>2</sup>/s]、 $z$  は移動方向の距離 [m]を表す。気液界面において、濃度勾配  $dC/dz$  が一定であれば、(3.24)式は(3.25)式で表すことができる。 $k$  は  $D/dz$  で定義される質量移動係数 [m/s] である。

$$N = k\Delta C \tag{3.25}$$

ここで、図 3.1 に示す気相液相の界面を考える。

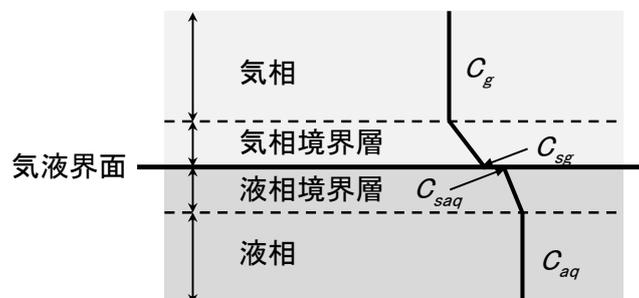


図 3.1 気液界面のモデル

図中、 $C_g$  は気相中の化学種の濃度 [kmol/m<sup>3</sup>]、 $C_{sg}$  は気相境界層の気液界面での化学物質濃度 [kmol/m<sup>3</sup>]、 $C_{aq}$  は液相中の化学種の濃度 [kmol/m<sup>3</sup>] 及び、 $C_{saq}$  は液相境界層の気液界面での化学種の濃度[kmol/m<sup>3</sup>]を表す。

図 3.1 の界面の液相境界層での物質の移動量束： $N_{saq}$  [kmol/m<sup>2</sup>/s] は(3.26)式で表される。

$$N_{saq} = k_{aq} (C_{aq} - C_{saq}) \quad (3.26)$$

ここで、 $k_{aq}$  は液相中の化学種の質量移動係数 [m/s]、を表す。気相境界層での物質の移動量束： $N_{sg}$  [kmol/m<sup>2</sup>/s] は、(3.27)式で表される。

$$N_{sg} = k_g (C_{sg} - C_g) \quad (3.27)$$

ここで、 $k_g$  は気相中の化学物質の質量移動係数 [m/s] である。

気液界面では平衡状態にあると仮定すれば  $C_{sg}$  と  $C_{saq}$  の間にはヘンリーの法則が成立し、これら 2 つの濃度には (3.28) 式で示す関係が成り立つ。ここで、 $K_{gaq}$  はヘンリー定数から求まる値である。

$$C_{saq} = K_{gaq} C_{sg} \quad (3.28)$$

(3.27)式から、 $C_{sg}$  は  $C_g$  と(3.29)式で関係付けられる。

$$C_{sg} = \frac{N_{sg}}{k_g} + C_g \quad (3.29)$$

したがって、(3.28) 式と (3.29) 式から、 $C_{saq}$  は  $C_g$  と (3.30) 式で関係付けられる。

$$C_{saq} = K_{gaq} \left( \frac{N_{sg}}{k_g} + C_g \right) \quad (3.30)$$

各境界層での化学種の移動量束は等しいため、これらを  $N$  とすれば、(3.26) 式に (3.30) 式を代入して (3.31) 式が得られる。

$$N = k_{aq} \left( C_{aq} - K_{gaq} \left( \frac{N}{k_g} + C_g \right) \right) \quad (3.31)$$

(3.31) 式を  $N$  について整理すると(3.32) 式が得られる。

$$N = \frac{C_{aq} - C_g K_{gaq}}{1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g} \quad (3.32)$$

文献 14)では気相及び液相中の物質の拡散係数は、それぞれ概ね  $10^{-5}$  [m<sup>2</sup>/s]、 $10^{-9}$  [m<sup>2</sup>/s]程度の値が示されている。本解析では、気相境界層及び液相境界層厚さを、それぞれ  $10^{-2}$  [m]、 $10^{-5}$  [m]

と仮定し、SCHERN で扱うすべて化学種の  $k_g$  及び  $k_{aq}$  を、それぞれ  $10^{-3}$  [m/s]、 $10^{-4}$  [m/s] としている。

### 3.4 Ru の気液間移行のモデル化

#### (1) Ru 物質移動係数の相関式

文献 15) には、ガラス管内で Ru を含む硝酸-水混合蒸気の凝縮に伴う凝縮液への移行量を調べる実験の分析から、(3.33)式に示す Ru 物質移行係数にかかる相関式が提案され、実規模施設への適用可能性についても考察されている。相関式では、Ru 物質移行係数： $Mtc_{Ru}$  [m/s] は、単位面積当たりの蒸気凝縮速度： $Vd_{cond-pa}$  [ $m^3/s/m^2$ ] 及び単位体積当たりの供給蒸気体積流量： $FV_{stm-pa}$  [ $m^3/s/m^3$ ] を用いて表される。

$$Mtc_{Ru} = 7.333 \times 10^9 \times (Vd_{cond-pa})^{1.788} \times (FV_{stm-pa} / 2.154 \times 10^{-3})^{3.233} \quad (3.33)$$

#### (2) 乾固後の取り扱い

(3.33)式は、物理的な吸収を表すと考える。施設内での蒸気の凝縮に伴う乾固前の期間では、同相関式で求まる物質移動係数に従い、区画内の濡れた壁面及びプール水面から液相に移行すると仮定する。文献 4) に示されている気液接触試験では、濡れ壁塔を流れ出しリザーバーに貯留される吸収液から、Ru の一部が再揮発したと思われる現象が確認されたとしている。このことから乾固後では蒸気凝縮がないので上述の 3.3(2)で示した分子拡散による移行のモデルに従い移行すると考えられるが、液相中での Ru と亜硝酸との化学変化については不明な点が多いことから、現状の SCHERN では、乾固後は気液間の移行は生じない取り扱いとしている。

## 4. 熱流動解析との連携

再処理施設を解析対象とするため、廃液貯槽で発生した  $\text{NO}_x$  を含む硝酸一水混合蒸気は、換気系を通して複数のセル等の建屋内の区画間を移動する。ここで提案する解析モデルでは、移動するのは、ミストを含む気相成分だけとし、凝縮水は個々の区画に停留すると仮定する。評価対象区画内での化学挙動解析の境界条件として区画内に流入あるいは流出する蒸気流量などが必要である。区画間の流れの情報としては、例えば発電用原子炉施設のシビアアクシデント解析コード：MELCOR<sup>16)</sup> を用いた区画内の熱流動解析<sup>17)</sup> から蒸気流量及びミスト流量を得ることができる。以下、MELCOR を例として解説する。図 4.1 に区画  $i$  での気相及び液相濃度と流入及び流出濃度との関係を示す。

### 4.1 蒸気の流れに伴う気相部の濃度変化

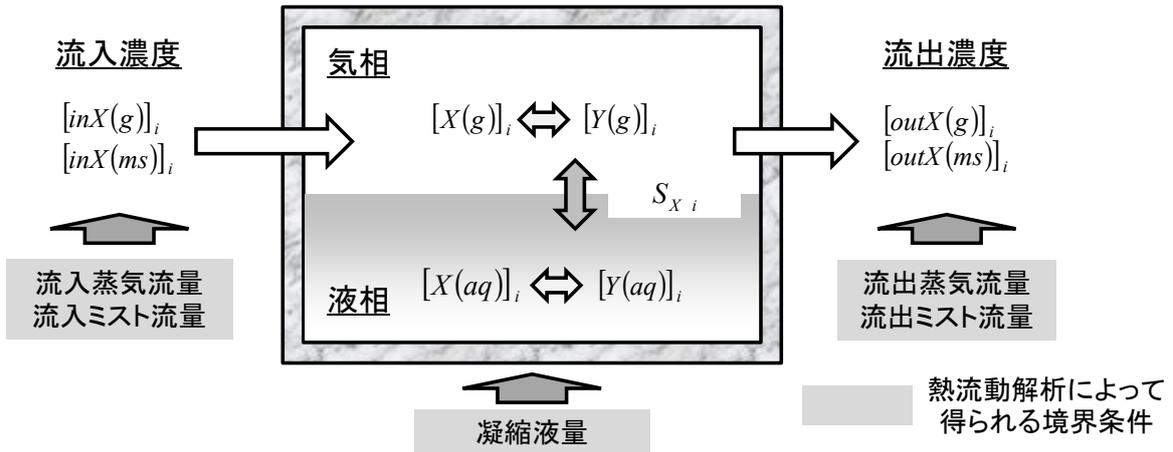
$[inX(g)]_i$  及び  $[outX(g)]_i$  [ $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ ] は、それぞれ区画  $i$  での上流側から流入し、下流側へ流出するモル濃度の変化を表す。 $[inX(g)]_i$  はひとつ手前の区画  $i-1$  の  $[inX(g)]_{i-1}$  に等しい。流入する気体成分のモル濃度は、上流区画  $i-1$  のモル濃度のままで流入すると仮定し、MELCOR で計算される上流側ジャンクションの蒸気体積流量 [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] を基に設定される。 $[inX(g)]_i$  は、上流区画の化学種  $X$  のモル濃度 [ $\text{kmol/m}^3$ ] に蒸気体積流量 [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] を乗じて流入量速度 [ $\text{kmol/s}$ ] に換算し、さらに区画内気相体積 [ $\text{m}^3$ ] で除することで区画内  $i$  での濃度の増分 [ $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ ] に変換する。 $[outX(g)]_i$  も同様に当該の区画内の濃度及び下流側のジャンクションの蒸気体積流量を乗じ、区画  $i+1$  の体積で除することで与えられる。

### 4.2 ミスト流に伴う液相部の濃度変化

$[outX(ms)]_i$  [ $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ ] ( $[outX(ms)]_{i+1}$  に等しい) は、ミスト流に含まれて移行する濃度であり液相部の濃度  $[inX(aq)]_i$  [ $\text{kmol/m}^3$ ] を基に求める。移行する下流側の区画  $i+1$  にミストが存在する場合は、MELCOR で計算される出口ジャンクションのミスト体積流量 [ $\text{m}^3/\text{s}$ ] を下流区画の液相体積 [ $\text{m}^3$ ] で除した補正項「 $1/\text{s}$ 」を乗じた値が液相に加算される。ミストが形成されていない場合には、ミスト体積流を下流区画 ( $i+1$ ) の気相体積 [ $\text{m}^3$ ] で除した補正項「 $1/\text{s}$ 」を乗じた値が気相に加算される。区画  $i$  の液相での減少分は、 $[X(aq)]_i$  に出口ジャンクションのミスト体積流量を乗じ区画  $i$  の液相体積で除した値に等しく、 $[X(aq)]_i$  から差し引かれる。

### 4.3 気液間の移動に伴う気液各相の濃度変化

(3.23)式で表される  $S_x$  は単位時間あたりに気相から液相への溶解により移行する化学種  $X$  の量 [ $\text{kmol/s}$ ]を表す。溶解による気相濃度の減少を考慮するために、 $S_x$  を気相部体積  $V_{\text{stm}}$  [ $\text{m}^3$ ] で除することで濃度の時間変化 [ $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ ] に換算する必要がある。一方、液相では濃度が増加するので液相体積  $V_{\text{cond}}$  [ $\text{m}^3$ ] で除することで液相濃度の時間変化 [ $\text{kmol/m}^3/\text{s}$ ] に換算する。



- $[X(g)]_i, [X(aq)]_i$  : 区画iにおける化学種Xの気相及び液相濃度[kmol/m<sup>3</sup>]  
 $[Y(g)]_i, [Y(aq)]_i$  : 区画iにおける化学種Yの気相及び液相濃度[kmol/m<sup>3</sup>]  
 $[inX(g)]_i, [inX(ms)]_i$  : 区画iに気体またはミストとして流入する化学種Xの濃度[kmol/m<sup>3</sup>/s]  
 $[outX(g)]_i, [outX(ms)]_i$  : 区画iから気体またはミストとして流出する化学種Xの濃度[kmol/m<sup>3</sup>/s]  
 $S_X$  : 区画iで単位時間に気液間を移行する化学種Xの濃度 [kmol/s]

図 4.1 区画 i の気相及び液相濃度と流入及び流出濃度との関係

## 5. 連立 1 次微分方程式

前節で示した解析対象化学種の気相及び液相での濃度は、複数の化学反応が関係して変化する。それらの濃度の経時変化を模擬することは、化学変化しない  $N_2$  を除く 8 種類の化学種 ( $NO$ 、 $NO_2$ 、 $N_2O_3$ 、 $N_2O_4$ 、 $HNO_2$ 、 $HNO_3$ 、 $H_2O$ 、 $O_2$ ) の気液各相での濃度の連立 1 次微分方程式の解を求めることになる<sup>18)</sup>。微分方程式の数は、気相では 8 種、液相では  $H_2O$  を除く 7 種の濃度に対応する合計 15 個の連立微分方程式の解を求めることになる。

### 5.1 気相部の微分方程式群

3.2 節で示した(3.12)~(3.16)式の各値： $A$ ~ $E$  を用いて、8 つの化学種の気相部での濃度変化速度は(5.1)~(5.8)式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[NO(g)] = & [inNO(g)] - A - C + 2/3 \times K V_{cond} / V_{stm} - [outNO(g)] - K_{NO}[NO(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([NO(aq)] - [NO(g)]K_{gaqNO}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[O_2(g)] = & [inO_2(g)] - 1/2 \times A - [outO_2(g)] - K_{O_2}[O_2(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([O_2(aq)] - [O_2(g)]K_{gaqO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[NO_2(g)] = & [inNO_2(g)] + A - B - C - [outNO_2(g)] - K_{NO_2}[NO_2(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([NO_2(aq)] - [NO_2(g)]K_{gaqNO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[N_2O_4(g)] = & [inN_2O_4(g)] + 1/2 \times B - E - [outN_2O_4(g)] - K_{N_2O_4}[N_2O_4(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([N_2O_4(aq)] - [N_2O_4(g)]K_{gaqN_2O_4}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[N_2O_3(g)] = & [inN_2O_3(g)] + C - D - [outN_2O_4(g)] - K_{N_2O_3}[N_2O_3(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([N_2O_3(aq)] - [N_2O_3(g)]K_{gaqN_2O_3}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[HNO_2(g)] = & [inHNO_2(g)] + 2D + E - [outHNO_2(g)] - K_{HNO_2}[HNO_2(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([HNO_2(aq)] - [HNO_2(g)]K_{gaqHNO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[HNO_3(g)] = & [inHNO_3(g)] + E - [outHNO_3(g)] - K_{HNO_3}[HNO_3(g)] / V_{atm} \\ & + SurfAI ([HNO_3(aq)] - [HNO_3(g)]K_{gaqHNO_3}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\frac{d}{dt}[H_2O(g)] = [inH_2O(g)] - D - E - [outH_2O(g)] - \frac{d}{dt} V_{cond} \rho_{cond} / 18 / V_{atm} \quad (5.8)$$

$[inX(g)]$ 及び $[outX(g)]$  [ $kmol/m^3/s$ ] は、4.1 節で述べたようにそれぞれ各区画での上流側からの流入及び下流側への流出を表す。(5.1)~(5.8)式中の $A$ ~ $E$  で表された項は、対応する化学反応による減少または増加を表す。例えば(5.1)式の“ $-A$ ”及び“ $-C$ ”は(3.12)式及び(3.14)式で表される反応での減少を表す。(5.3)式の“ $+A$ ”は(3.1)式の反応による増加を表す。右端の項は、Henry の法則に基づき(3.23)式で求められる気相から液相への溶解による移行を表す。例えば  $K_{NO}[NO(g)]$ は単位

時間当たりに溶解する NO の量[kmol/s]を表す。(5.6)式を除く上記の微分方程式において溶解による気相部濃度の減少を考慮するために、右辺最終項は気相部体積： $V_{\text{stm}}$  [ $\text{m}^3$ ]で除することで濃度減少による時間変化に換算している。(5.8)式の右辺最終項では水蒸気の凝縮に伴う減少を考慮している。HNO<sub>3</sub>成分は無視している。

## 5.2 液相部の微分方程式群

3.2 節で示した(3.17)~(3.22)式の各値： $F\sim K$  を用いて、7 つの化学種の濃度変化速度は(5.9)~(5.15)式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [NO(aq)] = & K_{NO} [NO(g)]/V_{\text{cond}} - [NO(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & - G + [inNO(ms)]_i - [outNO(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([NO(aq)] - [NO(g)]K_{gaqNO}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [O_2(aq)] = & K_{O_2} [O_2(g)]/V_{\text{cond}} - [O_2(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & + [inO_2(ms)]_i - [outO_2(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([O_2(aq)] - [O_2(g)]K_{gaqO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [NO_2(aq)] = & K_{NO_2} [NO_2(g)]/V_{\text{cond}} - [NO_2(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & - F - G - H + [inNO_2(ms)]_i - [outNO_2(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([NO_2(aq)] - [NO_2(g)]K_{gaqNO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [N_2O_4(aq)] = & K_{N_2O_4} [N_2O_4(g)]/V_{\text{cond}} - [N_2O_4(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & + 1/2 \times F - J + [inN_2O_4(ms)]_i - [outN_2O_4(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([N_2O_4(aq)] - [N_2O_4(g)]K_{gaqN_2O_4}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [N_2O_3(aq)] = & K_{N_2O_3} [N_2O_3(g)]/V_{\text{cond}} - [N_2O_3(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & + G - I + [inN_2O_3(ms)]_i - [outN_2O_3(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([N_2O_3(aq)] - [N_2O_3(g)]K_{gaqN_2O_3}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [HNO_2(aq)] = & K_{HNO_2} [HNO_2(g)]/V_{\text{cond}} - [HNO_2(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & + 1/2 \times H + 2I + J - K + [inHNO_2(ms)]_i - [outHNO_2(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([HNO_2(aq)] - [HNO_2(g)]K_{gaqHNO_2}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [HNO_3(aq)] = & K_{HNO_3} [HNO_3(g)]/V_{\text{cond}} - [HNO_3(aq)]/V_{\text{cond}} \frac{dV_{\text{cond}}}{dt} \\ & + 1/2 \times H + J + 1/3 \times K + [inHNO_3(ms)]_i - [outHNO_3(ms)]_i \\ & - SurfA1 ([HNO_3(aq)] - [HNO_3(g)]K_{gaqHNO_3}) / (1/k_{aq} + K_{gaq}/k_g) \end{aligned} \quad (5.15)$$

右辺の第1項は、Henryの法則に基づき(3.23)式で求められる化学種 $X$ の気相から液相への溶解による移行を表す。気相部の微分方程式と同様に溶解による液相部濃度の増加を考慮するために液相部体積(凝縮水体積： $V_{\text{cond}}$  [ $\text{m}^3$ ])で除することで濃度に換算する必要がある。第2項は、凝縮水の体積変化に伴う濃度補正項である。化学種 $X$ の微分方程式中の $[inX(ms)]$ 及び $[outX(ms)]$ は、4.2節で述べたミスト流に伴う液相部の濃度変化を表す。

### 5.3 境界条件

#### (1) 気相流の取扱い

微分方程式中の $[in H_2O(g)]$ 及び $[out H_2O(g)]$ 、並びに $[in HNO_3(g)]$ 及び $[out HNO_3(g)]$ は、境界条件としてMELCORを用いた解析体系内の熱流動解析結果から設定する<sup>8)</sup>。MELCORは硝酸を解析対象としない。解析体系での熱流動は、硝酸-水-空気(NO又はNO<sub>2</sub>は他の成分に比して少なく化学変化するため熱流動解析では無視する)3成分系の系外への放熱による凝縮が主であり、凝縮量の主要な決定因子は混合蒸気の蒸発潜熱である。硝酸及び水の単位モル当たりの潜熱がほぼ等しいことから硝酸をモル数の等しい水に置き換えて解析している。従ってMELCORの解析結果： $W_{\text{steam}}$  [ $\text{kg/s}$ ] (対象区画からの流出蒸気流) から、化学種： $X$ の流出項は、MELCORで計算された出口蒸気流を基に(5.16)式で計算され、下流側の区画の流入項に等しい。 $W_{\text{steam}}/(\rho_{\text{steam}}V_{\text{atm},i})$ は、区画 $i$ の気相部体積に対する単位時間に流出する気体の体積との比を表し、それに化学種： $X$ の濃度を乗ずることで単位時間に流出する化学種： $X$ の濃度の減少を表している。

$$[outX(g)]_i = [X(g)]_i W_{\text{steam}} / (\rho_{\text{steam}} V_{\text{atm},i}) \quad (5.16)$$

#### (2) ミスト流の取扱い

MELCORの解析では、ミストが解析対象区画間を移動する。ミストは液相水として考慮する。ミストに含まれて流出する化学種 $X$ の流出項は、(5.17)式で表され、下流側の区画の流入項に等しい。 $outW_{\text{ms}}$ 及び $\rho_{\text{mist}}$ は、それぞれMELCORで計算されるミストの流出量 [ $\text{kg/s}$ ]及び密度 [ $\text{kg/m}^3$ ] (水の密度に等しい)である。 $outW_{\text{ms}}/(\rho_{\text{mist}}V_{\text{cond},i})$ は、区画 $i$ の凝縮水体積に対する単位時間に流出するミストの体積との比を表し、それに化学種： $X$ の濃度を乗ずることで単位時間にミストとして流出する化学種： $X$ の濃度の減少を表している。

$$[outX(ms)]_i = [X(aq)]_i outW_{\text{ms}} / (\rho_{\text{mist}} V_{\text{cond},i}) \quad (5.17)$$

(5.17)式は、ミストとして流出する化学種 $X$ の液相水の濃度からの減少分が、凝縮水全体のうちの流出するミストの体積分であることを意味する。下流側の区画で蒸気凝縮が発生している場合はミストのまま流入するので上流側の出口濃度が当該区画の流入濃度に等しいとする(5.18)式が成立する。

$$[inX(ms)]_i = [outX(ms)]_{i-1} \quad (5.18)$$

下流側で蒸気凝縮が発生していない場合は、流入したミストは気化するため、ミストに溶存して流入した化学種は、気相部に追加される。この場合(5.19)式に示す補正が必要となる。

$$[inX(ms)]_i = [outX(ms)]_{i-1} / V_{atm} \quad (5.19)$$

#### 5.4 Ru の移行に係る微分方程式

文献 4)によれば、気体状の  $RuO_4$  は、 $NO_x$  を含む硝酸-水混合蒸気の凝縮にともない液相に移行することが確認されている。Ru は、液相ではニトロシルルテニウム： $Ru(NO)(NO_3)_3$ （本報中では  $Ru[NO]$  と表記する）で存在すると仮定し、再揮発は想定しない。また、気相において水蒸気と共存する場合、 $RuO_2$  に変化する<sup>4)</sup>とされるが、液相への移行に比して十分に少ないので考慮しない。

凝縮水が発生する期間では各区画内のプール水面及び濡れた壁面（天井を含む）（ $S_{cond}$  [ $m^2$ ]）で移行する。Ru 物質移行整数： $Mtc_{Ru}$  [m/s]は(3.33)で与えられる。気相から液相への移行速度[kmol/s]は、気相部の  $RuO_4$  の濃度： $[RuO_4(g)]$ に  $S_{cond}$  及び  $Mtc_{Ru}$  を乗じて表される。気液各相でのモル濃度の変化速度は、それぞれの空間の体積； $V_{stm}$  及び  $V_{cond}$  で除した値となる。具体的には、気相中の  $RuO_4$ 、及び液相中の  $Ru[NO]$  の濃度の変化は、それぞれ(5.20)及び(5.21)式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [RuO_4(g)] &= [inRuO_4(g)] - [outRuO_4(g)] \\ &\quad - [RuO_4(g)] \times S_{cond} \times Mtc_{Ru} / V_{stm} \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\frac{d}{dt} [Ru[NO](aq)] = [RuO_4(g)] \times S_{cond} \times Mtc_{Ru} / V_{cond} \quad (5.21)$$

## 6. SCHERN のプログラム構造

SCHERN は 2.1 節で示した化学反応による 8 つ化学種の気液各相での濃度変化を表す 15 個（液相の H<sub>2</sub>O を除く）の一次微分方程式の連立解を求める汎用数学ライブラリ：DVIDE<sup>19)</sup> を核とする計算プログラムである。SCHERN のメインプログラムでは、DVIDE の境界条件を設定し、それに基づき求められた連立解をファイルに出力する。設定する境界条件として各区画の温度、各化学種の流入濃度、流出蒸気流量及びミスト流量の変化等をテーブルデータの形式で読み込み、時刻ごとの値を内挿で求め DVIDE の入力値とする。

### 6.1 DVIDE の入手

DVIDE は文献 20)として示した URL からダウンロードできる。DVIDE を SCHERN が対象とする化学挙動解析に適合させるためには、DVIDE のサブルーチンである“FEX”及び“JEX”を解析モデルに合わせてカスタマイズする必要がある。DVIDE として公開されているそれ以外のソースは変更していない。

### 6.2 SCHERN での処理の流れ

#### (1) 全体の処理の流れ

図 6.1 に SCHERN での処理の流れを示す。最初に INIT.dat から、DVIDE 及び SCHERN の制御変数、解析対象空間の諸元を読み込む。次に流入量読込オプションに応じて解析対象空間への流入量を読み込む。入力データの読み込み後解析時刻を設定し、微分方程式の各係数を計算し DVIDE に入力し連立解を求め、それを出力する。液相での硝酸濃度は、15 [kmol/L]を超えることはないのでこの値を上限値として液相硝酸濃度を補正する。実験などの実測値として予め液相の硝酸濃度が既知の場合は、DVIDE の結果をその値になるように補正する。気相部の各濃度から流出する量を計算し、解析時刻を次に進める。

#### (2) DVIDE 内の処理の流れ

図 6.2 に DVIDE での処理の流れを示す。DVIDE での SCHERN に特化した処理として“FEX”及び“JEX”において微分方程式の係数を設定する。

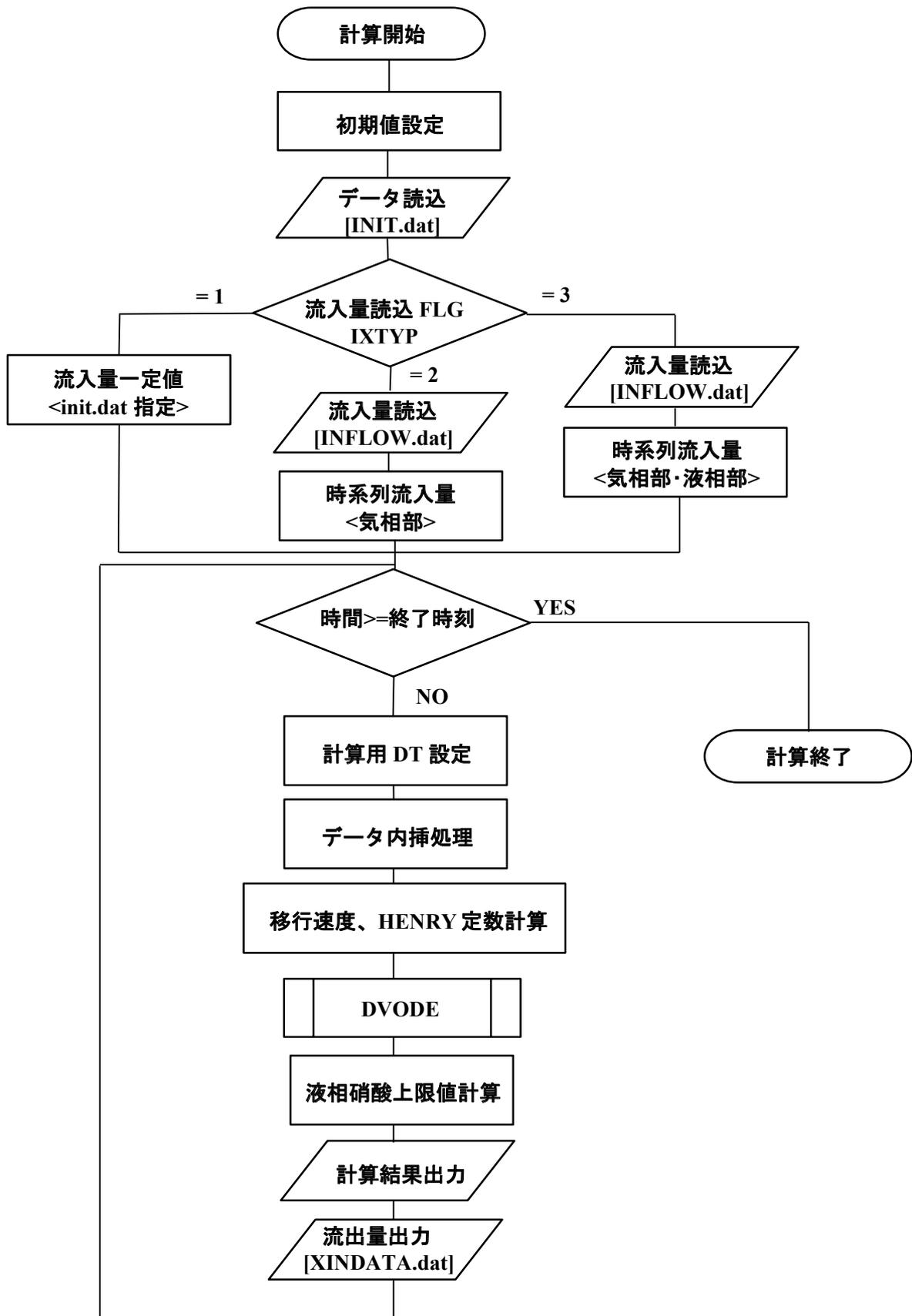


図 6.1 SCHERN での処理の流れ

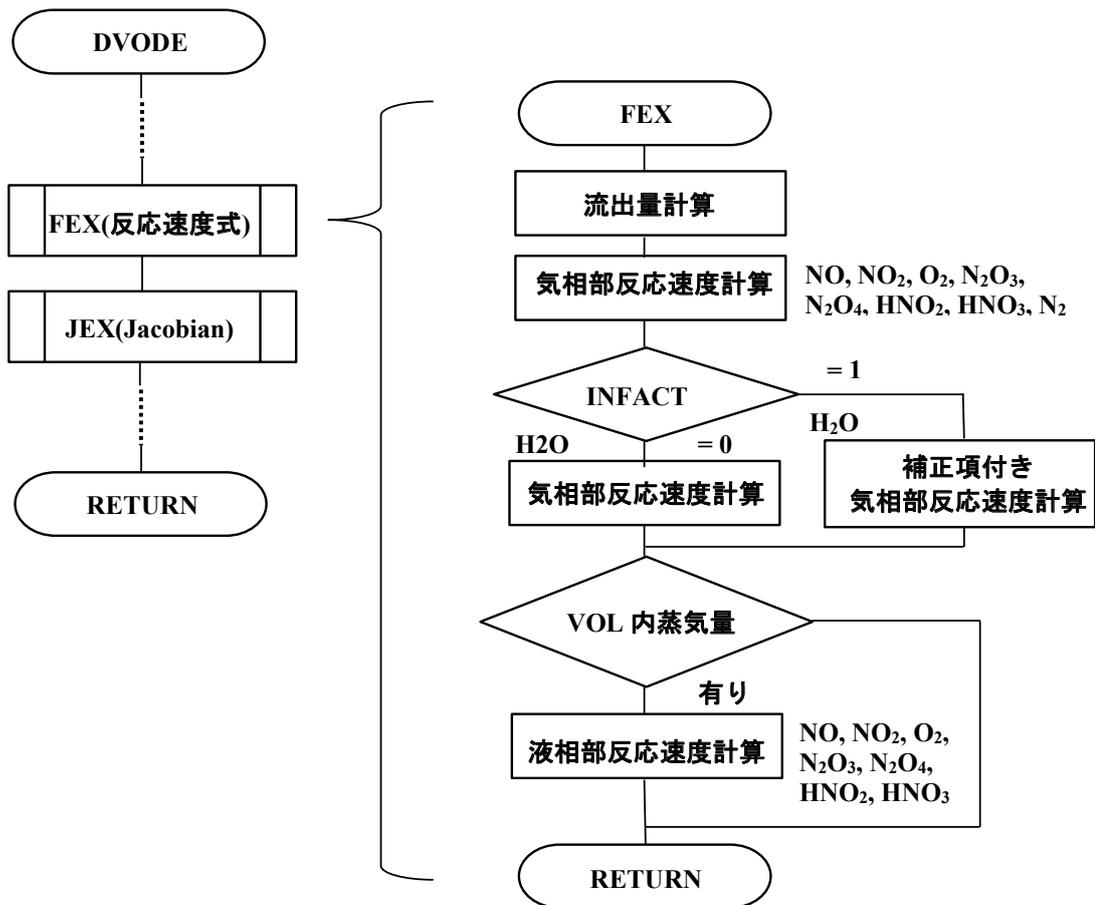


図 6.2 DVODE での処理の流れ

## 7. 計算の実行

### 7.1 SCHERN の実行手順

#### (1) 入力データの作成

SCHERN の実行形式のファイルがあるフォルダに次のファイルを準備する。

制御入力データファイル       : INIT.dat  
 流入量入力データファイル     : INFLOW.dat

ただし、INFLOW.dat は INIT.dat で[IXTYP=2or3]を設定の時のみ必要となる。IXTYP=2 が指定されたときは計算対象空間（以下 VOL という）の上流側 VOL の計算結果ファイル XINDATA.dat のファイル名を INFLOW.dat に置き換えて使用する。個々の入力データは 7.2 節を参照し作成する。

#### (2) 実行方法

cmd.exe を実行してコマンドプロンプトウィンドウを開き、実行ファイル格納フォルダに入力データ（INIT.dat、必要に応じて INFLOW.dat）があることを確認し、次のコマンドを実行する。具体例を図 7.1 に示す。

```
SCHERN.exe *****.dat
                (結果出力ファイル名)
```

例)



```
C:\Windows\System32\cmd.exe
Microsoft Windows [Version 10.0.19042.985]
(c) Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Windows\system32>SCHERN.exe out.dat
```

図 7.1 SCHERN 実行の例

#### (3) 実行結果の出力

- ・ out.dat 等指定ファイル

実行時に指定した出力ファイルには計算結果が出力される。

- ・ XINDATA.dat

自動で作成され、化学種ごとの流出量の時系列データとなっている。

#### (4) 取り扱い化学種

SCHERN の取扱い化学種を以下に示す。

NO(gas)	O <sub>2</sub> (gas)	NO <sub>2</sub> (gas)	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (gas)	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (gas)
H <sub>2</sub> O(gas)	HNO <sub>2</sub> (gas)	HNO <sub>3</sub> (gas)	N <sub>2</sub> (gas)	RuO <sub>4</sub> (gas)
Ru[NO](gas)	aqNO <sub>2</sub> (liq)	aqN <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (liq)	aqNO(liq)	aqN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (liq)
aqHNO <sub>2</sub> (liq)	aqHNO <sub>3</sub> (liq)	aqO <sub>2</sub> (liq)	aq RuO <sub>4</sub> (liq)	aqRu[NO](liq)

## 7.2 入力変数の説明

入力例とともに入力変数名及び内容を示す。

### (1) INIT.dat ファイルで入力する変数

付録の付図 1 にサンプル入力を示す。

### (a) DVODE の制御変数

表 7.1 に DVODE の制御変数を、図 7.2 にその入力の一例を示す。

表 7.1 DVODE の制御変数

入力変数	内容	備考	単位
IXTYP	化学種ごとの流入量読込オプション	1: 入力データ: XIN Gas phase inflow で指定 (一定量注入)、7.2 節(1) (e) 参照 2: INFLOW.dat で時系列データとして指定 (気相のみ)、7.2 節(2)(a)参照 3: INFLOW.dat で時系列データとして指定 (気相及び液相 (ミスト))、7.2 節(2)(b)参照	
ITASK	DVODE 変数	推奨値 = 1	
ISTATE	DVODE 変数	デフォルト値 = 1	
IOPT	DVODE 変数	入力指定方法オプション デフォルト値 = 0	
ITOL	DVODE 変数	入力指定方法オプション デフォルト値 = 2	
T	計算開始時刻	デフォルト値 = 0.0	s
TINI	DVODE変数	デフォルト値 = 1.66D-3	
TOUT	初期出力時間	デフォルト値 = 0.0	s
RTOL	相対許容誤差パラメータ	デフォルト値 = 1.0000D-4	
ATOL	絶対許容誤差パラメータ	デフォルト値 = 1.0000D-16	

```

/XIN-TYPE↓
IXTYP      2                /1:Gas phase inflow 下で指定 2:ファイルよりタイムステップ毎に読込↓
↓
/DB2SUB INPUT DATA↓
ITASK      3↓
ISTATE     1↓
IOPT       0↓
ITOL       2↓
T          0.000D+00↓
TINI       1.660D-03↓
TOUT       0.000D+00↓
RTOL       1.0000D-4↓
ATOL       1.0000D-16↓
    
```

図 7.2 DVODE の制御変数の例

**(b) SCHERN の制御変数**

表 7.2 に SCHERN の制御変数を、図 7.3 にその入力の一列を示す。

表 7.2 SCHERN の制御変数

入力変数	内容	備考	単位
TEND	計算終了時間		s
DTLN0	標準計算時間幅 (DT)		s
TSTEP	結果出力間隔		s
WSTEP	流出量出力間隔	XINDATA.dat の出力間隔	s
NTINT	DT 変更期間の数	最小値 : 0、最大値 : 10	
TINTn	DT 変更期間名	NTINT のセットを昇順に入力	s
TIMES(n)	時間幅 (DT) 変更開始時間	DT を DTLN2 に変更開始時間	s
TIMEE(n)	時間幅 (DT) 変更終了時間	DT を DTLN0 に戻す時間	s
DLT(n)	変更計算時間幅 (DT)	変更する計算時間幅	s

/TIME STEP SETTING				
TEND	4.37000d+5		/計算終了時間	
DTLN0	2.5D-3		/標準計算時間幅 (DT)	
TSTEP	1.00000d+2		/出力間隔	
WSTEP	1.00000E+1		/FLOWout 出力間隔	
NTINT	3		/DT変更期間の数	
TINT1	3.8E5	4.0E5	2.0D-3	/TIMES, TIMEE, DLT
TINT2	4.0E5	4.2E5	5.0D-4	/TIMES, TIMEE, DLT
TINT3	4.2E5	4.5E5	5.0D-4	/TIMES, TIMEE, DLT

図 7.3 SCHERN の制御変数の入力の一列

**(c) HENRY 常数変数**

表 7.3 に SCHERN で使用する henry 定数を、図 7.4 にその入力の一列を示す。

表 7.3 SCHERN の Henry 定数[kmol/m<sup>3</sup>/kPa] (1/2)

入力変数	内容	備考	単位
HENNO	NO の定数項	推奨値 : 1.84d-5	
HENO2	O <sub>2</sub> の定数項	推奨値 : 1.30d-5	
HNENO2	NO <sub>2</sub> の定数項	推奨値 : 1.18d-4	
HENN2O3	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> の定数項	推奨値 : 5.98d-3	
HNEN2O4	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> の定数項	推奨値 : 1.38d-2	
HENHNO2	HNO <sub>2</sub> の定数項	推奨値 : 4.80d-1	
HENHNO3	HNO <sub>3</sub> の定数項	推奨値 : 2.10d+3	
HENRUO4	RuO <sub>4</sub> の定数項	推奨値 : 3.62d-3	s
HENRUO2	Ru[NO]の定数項	推奨値 : 0.00d+0	
EXPNO	NO の温度依存項の定数	推奨値 : 1500.0	
EXPO2	O <sub>2</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 1700.0	

表 7.3 SCHERN の Henry 定数[kmol/m<sup>3</sup>/kPa] (2/2)

入力変数	内容	備考	単位
EXPNO2	NO <sub>2</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 2500.0	
EXPN2O3	N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 0.000	
EXPN2O4	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 0.000	
EXPHNO2	HNO <sub>2</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 4800.0	
EXPHNO3	HNO <sub>3</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 8700.0	
EXPRUO4	RuO <sub>4</sub> の温度依存項の定数	推奨値 : 6420.0	
EXPRUO2	Ru[NO]の温度依存項定数	推奨値 : 0.000	

/HENNRY								
HENNO	HENO2	HNENO2	HENN2O3	HNEN2O4	HENHNO2	HENHNO3	HENRUO4	HENRUO2
1.84d-5	1.30d-5	1.18d-4	5.98d-3	1.38d-2	4.80d-1	2.10d+3	3.62d-3	0.00d+0
EXPNO	EXP02	EXPNO2	EXPN2O3	EXPN2O4	EXPHNO2	EXPHNO3	EXPRUO4	EXPRUO2
1500.0	1700.0	2500.0	0.000	0.000	4800.0	8700.0	6420.0	0.0

図 7.4 HENNRY 常数変数の入力の一例

(d) 解析対象空間の諸元

表 7.4 に解析対象空間の諸元に係る入力を、図 7.5 にその入力の一例を示す。

表 7.4 解析対象空間の諸元に係る入力

入力変数	内容	備考	単位
TEMP	初期温度		K
rgasgen	気体定数	推奨値 : 8.314472	
vtube	空間体積		m <sup>3</sup>
AFlow	流路面積		m <sup>2</sup>
Surface	気液界面面積	凝縮水発生時の気液界面	m <sup>2</sup>
SurfA	気液界面面積	凝縮水無発生時のプール水表面積	m <sup>2</sup>
PRESSER	圧力	デフォルト値 : 101.325	kPa

/FEX-JEX	Initial value setting+		
TEMP	333.15	/初期温度 ↓	
rgasgen	8.314472	/気体定数 ↓	
vtube	1.406D+2	/VOL体積(m <sup>3</sup> )	↓
AFlow	1.435D+1	/流路面積	↓
Surface	1.777D+2	/表面積(M <sup>2</sup> )	↓
SurfA	1.435D+1	/表面積(M <sup>2</sup> )	↓
PRESSER	101.3255	/圧力 ↓	

図 7.5 解析対象空間の諸元に係る入力の一例

(e) 気液各相の初期濃度

表 7.5 に気液各相の初期濃度に係る入力を、図 7.6 にその入力の一例を示す。

表 7.5 気液各相の初期濃度に係る入力

入力変数	内容	備考	単位
Y(1-21)	初期濃度	[NO][O <sub>2</sub> ][NO <sub>2</sub> ][N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ][N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> [H <sub>2</sub> O][HNO <sub>2</sub> ][HNO <sub>3</sub> ][N <sub>2</sub> ] [RuO <sub>4</sub> ] [RuO <sub>2</sub> ] [aqNO <sub>2</sub> ][aqN <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ][aqNO] [aqN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ][aqHNO <sub>2</sub> ][aqHNO <sub>3</sub> ] [aqO <sub>2</sub> ][aqH <sub>2</sub> O][aqRuO <sub>4</sub> ] [aqRuO <sub>2</sub> ]	kmol/m <sup>3</sup>

```

/initial values (初期濃度)
Y(GAS)No      O2      NO2      N2O4      N2O3      H2O      HNO2      HNO3      N2      RUO4      RUO2
1.000E-20  7.710E-03  0.000E+00  0.000E+00  0.000E+00  1.680E-03  0.000E+00  1.000E-20  3.080E-02  0.000E-00  0.000E-00
Y(liq)aqNo2  aqN2O4    aqNO     aqN2O3    aqHNO2    aqHNO3    aqO2     aqH2O    aqRUO4    aqRUO2
0.000E+00  0.000E+00  0.000E+00  0.000E+00  1.000E-04  0.100E+00  0.000E+00  0.000E+00  0.000E+00  0.000E+00
    
```

図 7.6 気液各相の初期濃度に係る入力の一例

(f) 気相部流入量

気相部への流入量が一定の場合、IXTYP = 1 として INIT.dat から読み込む。表 7.6 に気相部流入量に係る入力を、図 7.7 にその入力の一例を示す。IXTYP = 2 または = 3 を指定した場合は、入力が必要であるが解析には反映されない。

表 7.6 気相部流入量に係る入力

入力変数	内容	備考	単位
XIN (1-11)	流入量 (一定値)	IXTYP = 1 読み込 (下記入力順) [NO][O <sub>2</sub> ][NO <sub>2</sub> ][N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ][N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> [H <sub>2</sub> O][HNO <sub>2</sub> ][HNO <sub>3</sub> ][N <sub>2</sub> ][RuO <sub>4</sub> ] [RuO <sub>2</sub> ]	kg/s

```

/Gas phase inflow XIN(1-8)
NO      O2      NO2      N2O4      N2O3      H2O      HNO3      | HNO2      N2      RUO4      RUO2
0.000d-00  2.3810d-06  0.000d-0  0.000d+00  0.000d+00  0.000d-00  0.000d-00  | 0.000d+00  9.344d-06  0.000d+00  0.000d+00
    
```

図 7.7 気相部流入量に係る入力の一例

(g) 時間依存の境界条件の入力

表 7.7 に時間依存の境界条件として入力する変数を示す。図 7.8 に入力の一例を示す。

表 7.7 時間依存の境界条件として入力する変数

入力変数	内容	備考	単位
DataNO	時系列データ数		
時系列 data			
TIME	時間		s
AQFLOW	ミスト流出量	(5.17)式中の $outW_{ms}$ に対応	kg/s
Vcond	液相体積		m <sup>3</sup>
Vdcond	Vcond 変化率		m <sup>3</sup> /s
TEMP	気相温度		K
Vstm	気相体積		m <sup>3</sup>
TMPLIQ	液相温度		K
VELVAPCV	空間蒸気流速		m/s
VAPOR	蒸気量		kg

/TIME	AQFLOW	VCOND	Vdcond	TEMP	Vstm	TMPLIQ	VELVAPCV	VAPOR↓
data No	78↓							
0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.000E+02	1.406E+02	3.000E+02	0.000E+00	1.793E+00↓
1.001E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.002E+02	1.406E+02	3.002E+02	1.181E-02	1.797E+00↓
1.001E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.003E+02	1.406E+02	3.003E+02	4.083E-04	1.912E+00↓
1.001E+03	2.415E-04	2.120E-03	2.354E-06	3.142E+02	1.406E+02	3.142E+02	2.015E-03	7.584E+00↓
3.009E+03	1.280E-03	6.575E-02	3.169E-05	3.320E+02	1.405E+02	3.233E+02	4.799E-03	1.740E+01↓
5.009E+03	1.703E-03	2.443E-01	8.926E-05	3.437E+02	1.403E+02	3.317E+02	7.835E-03	2.840E+01↓
7.009E+03	3.284E-03	5.093E-01	1.325E-04	3.543E+02	1.401E+02	3.422E+02	1.127E-02	4.291E+01↓
9.009E+03	5.724E-03	8.275E-01	1.591E-04	3.659E+02	1.397E+02	3.555E+02	1.647E-02	6.522E+01↓
1.001E+04	4.113E-03	9.703E-01	1.428E-04	3.708E+02	1.396E+02	3.625E+02	2.180E-02	7.702E+01↓
3.004E+04	0.000E+00	1.530E+00	2.796E-05	3.749E+02	1.390E+02	3.719E+02	2.991E-02	8.258E+01↓
5.004E+04	0.000E+00	1.934E+00	2.019E-05	3.750E+02	1.386E+02	3.721E+02	3.014E-02	8.231E+01↓
7.004E+04	0.000E+00	2.280E+00	1.731E-05	3.751E+02	1.382E+02	3.721E+02	3.032E-02	8.206E+01↓
9.004E+04	0.000E+00	2.583E+00	1.514E-05	3.753E+02	1.379E+02	3.722E+02	3.035E-02	8.183E+01↓
1.100E+05	0.000E+00	2.852E+00	1.346E-05	3.754E+02	1.376E+02	3.723E+02	3.045E-02	8.162E+01↓
1.300E+05	0.000E+00	3.094E+00	1.211E-05	3.756E+02	1.374E+02	3.723E+02	3.037E-02	8.142E+01↓
1.500E+05	0.000E+00	3.315E+00	1.101E-05	3.757E+02	1.371E+02	3.723E+02	3.039E-02	8.123E+01↓

図 7.8 時間依存の境界条件として入力する変数の一例

(2) INFLOW.dat ファイルで入力する変数

化学種ごとの流入量読込オプション:IXTYP として、次のいずれかを指定した場合、INFLOW.dat ファイルを用いて入力する。単位は kg/s である。付録の付図 2 にサンプル入力を示す。

(a) IXTYP=2 (気相のみ) 流入量を指定

次の順で各変数を入力し、スペースにより区切る。図 7.9 に INFLOW.dat の例を示す。

TIME、NO、O<sub>2</sub>、NO<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>、N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、H<sub>2</sub>O、HNO<sub>2</sub>、HNO<sub>3</sub>、N<sub>2</sub>、RuO<sub>4</sub>、RuO<sub>2</sub>



気相→液相移行量計算項

	kno, kno2, ko2, kn2o3, kn2o4, khno2, khno3, kruo4, kruo2
Ru 物質移行係数	rc35c
計算指定 DT	DTLN
BODE 内 DT	BODEDT
液相流量	AQFLOW
液相流出量係数	AQDMP
気相流出量係数	GDMP
蒸気流速	VAPOR
気相濃度合計	MTOT
気相濃度合計初期値	MTOT0
気相体積	Vstm
VOL 体積	Vtube
圧力	PRE
出口流速	VELVAP
流路面積	AFlow
液相体積	Vcond
Vcond 微分値	Vdcond
初期温度	TEMP0
硝酸密度	RHO
硝酸最大濃度	HNO3max
気相部硝酸重量分率	Fg
硝酸密度	Tm < RHO * 1000.0 >
気相部硝酸モル分率	Fm < Fm = Y(8) / (Y(6) + Y(8)) >
計算状況確認 flg	CALflg
亜硝酸反応速度定数	RC11
亜硝酸移行変数	RC11dmp, RC11dmp2, RC11dmp3
計算状況確認 flg	ITESflg
液相最大濃度差分値	DYgNO, DYgNO2, DYgO2, DYgN2O4, DYgN2O3, DYgHNO2, DYgHNO, DYgRuO4, DygRuO2
計算確認用変数	tdmp1, tdmp2, tdmp3, tdmp4, tdmp5, tdmp6, tdmp7, tdmp8, tdmp9, tdmp10, tdmp11
液相流入力	AQIN-NO, AQIN-NO2, AQIN-O2, AQIN-N2O3, AQIN-N2O4, AQIN-HNO2, AQIN-HNO3, AQIN-RuO4, AQIN-Ru[NO]
液相流出量	AQOUT-NO, AQOUT-NO2, AQOUT-O2, AQOUT-N2O3, AQOUT-N2O4, AQOUT-HNO2, AQOUT-HNO3, AQOUT-RuO4, AQOUT-Ru[NO]
気相流入量	XIN[no], XIN[o2], XIN[no2], XIN[n2o4], XIN[n2o3], XIN[h2o], XIN[hno2], XIN[hno3], XIN[n2], XIN[ruo4], XIN[ru[NO]]
液相流入量	AQIN[NO], AQIN[NO2], AQIN[O2], AQIN[N2O3], AQIN[N2O4], AQIN[HNO2], AQIN[HNO3], AQIN[RuO4], AQIN[Ru[NO]]

流入 Ru 積算量	totRu
Ru 停留量	sumRu
Ru 流出量	XOUTIN(RuO4)
化学反応変化量	YDOTdmp(35), YDOTdmp(36), YDOTdmp(37), YDOTdmp(38), YDOTdmp(39), YDOTdmp(40), YDOTdmp(41), YDOTdmp(42)
流出速度(kmol/s)	XOUTIN(NO), XOUTIN(O2), XOUTIN(NO2), XOUTIN(N2O4), XOUTIN(N2O3), XOUTIN(H2O), XOUTIN(HNO2), XOUTIN(HNO3), XOUTIN(N2), XOUTIN(RuO4), XOUTIN(RuNO)

## (2) 計算結果の作図

SCHERN を実行することで作成される出力ファイルに書き込まれた各パラメータの経時変化のグラフを自動で作図する方法を次に示す。作図は Excel® のマクロ機能により実行される。

- (a) SCHERN\_plot.xlsx ファイルを実行結果ファイルと同じフォルダに格納する。
- (b) SCHERN\_plot.xlsx を起動し、シート[Graph 白黒]へ移動
- (c) シート[Graph 白黒]左上の  ボタンを押す
- (d) 図 7.11 に示すメッセージウィンドウが表示されたら、SCHERN の実行結果ファイル名を入力し OK を押す。



図 7.11 出力ファイル名の入力メッセージウィンドウ

上記の手順により、[Graph 白黒] 及び[Graph]シート上にグラフが作成される。作成されるグラフの一例をそれぞれ、図 7.12 及び図 7.13 に示す。

[Graph 白黒]シートには、図 7.12 に示すような気相濃度、液相濃度、gas 流入量、気相液相移行量の 5 種類のグラフが白黒で作成される。[Graph]シートには、図 7.13 にその一部のみを示しているが、計算結果の出力ファイルに書き込まれた全てのデータがそれぞれ作図される。

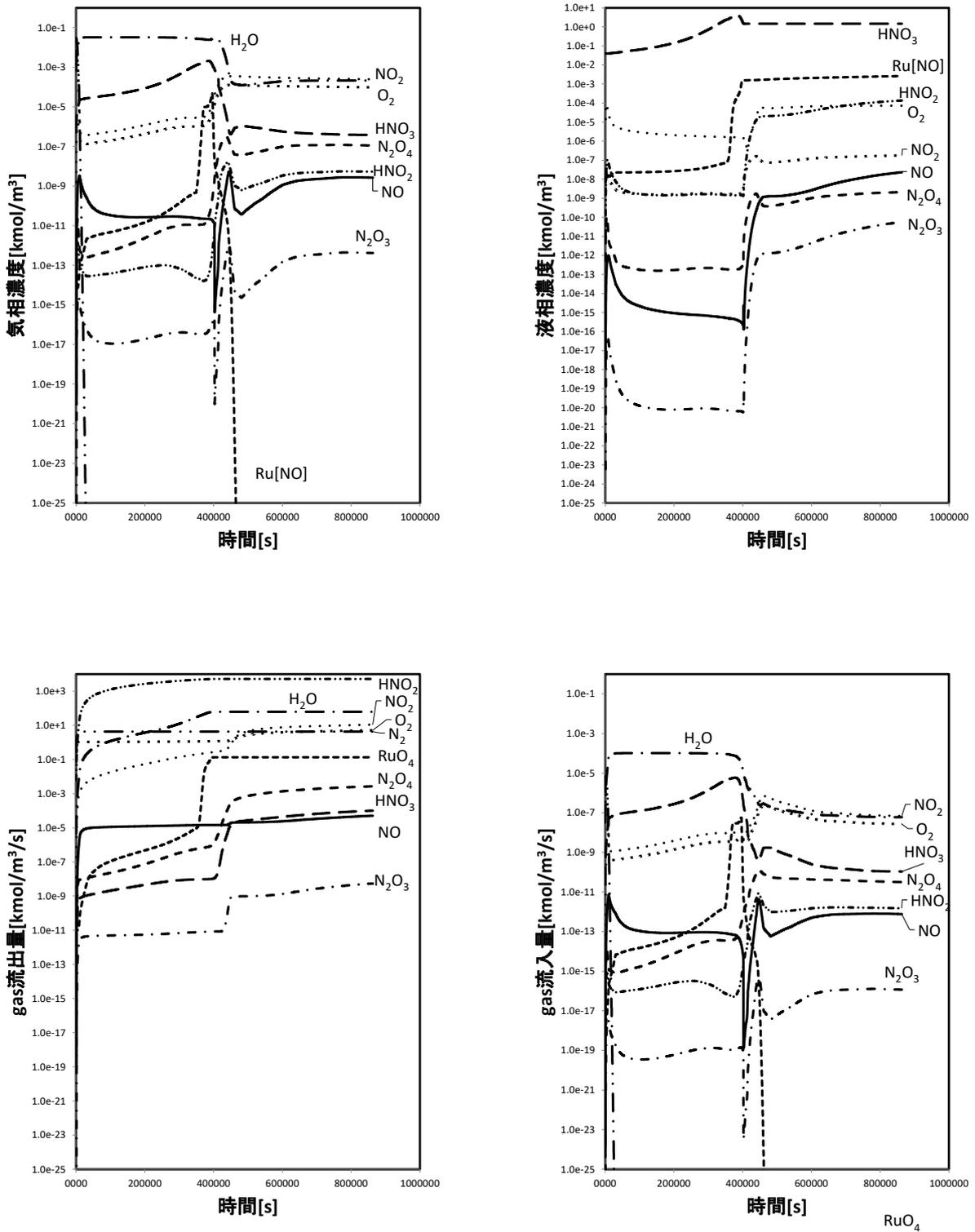


図 7.12 気相濃度、液相濃度、gas 流出量及び気相液相移行量の作図例

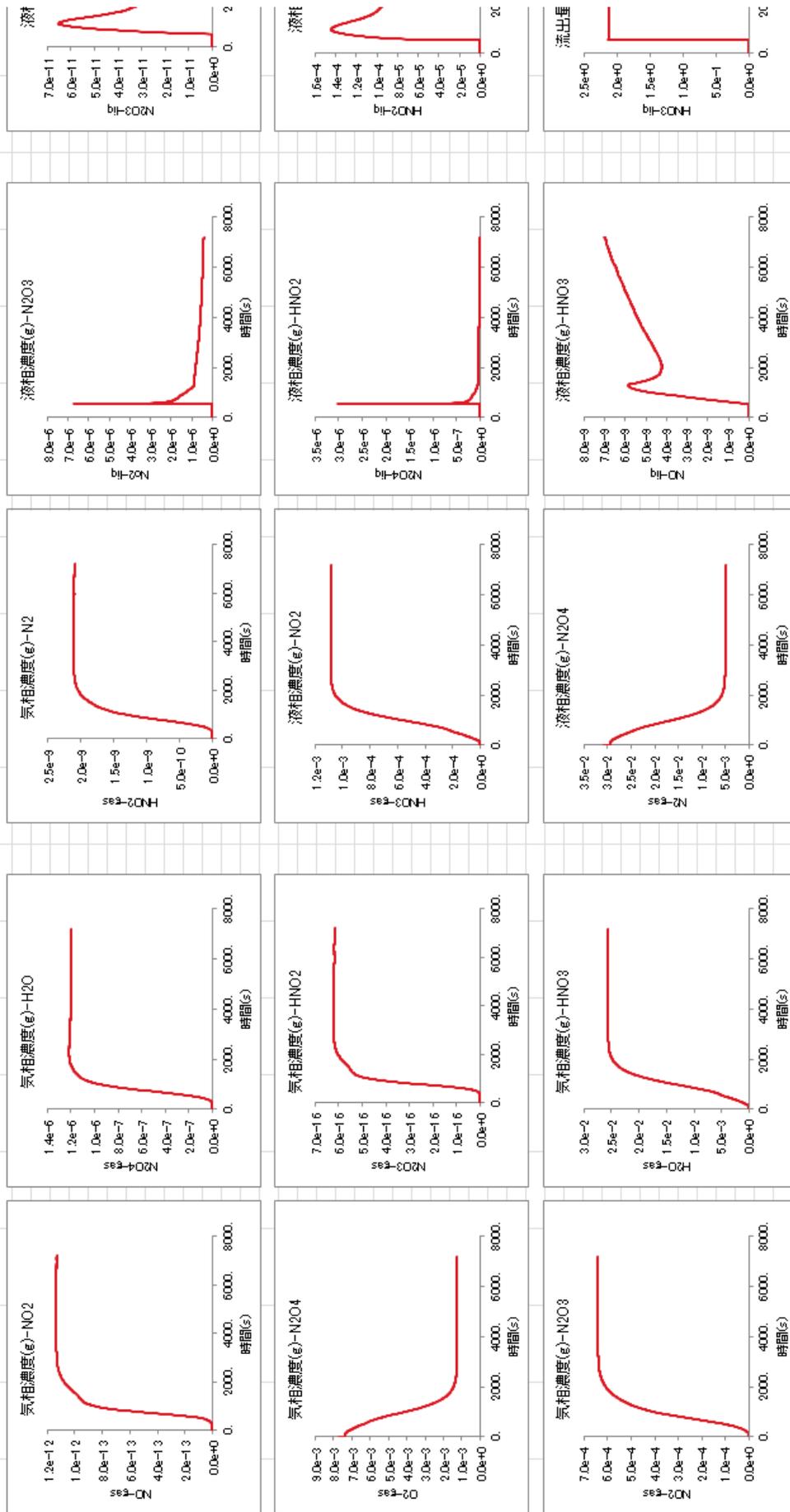


図 7.13 全出力結果の作図例 (一部のみ表示)

## 8. まとめ

再処理施設で想定される蒸発乾固事故を対象に、貯槽から流出する硝酸－水混合蒸気の施設内の熱流動を境界条件として、硝酸－水－NO<sub>x</sub>系での化学変化挙動を模擬する計算プログラム：SCHERNの開発・整備を進めている。

SCHERNと熱流動解析コードを組み合わせることで、気相への移行割合が大きいと考えられるRuの揮発性化学種の凝縮水への移行を解明するための実験データの分析に資するための実験解析ツールだけでなく、実規模施設内での化学変化挙動を解析するためのツールにも供し得る解析手法を整備した。

## 参考文献

- 1) 「再処理施設における放射性物質移行挙動に係る研究」運営管理グループ，“再処理施設における放射性物質移行挙動に係る研究報告書”，2014.
- 2) T. Kato et al., “Study on volatilization mechanism of ruthenium tetroxide from nitrosyl ruthenium nitrate by using mass spectrometer,” J. Nucl. Mater., 479, pp. 123-129, 2016.
- 3) 日本原子力研究開発機構，“平成29年度原子力施設等防災対策等委託費（再処理施設内での放射性物質の移行挙動に係る試験等）事業 事業報告書 平成30年3月”，2018,  
<https://www.nsr.go.jp/data/000256373.pdf>, (閲覧:2019/03/31).
- 4) 日本原子力研究開発機構，“平成31年度原子力施設等防災対策等委託費（再処理施設内での放射性物質の移行挙動に係る試験等）事業 事業報告書 令和2年3月”，2020,  
<https://www.nsr.go.jp/data/000319224.pdf>, (閲覧:2021/03/31).
- 5) 桧山 美奈 他，“SCHERN：再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故でのNO<sub>x</sub>の化学的挙動解析プログラム”，JAEA-Data/Code 2019-006, 2019, 17p.
- 6) 日本原燃株式会社，“再処理事業指定申請書及び同添付書類”，平成元年3月申請（平成8年4月，同13年7月，同16年10月変更許可申請）。
- 7) 宮田 敬士 他，“六ヶ所再処理工場の確率論的安全評価，(II) 高レベル濃縮廃液沸とう事故の発生頻度評価（内的事象）”，日本原子力学会和文論文誌，Vol.7, No.2, 2008, pp.85-98.
- 8) 吉田 一雄, 石川 淳，“MELCORコードを用いた再処理施設の廃液沸騰事象解析”，JAEA-Research 2012-026, 2012, 25p.
- 9) M. Philippe, et al., “Behavior of Ruthenium in the Case of Shutdown of the Cooling System of HLLW Storage Tanks,” Proc. of 21th DOE/NRC Nucl. Air Cleaning Conf., San Diego, CA, Aug., 1990, NUREG/CP-0116, Vol. 2, 1991, pp. 831-843.
- 10) J.A. Patwardhan, J. B. Joshi, “Unified Model for NO<sub>x</sub> Absorption in Aqueous Alkaline and Dilute Acidic Solutions,” AIChE J., Vol. 49, No. 11, 2003, pp. 2728-2748.
- 11) K.G. Loutet et al., “Experimental Measurements and Mass Transfer/Reaction Modeling for an Industrial NO<sub>x</sub> Absorption Process,” Ind. Eng. Chem. Res., Vol.50, No.4, 2011, pp. 2192-2203.
- 12) National Institute of Standards and Technology, NIST Chemistry WebBook,  
DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>, (accessed March 30, 2021).
- 13) Whiteman W.G. “A preliminary experimental confirmation of the two-film theory of gas adsorption,”

- Chem. Metall. Eng. Vol.29, No.4, 1923, pp.146-148.
- 14) 大江 修造, “物性推算法”, データブック出版社, ISBN4-902209-02-0, 2002, 404p.
  - 15) 吉田 一雄 他, “再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故での NO<sub>x</sub> の化学挙動を考慮した Ru の移行挙動解析”, JAEA-Research 2021-005, 2021, 25p.
  - 16) R. O. Gauntt, et al., “MELCOR Computer Code Manuals, Reference Manuals, Version 1.8.5,” NUREG/CR-6119, Vol. 2, Rev. 2, SAND2000-2417/2, 2000.
  - 17) 吉田 一雄, “重大事故対処策を考慮した再処理施設の蒸発乾固事故解析”, JAEA-Research 2016-004, 2016, 15p.
  - 18) 吉田 一雄 他, “再処理施設の高レベル廃液蒸発乾固事故での FP 硝酸塩の脱硝に伴い発生する NO<sub>x</sub> の化学的挙動解析”, 日本原子力学会和文論文誌, Vol.18, No.2, 2019, pp. 69-80.
  - 19) P. N. Brown et al., Original DVODE Documentation Prologue, [https://www.radford.edu/~thompson/vodef90web/Documentation/Original\\_Prologue.txt](https://www.radford.edu/~thompson/vodef90web/Documentation/Original_Prologue.txt), (accessed March 31, 2021).
  - 20) S. Thompson et al, VODE F90 Source Code, <https://www.radford.edu/~thompson/vodef90web/vodef90source/misc.html>, (accessed March 31, 2021).

付録

1	/XIN-TYPE↓										
2	IXTYP	3	/1:Gas phase inflow 下で指定 2:ファイルよりタイムステップ毎に読込↓								
3	↓										
4	/DB2SUB INPUT DATA↓										
5	ITASK	1↓									
6	ISTATE	1↓									
7	IOPT	0↓									
8	ITOL	2↓									
9	T	0.000D+00↓									
10	TINI	1.660D-03↓									
11	TOUT	0.000D+00↓									
12	RTOL	1.000D-4↓									
13	ATOL	1.000D-16↓									
14	↓										
15	/TIME STEP SETTING↓										
16	TEND	4.3700D+5								/計算終了時間↓	
17	DTNLO	2.5D-3								/標準計算時間幅 (DT) ↓	
18	TSTEP	1.0000D+2								/出力間隔↓	
19	WSTEP	1.0000E+1								/FLOWout出力間隔 ↓	
20	NTINT	3								/DT変更期間の枚↓	
21	TINT1	3.8E5	4.0E5	2.0D-3						/TIMES, TIMEE, DLT↓	
22	TINT2	4.0E5	4.2E5	5.0D-4						/TIMES, TIMEE, DLT↓	
23	TINT3	4.2E5	4.5E5	5.0D-4						/TIMES, TIMEE, DLT↓	
24	↓										
25	/HENNRY↓										
26	HENNO	HENO2	HNENO2	HENN203	HNEN204	HENHNO2	HENHNO3	HENRU04	HENRU02↓		
27	1.84d-5	1.30d-5	1.18d-4	5.98d-3	1.38d-2	4.80d-1	2.10d+3	3.62d-3	0.00d+0↓		
28	EXPNO	EXP02	EXPNO2	EXPN203	EXPN204	EXPHNO2	EXPHNO3	EXPRU04	EXPRU02↓		
29	1500.0	1700.0	2500.0	0.000	0.000	4800.0	8700.0	6420.0	0000.0↓		
30	↓										
31	/FEX-JEX Initial value setting↓										
32	TEMP	333.15								/初期温度 ↓	
33	rgasgen	8.314472								/気体定数↓	
34	vtube	1.406D+2								/VOL体積(m^3) ↓	
35	AFlow	1.435D+1								/流路面積 ↓	
36	Surface	1.777D+2								/表面積(M^2) ↓	
37	SurfA	1.435D+1								/表面積(M^2) ↓	
38	PRESSER	101.3255								/圧力↓	
39	↓										
40	/initial values (初期濃度) ↓										
41	Y(GAS)No	O2	NO2	N2O4	N2O3	H2O	HNO2	HNO3	N2	RU04	RU02↓
42	1.000E-20	7.682E-03	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.073E-02	0.000E-02	0.000E-02↓
43	Y(liq)adNo	adN2O4	adNO	adN2O3	adHNO2	adHNO3	adO2	adH2O	adRU04	adRU02↓	
44	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00↓	
45	↓										
46	/Gas phase inflow XIN(1-8) ↓										
47	NO	O2	NO2	N2O4	N2O3	H2O	HNO3	HNO2	N2	RU04	RU02 ↓
48	0.000d-00	2.760d-06	1.710d-07	0.000d+00	0.000d+00	1.710d-05	4.210d-05	0.000d+00	9.670d-06	0.000d+00	0.000d+00↓
49	↓										
50	/TIME AQFLOW VCOND Vdcond TEMP Vstm TMPLIQ VELVAPCV VAPOR↓										
51	data No	78↓									
52	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.000E+02	1.406E+02	3.000E+02	0.000E+00	1.793E+00↓		
53	1.001E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.002E+02	1.406E+02	3.002E+02	1.181E-02	1.797E+00↓		
54	1.001E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	3.003E+02	1.406E+02	3.003E+02	4.083E-04	1.912E+00↓		
55	1.001E+03	2.415E-04	2.120E-03	2.354E-06	3.142E+02	1.406E+02	3.142E+02	2.015E-03	7.584E+00↓		
56	3.009E+03	1.280E-03	6.575E-02	3.169E-05	3.320E+02	1.405E+02	3.233E+02	4.799E-03	1.740E+01↓		
57	5.009E+03	1.703E-03	2.443E-01	8.926E-05	3.437E+02	1.403E+02	3.317E+02	7.835E-03	2.840E+01↓		
58	7.009E+03	3.284E-03	5.093E-01	1.325E-04	3.543E+02	1.401E+02	3.422E+02	1.127E-02	4.291E+01↓		
59	9.009E+03	5.724E-03	8.275E-01	1.591E-04	3.659E+02	1.397E+02	3.555E+02	1.647E-02	6.522E+01↓		
60	1.001E+04	4.113E-03	9.703E-01	1.428E-04	3.708E+02	1.396E+02	3.625E+02	2.180E-02	7.702E+01↓		
61	3.004E+04	0.000E+00	1.530E+00	2.796E-05	3.749E+02	1.390E+02	3.719E+02	2.991E-02	8.258E+01↓		
62	5.004E+04	0.000E+00	1.934E+00	2.019E-05	3.750E+02	1.386E+02	3.721E+02	3.014E-02	8.231E+01↓		
63	7.004E+04	0.000E+00	2.280E+00	1.731E-05	3.751E+02	1.382E+02	3.721E+02	3.032E-02	8.206E+01↓		
64	9.004E+04	0.000E+00	2.583E+00	1.514E-05	3.753E+02	1.379E+02	3.722E+02	3.035E-02	8.183E+01↓		
65	1.100E+05	0.000E+00	2.852E+00	1.346E-05	3.754E+02	1.376E+02	3.723E+02	3.045E-02	8.162E+01↓		
66	1.300E+05	0.000E+00	3.094E+00	1.211E-05	3.756E+02	1.374E+02	3.723E+02	3.037E-02	8.142E+01↓		
67	1.500E+05	0.000E+00	3.315E+00	1.101E-05	3.757E+02	1.371E+02	3.723E+02	3.039E-02	8.123E+01↓		
68	1.700E+05	0.000E+00	3.516E+00	1.007E-05	3.759E+02	1.369E+02	3.723E+02	3.036E-02	8.103E+01↓		
69	1.900E+05	0.000E+00	3.702E+00	9.278E-06	3.762E+02	1.367E+02	3.724E+02	3.033E-02	8.083E+01↓		
70	2.100E+05	0.000E+00	3.873E+00	8.567E-06	3.765E+02	1.365E+02	3.724E+02	3.033E-02	8.063E+01↓		
71	2.300E+05	0.000E+00	4.032E+00	7.962E-06	3.768E+02	1.364E+02	3.724E+02	3.028E-02	8.042E+01↓		
72	2.500E+05	0.000E+00	4.179E+00	7.359E-06	3.772E+02	1.362E+02	3.724E+02	3.033E-02	8.018E+01↓		
73	2.700E+05	0.000E+00	4.315E+00	6.766E-06	3.777E+02	1.361E+02	3.724E+02	3.030E-02	7.993E+01↓		
74	2.900E+05	0.000E+00	4.439E+00	6.234E-06	3.784E+02	1.360E+02	3.724E+02	3.044E-02	7.967E+01↓		
75	3.100E+05	0.000E+00	4.552E+00	5.613E-06	3.792E+02	1.358E+02	3.724E+02	3.089E-02	7.938E+01↓		
76	3.300E+05	0.000E+00	4.651E+00	4.991E-06	3.801E+02	1.357E+02	3.724E+02	3.142E-02	7.910E+01↓		
77	3.500E+05	0.000E+00	4.740E+00	4.407E-06	3.811E+02	1.356E+02	3.724E+02	3.157E-02	7.883E+01↓		
78	3.600E+05	0.000E+00	4.778E+00	3.882E-06	3.817E+02	1.356E+02	3.724E+02	3.123E-02	7.865E+01↓		
79	3.601E+05	0.000E+00	4.778E+00	1.000E-06	3.816E+02	1.356E+02	3.724E+02	3.111E-02	7.868E+01↓		
80	3.601E+05	0.000E+00	4.779E+00	4.000E-06	3.814E+02	1.356E+02	3.724E+02	3.113E-02	7.872E+01↓		
81	3.602E+05	0.000E+00	4.779E+00	4.167E-06	3.812E+02	1.356E+02	3.724E+02	3.113E-02	7.877E+01↓		
82	3.700E+05	0.000E+00	4.816E+00	3.774E-06	3.818E+02	1.356E+02	3.724E+02	2.954E-02	7.860E+01↓		
83	3.800E+05	0.000E+00	4.846E+00	3.024E-06	3.836E+02	1.355E+02	3.724E+02	2.791E-02	7.808E+01↓		
84	3.900E+05	0.000E+00	4.866E+00	1.927E-06	3.842E+02	1.355E+02	3.723E+02	1.933E-02	7.749E+01↓		
85	4.000E+05	0.000E+00	4.877E+00	1.180E-06	3.790E+02	1.355E+02	3.720E+02	5.570E-03	7.567E+01↓		
86	4.010E+05	0.000E+00	4.878E+00	5.044E-07	3.786E+02	1.355E+02	3.719E+02	4.850E-03	7.514E+01↓		
87	4.020E+05	0.000E+00	4.878E+00	3.200E-07	3.763E+02	1.355E+02	3.718E+02	3.276E-03	7.461E+01↓		

付図 1 サンプル入力 (INIT.dat) (1/2)

	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100	110	120
85	4.000E+05	0.000E+00	4.877E+00	1.180E-06	3.790E+02	1.355E+02	3.720E+02	5.570E-03	7.567E+01	↓		
86	4.010E+05	0.000E+00	4.878E+00	5.044E-07	3.786E+02	1.355E+02	3.719E+02	4.850E-03	7.514E+01	↓		
87	4.020E+05	0.000E+00	4.878E+00	3.200E-07	3.763E+02	1.355E+02	3.718E+02	3.276E-03	7.461E+01	↓		
88	4.030E+05	0.000E+00	4.877E+00	-9.500E-07	3.755E+02	1.355E+02	3.717E+02	2.866E-03	7.377E+01	↓		
89	4.040E+05	0.000E+00	4.876E+00	-1.140E-06	3.747E+02	1.355E+02	3.715E+02	2.433E-03	7.295E+01	↓		
90	4.050E+05	0.000E+00	4.875E+00	-1.300E-06	3.740E+02	1.355E+02	3.714E+02	2.113E-03	7.205E+01	↓		
91	4.060E+05	0.000E+00	4.873E+00	-1.460E-06	3.733E+02	1.355E+02	3.712E+02	1.829E-03	7.113E+01	↓		
92	4.070E+05	0.000E+00	4.872E+00	-1.620E-06	3.728E+02	1.355E+02	3.710E+02	1.687E-03	7.018E+01	↓		
93	4.080E+05	0.000E+00	4.870E+00	-1.750E-06	3.722E+02	1.355E+02	3.708E+02	1.560E-03	6.924E+01	↓		
94	4.090E+05	0.000E+00	4.868E+00	-1.870E-06	3.717E+02	1.355E+02	3.705E+02	1.433E-03	6.826E+01	↓		
95	4.100E+05	0.000E+00	4.866E+00	-1.990E-06	3.712E+02	1.355E+02	3.703E+02	1.309E-03	6.723E+01	↓		
96	4.110E+05	0.000E+00	4.864E+00	-2.100E-06	3.703E+02	1.355E+02	3.700E+02	1.039E-03	6.603E+01	↓		
97	4.120E+05	0.000E+00	4.862E+00	-2.260E-06	3.696E+02	1.355E+02	3.697E+02	9.146E-04	6.470E+01	↓		
98	4.130E+05	0.000E+00	4.859E+00	-2.410E-06	3.690E+02	1.355E+02	3.694E+02	7.848E-04	6.329E+01	↓		
99	4.140E+05	0.000E+00	4.857E+00	-2.570E-06	3.684E+02	1.355E+02	3.691E+02	7.428E-04	6.180E+01	↓		
100	4.150E+05	0.000E+00	4.854E+00	-2.740E-06	3.680E+02	1.355E+02	3.688E+02	7.040E-04	6.035E+01	↓		
101	4.160E+05	0.000E+00	4.851E+00	-2.850E-06	3.675E+02	1.356E+02	3.684E+02	6.646E-04	5.891E+01	↓		
102	4.170E+05	0.000E+00	4.848E+00	-3.000E-06	3.672E+02	1.356E+02	3.681E+02	6.771E-04	5.759E+01	↓		
103	4.180E+05	0.000E+00	4.845E+00	-3.090E-06	3.669E+02	1.356E+02	3.677E+02	6.865E-04	5.641E+01	↓		
104	4.190E+05	0.000E+00	4.842E+00	-3.210E-06	3.667E+02	1.356E+02	3.673E+02	7.978E-04	5.511E+01	↓		
105	4.200E+05	0.000E+00	4.838E+00	-3.410E-06	3.666E+02	1.356E+02	3.669E+02	9.121E-04	5.361E+01	↓		
106	4.300E+05	0.000E+00	4.798E+00	-4.039E-06	3.652E+02	1.356E+02	3.624E+02	1.232E-03	4.141E+01	↓		
107	4.400E+05	0.000E+00	4.750E+00	-4.761E-06	3.676E+02	1.357E+02	3.575E+02	2.687E-03	2.921E+01	↓		
108	4.600E+05	0.000E+00	4.597E+00	-7.669E-06	4.160E+02	1.359E+02	3.454E+02	1.923E-02	7.317E+00	↓		
109	4.800E+05	0.000E+00	4.378E+00	-7.652E-06	4.179E+02	1.361E+02	3.383E+02	1.478E-02	6.799E+00	↓		
110	5.000E+05	0.000E+00	4.226E+00	-7.644E-06	4.107E+02	1.363E+02	3.364E+02	1.113E-02	7.830E+00	↓		
111	5.200E+05	0.000E+00	4.095E+00	-6.528E-06	4.048E+02	1.364E+02	3.360E+02	9.012E-03	8.765E+00	↓		
112	5.400E+05	0.000E+00	3.978E+00	-5.871E-06	4.003E+02	1.365E+02	3.361E+02	7.607E-03	9.621E+00	↓		
113	5.600E+05	0.000E+00	3.873E+00	-5.240E-06	3.945E+02	1.367E+02	3.363E+02	6.184E-03	1.068E+01	↓		
114	5.800E+05	0.000E+00	3.780E+00	-4.636E-06	3.892E+02	1.367E+02	3.366E+02	5.042E-03	1.175E+01	↓		
115	6.000E+05	0.000E+00	3.699E+00	-4.040E-06	3.844E+02	1.368E+02	3.369E+02	4.185E-03	1.280E+01	↓		
116	6.200E+05	0.000E+00	3.625E+00	-3.724E-06	3.819E+02	1.369E+02	3.372E+02	3.833E-03	1.332E+01	↓		
117	6.400E+05	0.000E+00	3.555E+00	-3.485E-06	3.796E+02	1.370E+02	3.374E+02	3.497E-03	1.384E+01	↓		
118	6.600E+05	0.000E+00	3.489E+00	-3.323E-06	3.785E+02	1.370E+02	3.375E+02	3.390E-03	1.407E+01	↓		
119	6.800E+05	0.000E+00	3.424E+00	-3.228E-06	3.776E+02	1.371E+02	3.375E+02	3.281E-03	1.429E+01	↓		
120	7.000E+05	0.000E+00	3.361E+00	-3.133E-06	3.768E+02	1.372E+02	3.376E+02	3.168E-03	1.451E+01	↓		
121	7.200E+05	0.000E+00	3.301E+00	-3.037E-06	3.760E+02	1.372E+02	3.376E+02	3.049E-03	1.475E+01	↓		
122	7.400E+05	0.000E+00	3.242E+00	-2.940E-06	3.751E+02	1.373E+02	3.377E+02	2.925E-03	1.501E+01	↓		
123	7.600E+05	0.000E+00	3.185E+00	-2.841E-06	3.742E+02	1.374E+02	3.378E+02	2.799E-03	1.529E+01	↓		
124	7.800E+05	0.000E+00	3.130E+00	-2.762E-06	3.738E+02	1.374E+02	3.379E+02	2.760E-03	1.545E+01	↓		
125	8.000E+05	0.000E+00	3.075E+00	-2.737E-06	3.737E+02	1.375E+02	3.380E+02	2.743E-03	1.555E+01	↓		
126	8.200E+05	0.000E+00	3.021E+00	-2.712E-06	3.735E+02	1.375E+02	3.380E+02	2.726E-03	1.565E+01	↓		
127	8.400E+05	0.000E+00	2.967E+00	-2.690E-06	3.735E+02	1.376E+02	3.380E+02	2.708E-03	1.578E+01	↓		
128	8.600E+05	0.000E+00	2.914E+00	-2.669E-06	3.734E+02	1.376E+02	3.381E+02	2.688E-03	1.588E+01	↓		
129	8.630E+05	0.000E+00	2.906E+00	-2.657E-06	3.734E+02	1.376E+02	3.381E+02	2.685E-03	1.590E+01	↓		
130												
131	[EOF]											

付図 1 サンプル入力 (INIT.dat) (2/2)





This is a blank page.



