

JAERI-Data/Code
96-030



REACT-Mod：
U-Pu-Np-Tc-硝酸水溶液系化学反応の過渡計算モデル

1996年10月

館盛勝一・北村竜明*

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1996

編集兼発行 日本原子力研究所

印 刷 いばらき印刷株

R E A C T - Mod :

U-Pu-Np-Tc-硝酸水溶液系化学反応の過渡計算モデル

日本原子力研究所東海研究所燃料サイクル安全工学部

館盛 勝一・北村 竜明*

(1996年8月28日受理)

様々な原子価のウラン、プルトニウム、ネプツニウム、テクネチウム等が共存する硝酸水溶液系において進行する化学反応：酸化・還元反応、放射線化学反応、不均化反応（全部で68種）を、速度論的に追跡するシミュレーションコード：R E A C T - Modを開発した。ここで採用した数値解法は、速度式の常微分方程式を修正Porsing法で解く純速度論モデルと部分平衡論（Two step modelによる）モデルがあり、前者のみに硝酸水溶液の放射線化学反応式（27個）が組み込んである。計算実行時にどちらのモデルを使うかを選択する。この報告書は、R E A C T - Modのモデルの概要や内容の説明のみならず、プログラム使用者への手引きをも兼ねている。

REACT-Mod:

A Mathematical Model for Transient Calculation of Chemical Reactions
with U-Pu-Np-Tc in the Aqueous Nitric Acid Solution

Shoichi TACHIMORI and Tatsuaki KITAMURA*

Department of Fuel Cycle Safety Research
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 28, 1996)

A computer code REACT-Mod which simulates various chemical reactions in an aqueous nitric acid solution involving uranium, plutonium, neptunium, technetium etc. e.g., redox, radiolytic and disproportionation reactions of 68, was developed based on the kinetics model. The numerical solution method adopted in the code are two, a kinetics model totally based on the rate law of which differential equations are solved by the modified Porsing method, and a two-step model based on both the rate law and equilibrium law. Only the former treats 27 radiolytic reactions. The latter is beneficially used to have a quick and approximate result by economical computation. The present report aims not only to explain the concept, chemical reactions treated and characteristics of the model but also to provide details of the program for users of the REACT-Mod code.

Keywords: Numerical Simulation, Mathematical Model, REACT-Mod Code, Actinide Elements, Uranium, Plutonium, Neptunium, Technetium, Nitric Acid, Redox Reaction, Radiolytic Reaction, Disproportionation Reaction, Kinetic Model, Rate Law, Two-step Model, User Manual

* CATENA Co. Ltd.

目 次

1. 序 論	1
2. R E A C T - Modコードの概要	2
2.1 化学反応と速度式	2
2.2 計算モデル	7
2.2.1 化学種	7
2.2.2 反応速度式	8
2.2.3 成分濃度変化量	12
2.2.4 Jacobian解析解	14
2.3 部分平衡論改良モデル	33
2.3.1 Two-step Modelの概要	33
3. プログラムの概要	35
3.1 システム構成	35
3.2 木構造と処理フロー	38
3.3 入力カード	39
3.4 入力データ例	44
3.5 化学量論係数	49
3.6 J C L	55
3.6.1 ロードモジュール作成J C L	55
3.6.2 計算実行J C L	56
3.6.3 作図実行J C L	57
4. 計算結果例	58
5. 結 論	60
参考文献	60
付録	
A. リスタート計算の方法	62
A. 1 繰り返し自動計算	62
A. 2 J C L	63
A. 2.1 リスタート計算実行J C L	63
A. 2.2 作図実行J C L	67
A. 3 入力データ例	68
A. 4 サブルーチン	70
A. 5 コモン	71

B. REACT-Modのサブルーチンとコモン	72
B. 1 サブルーチン	72
B. 2 コモン	74
C. REACT-Modのソースプログラム	83

Contents

1. Introduction	1
2. REACT-Mode Code	2
2. 1 Chemical Reactions and Rate Equations	2
2. 2 Mathematical Model	7
2. 2. 1 Chemical Species	7
2. 2. 2 Rate Equations	8
2. 2. 3 Variable Quantities of Component-concentration	12
2. 2. 4 Analytic Solution of Jacobian	14
2. 3 Modified Partial Equilibrium Model	33
2. 3. 1 Two-step Model	33
3. Description of Program	35
3. 1 System Coordination	35
3. 2 Tree Structure and Process Flow	38
3. 3 Input Cards	39
3. 4 Input Data	44
3. 5 Stoichiometric Coefficients	49
3. 6 JCL	55
3. 6. 1 JCL for Construction of Load Module	55
3. 6. 2 JCL for Execution of Calculation	56
3. 6. 3 JCL for Execution of Drawing	57
4. Example of Calculation	58
5. Conclusion	60
References	60
Appendix	
A. Restart Calculation	62
A. 1 Automatic Repeating Mode	62
A. 2 JCL	63
A. 2. 1 JCL for Calculation by Automatic Repeating Mode	63
A. 2. 2 JCL for Execution of Drawing	67
A. 3 Input Data	68
A. 4 Subroutine	70
A. 5 Common	71

B. Subroutine and Common of REACT-Mod	72
B. 1 Subroutine	72
B. 2 Common	74
C. Source Program of REACT-Mod	83

1 序論

核燃料サイクルでは、使用済み核燃料の再処理をはじめ、廃棄物処理および群分離等の化学プロセスにおいて、アクチノイドや核分裂生成物の溶液化学が非常に重要な役割を担っている。特に硝酸水溶液系におけるこれら元素の挙動については、現行プロセスの改良・評価をはじめ、新しいプロセス開発において十分な知見が要求される。しかしながら、上記アクチノイド等の化学は非常に複雑であり、それらの一次データを全てデータベース化するならば、化学便覧の様に大容量のデータベースになる事が予想される。その種のデータベースは、既存の特性データの再現においては大変有用であるが、未知の系の予測を出来るだけ正確にしたい時には、必ずしも便利とは言えない。

そこで著者は、『多くの知識を結実したモデル』の開発が極めて有用であると考え、これ迄に、第一段階であるマクロスケールのモデル開発を行ってきた。それらは、ピュレックス再処理抽出系の分配比モデル (DIST)¹⁾、化学反応モデル (REACT)²⁾、そして抽出工程モデル (EXTRA・M)³⁾ である。第二段階はミクロスケールの原子（量子化学）モデルであり、第三段階はメソスケールの溶液（分子動力学）モデルである。

ところで、化学反応モデルについては、まず初めに、多くの成分が関与しつつ、同時に進行する多数の化学反応の過渡計算を行なう数学的方法論を開発し (JAERI-M 90-018)²⁾、この系が硬いことから、計算時間の短縮をねらった部分平衡論モデルを検討した (JAERI-M 93-056)⁴⁾。

これらの成果をふまえ、その後、化学反応モデルについてさらにいくつかの改良を行った。
すなわち

- i) 硝酸水溶液系の放射線化学的プロセス（ラジカル反応等）の大幅導入、
- ii) テクネチウムが関与する反応の導入、そして
- iii) 計算時間の短縮のために部分平衡論モデル⁴⁾の欠点を改良した Two-step model の確立である。

本報告は、上記改良に基づき完成した新しいコード;REACT-Mod の解説を目的としている。さらに、本コードの利用者のために、使用の際に必要な事項も出来るだけ記述した。基本的事項の解説では、前の 2 報^{2),4)}と重複する事のないように配慮したので、より良く理解するためには、それらを参照されることを勧めたい。

2 REACT-Mod コードの概要

REACT-Modにおいては次の2種類の組合せ計算を選択することができる。

ケース1. : U-Pu-Np-Rad(放射線化学反応)系についての速度論計算

ケース2. : U-Pu-Np-Tc-Zr系についてtwo step modelに基づく部分平衡論計算あるいは速度論計算

2.1 化学反応と速度式

REACT-Modでは、以下に示す化学反応式(速度式)を計算することが出来る。化学量論係数、反応速度定数及びG値は、3.5章に示す。

<ケース1. の場合>

1. $2\text{Pu(IV)} + \text{U(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Pu(III)} + \text{U(VI)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_1[\text{Pu(IV)}][\text{U(IV)}]/([\text{HNO}_3]+0.05)^2$
2. $2\text{Pu(IV)} + 2\text{NH}_3\text{OH}^+ \longrightarrow 2\text{Pu(III)} + 4\text{HNO}_3 + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_2[\text{Pu(IV)}]^2[\text{NH}_3\text{OH}^+]^2/\{[\text{Pu(III)}]^2[\text{HNO}_3]^4(\text{C}_N+0.35)^2\}$
3. $2\text{Pu(IV)} + 2\text{N}_2\text{H}_5^+ \longrightarrow 2\text{Pu(III)} + 2\text{NH}_4^+ + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_3[\text{Pu(IV)}][\text{N}_2\text{H}_5^+]/([\text{HNO}_3]+0.35)$
4. $2\text{Pu(III)} + 2\text{HNO}_3 \longrightarrow 2\text{Pu(IV)} + \text{HNO}_2$
 $k_4[\text{Pu(III)}][\text{HNO}_2]^{0.5}[\text{HNO}_3]^{0.5}\text{C}_N^{0.4}$
5. $2\text{HNO}_2 + \text{N}_2\text{H}_5^+ \longrightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{N}_2 + 3\text{H}_2\text{O} + \text{HNO}_3$
 $k_5[\text{HNO}_2][\text{N}_2\text{H}_5^+][\text{HNO}_3]$
6. $\text{Np(VI)} + \text{Np(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Np(V)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_6[\text{Np(IV)}][\text{Np(VI)}](2.16+12.5\text{C}_N)$
7. $\text{Pu(IV)} + \text{Np(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{Pu(III)} + \text{Np(V)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_7[\text{Np(IV)}][\text{Pu(IV)}][\text{HNO}_3]^{-4}$
8. $\text{Np(VI)} + \text{N}_2\text{H}_5^+ \longrightarrow \text{Np(V)} + \text{N}_2 + \text{HNO}_3$
 $k_8[\text{Np(VI)}][\text{N}_2\text{H}_5^+][\text{HNO}_3]^{-1.3}$
9. $2\text{Np(VI)} + \text{U(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Np(V)} + \text{U(VI)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_9[\text{Np(VI)}][\text{U(IV)}]$
10. $2\text{Np(V)} + \text{U(IV)} + 4\text{HNO}_3 \longrightarrow 2\text{Np(IV)} + \text{U(VI)} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{10}[\text{Np(V)}][\text{U(IV)}](1.6[\text{HNO}_3]^{-2}+1.42[\text{HNO}_3])$
11. $\text{Np(VI)} + \text{NH}_3\text{OH}^+ \longrightarrow \text{Np(V)} + \text{HNO}_3 + \text{N}_2 + \text{N}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$
 $k_{11}[\text{Np(VI)}][\text{NH}_3\text{OH}^+][\text{HNO}_3]^{-1}$

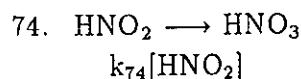
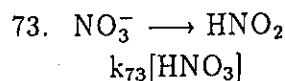
12. $\text{Pu(V)} + \text{Pu(IV)} \longrightarrow \text{Pu(VI)} + \text{Pu(III)}$
 $k_{12}[\text{Pu(V)}][\text{Pu(IV)}][\text{HNO}_3]\{[\text{HNO}_3] + 0.054\}^{-1}$
13. $\text{Pu(V)} + \text{Pu(III)} + 4\text{HNO}_3 \longrightarrow 2\text{Pu(IV)} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{13}[\text{Pu(V)}][\text{Pu(III)}][\text{HNO}_3]$
14. $2\text{Pu(VI)} + \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Pu(V)} + 3\text{HNO}_3$
 $k_{14}[\text{Pu(VI)}][\text{HNO}_2][\text{H}^+]^{-1}$
15. $\text{Pu(VI)} + \text{Pu(III)} \longrightarrow \text{Pu(V)} + \text{Pu(IV)}$
 $k_{15}[\text{Pu(VI)}][\text{Pu(III)}]$
16. $2\text{Pu(V)} + 3\text{HNO}_3 \longrightarrow 2\text{Pu(VI)} + \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_{16}[\text{Pu(V)}][\text{HNO}_2]^{0.5} C_N^{0.4} [\text{HNO}_3]^{0.6}$
17. $2\text{Np(V)} + 4\text{HNO}_3 \longrightarrow \text{Np(VI)} + \text{Np(IV)} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{17}[\text{Np(V)}]^2 [\text{HNO}_3]^2$
18. $2\text{Np(V)} + 3\text{HNO}_3 \longrightarrow 2\text{Np(VI)} + \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_{18}[\text{HNO}_3]^{1.3} C_N^2 [\text{Np(V)}] (1 + [\text{Np(V)}]/[\text{HNO}_2])^{-1}$
19. $2\text{Np(IV)} + \text{NO}_3^- + 3\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Np(V)} + \text{HNO}_2 + 5\text{HNO}_3$
 $k_{19}[\text{Np(IV)}][\text{Np(V)}][\text{HNO}_2]^{-0.5}$
20. $\text{Pu(III)} + \text{Np(VI)} \longrightarrow \text{Pu(IV)} + \text{Np(V)}$
 $k_{20}[\text{Pu(III)}][\text{Np(VI)}](2130 + 186[\text{HNO}_3]^{-1})$
21. $\text{Pu(III)} + \text{Np(V)} + 4\text{HNO}_3 \longrightarrow \text{Pu(IV)} + \text{Np(IV)} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{21}[\text{Np(V)}][\text{Pu(III)}][\text{HNO}_3]^{-1.3}$
22. $\text{Pu(VI)} + 2\text{N}_2\text{H}_5^+ \longrightarrow \text{Pu(V)} + 2\text{NH}_4^+ + \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_{22}[\text{Pu(VI)}][\text{N}_2\text{H}_5^+][\text{HNO}_3]^{-1}$
23. $2\text{Pu(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow \text{Pu(V)} + \text{Pu(III)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_{23}[\text{Pu(IV)}]^2 C_N^{-0.54} [\text{HNO}_3]^{-2.2}$
24. $2\text{Pu(V)} + 4\text{HNO}_3 \longrightarrow \text{Pu(VI)} + \text{Pu(IV)} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{24}[\text{Pu(V)}]^2 [\text{HNO}_3]$
25. $\text{HNO}_2 + \text{NH}_3\text{OH}^+ \longrightarrow \text{N}_2\text{O} + 2\text{H}_2\text{O} + \text{HNO}_3$
 $k_{25}[\text{HNO}_2][\text{NH}_3\text{OH}^+][\text{HNO}_3]$
26. $2\text{Pu(VI)} + \text{NH}_3\text{OH}^+ \longrightarrow 2\text{Pu(V)} + 3\text{HNO}_3 + \text{N}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{26}[\text{Pu(VI)}][\text{NH}_3\text{OH}^+][\text{HNO}_3]^{-1}$
27. $2\text{Pu(VI)} + \text{U(IV)} + 2\text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Pu(V)} + \text{U(VI)} + 4\text{HNO}_3$
 $k_{27}[\text{Pu(VI)}][\text{U(IV)}][\text{HNO}_3]^{-1.2}$
28. $\text{Pu(V)} + 2\text{NH}_3\text{OH}^+ + 2\text{HNO}_3 \longrightarrow \text{Pu(III)} + \text{N}_2\text{O} + 5\text{H}_2\text{O}$
 $k_{28}[\text{Pu(V)}][\text{NH}_3\text{OH}^+]$

29. $e_{ap}^- + HNO_3 \longrightarrow H$
 $k_{29}[e_{ap}^-][HNO_3]$
30. $NO_3^- + e_{ap}^- + H_2O \longrightarrow NO_2 + 2OH^-$
 $k_{30}C_N[e_{ap}^-]$
31. $NO_3^- + H \longrightarrow NO_2 + OH^-$
 $k_{31}C_N[H]$
32. $NO_3^- + OH \longrightarrow NO_3 + OH^-$
 $k_{32}C_N[OH]$
33. $Pu(IV) + e_{ap}^- \longrightarrow Pu(III)$
 $k_{33}[Pu(IV)][e_{ap}^-]$
34. $Pu(IV) + H \longrightarrow Pu(III)$
 $k_{34}[Pu(IV)][H]$
35. $Pu(VI) + e_{ap}^- \longrightarrow Pu(V)$
 $k_{35}[Pu(VI)][e_{ap}^-]$
36. $Pu(VI) + H \longrightarrow Pu(V)$
 $k_{36}[Pu(VI)][H]$
37. $2NO_2 + H_2O \longrightarrow HNO_2 + HNO_3$
 $k_{37}[NO_2]^2$
38. $HNO_2 + HNO_3 \longrightarrow 2NO_2 + H_2O$
 $k_{38}[HNO_2][HNO_3]$
39. $HNO_2 + NO_3 \longrightarrow NO_2 + HNO_3$
 $k_{39}[HNO_2][NO_3]$
40. $HNO_2 + H_2O_2 \longrightarrow HNO_3 + H_2O$
 $k_{40}[HNO_2][H_2O_2]$
41. $Pu(VI) + HNO_2 \longrightarrow Pu(V) + NO_2$
 $k_{41}[Pu(VI)][HNO_2]$
42. $Pu(V) + NO_2 \longrightarrow Pu(VI) + HNO_2$
 $k_{42}[Pu(V)][NO_2]$
43. $Pu(IV) + HNO_2 \longrightarrow Pu(III) + NO_2$
 $k_{43}[Pu(IV)][HNO_2]$
44. $Pu(III) + NO_2 \longrightarrow Pu(IV) + HNO_2$
 $k_{44}[Pu(III)][NO_2]$
45. $Pu(V) + NO_3 \longrightarrow Pu(VI)$
 $k_{45}[Pu(V)][NO_3]$

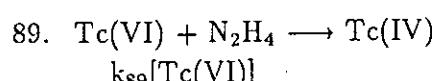
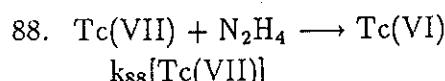
46. $\text{Pu(III)} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{Pu(IV)}$
 $k_{46}[\text{Pu(III)}][\text{NO}_3]$
47. $\text{Pu(IV)} + \text{NO}_3 \longrightarrow \text{Pu(V)}$
 $k_{47}[\text{Pu(IV)}][\text{NO}_3]$
48. $\text{Pu(IV)} + \text{H}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Pu(III)} + \text{HO}_2$
 $k_{48}[\text{Pu(IV)}][\text{H}_2\text{O}_2]$
49. $\text{Pu(VI)} + \text{H}_2\text{O}_2 \longrightarrow \text{Pu(V)} + \text{HO}_2$
 $k_{49}[\text{Pu(VI)}][\text{H}_2\text{O}_2]$
50. $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \longrightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
 $k_{50}[\text{HO}_2]^2$
51. $4\text{HNO}_2 \longrightarrow 2\text{NO}_2 + 2\text{NO} + 2\text{H}_2\text{O}$
 $k_{51}[\text{HNO}_2]^4$
52. $\text{Pu(IV)} + \text{OH} \longrightarrow \text{Pu(V)}$
 $k_{52}[\text{Pu(IV)}][\text{OH}]$
53. $\text{HNO}_3 + \text{OH} \longrightarrow \text{NO}_3 + \text{H}_2\text{O}$
 $k_{53}[\text{HNO}_3][\text{OH}]$
54. $\text{Pu(V)} + \text{OH} \longrightarrow \text{Pu(VI)}$
 $k_{54}[\text{Pu(V)}][\text{OH}]$
55. $\text{Pu(III)} + \text{OH} \longrightarrow \text{Pu(IV)}$
 $k_{55}[\text{Pu(III)}][\text{OH}]$
56. $2\text{Np(VI)} + \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O} \longrightarrow 2\text{Np(V)} + 3\text{HNO}_3$
 $k_{56}[\text{Np(VI)}][\text{HNO}_2]^2 C_N^{1.5} / \{([\text{HNO}_2] + [\text{Np(V)}])[\text{HNO}_3]\}$

<ケース 2. の場合>

上記1. ~ 28. と 56. 式 (プログラムの中では便宜上、57. ~ 72. 、 75. ~ 87. と別の番号をつけ独立した反応として扱っている。) ならびに亜硝酸生成式、



およびテクネチウム系反応式



90. $Tc(V) + N_2H_4 \longrightarrow Tc(IV)$
 $k_{90}[Tc(V)]$
91. $Tc(IV) + NO_3^- \longrightarrow Tc(V) + NO_2^-$
 $k_{91}[Tc(IV)]$
92. $Tc(V) + NO_3^- \longrightarrow Tc(VII) + NO_2^-$
 $k_{92}[Tc(V)]$
93. $Tc(VI) + NO_3^- \longrightarrow Tc(VII) + NO_2^-$
 $k_{93}[Tc(VI)]$
94. $Tc(IV) + Tc(VII) \longrightarrow Tc(V) + Tc(VI)$
 $k_{94}[Tc(IV)]$
95. $Tc(VII) + 3Pu(III) + 4HNO_3 \longrightarrow Tc(IV) + 3Pu(IV) + 2H_2O$
 $k_{95}[Pu(III)][Tc(VII)][HNO_3]^4$
96. $2Tc(VII) + 3U(IV) \longrightarrow 2Tc(IV) + 3U(VI)$
 $k_{96}[U(IV)][Tc(VII)][HNO_3]^2$
97. $Tc(VII) + NH_3OH^+ \longrightarrow Tc(V)$
 k_{97}

なおケース2.においては化学反応式の57.式(すなわち1式)、58.式(すなわち2式)は、速度論計算と部分平衡論計算のどちらかを選択して計算することができる。
 94.式はまた、独自に速度論計算と部分平衡論計算の選択が可能である。

2.2 計算モデル

化学反応式の計算モデルとして、化学種、反応速度式、成分濃度変化量、 Jacobian 解析解を示す。

2.2.1 化学種

化学反応式で考慮される化学反応に係わる化学種は 26 個であり、それぞれを以下のように置いた。

$$\begin{array}{ll}
 x_1 = [\text{Pu(VI)}] & x_{14} = [\text{e}_{\text{aq}}^-] \\
 x_2 = [\text{Pu(V)}] & x_{15} = [\text{NO}] \\
 x_3 = [\text{Pu(IV)}] & x_{16} = [\text{NO}_2] \\
 x_4 = [\text{Pu(III)}] & x_{17} = [\text{NO}_3] \\
 x_5 = [\text{HNO}_3] & x_{18} = [\text{H}] \\
 x_6 = [\text{HNO}_2] & x_{19} = [\text{OH}] \\
 x_7 = [\text{Np(VI)}] & x_{20} = [\text{OH}^-] \\
 x_8 = [\text{Np(V)}] & x_{21} = [\text{H}_2\text{O}_2] \\
 x_9 = [\text{Np(IV)}] & x_{22} = [\text{HO}_2] \\
 x_{10} = [\text{U(VI)}] & x_{23} = [\text{Tc(VII)}] \\
 x_{11} = [\text{U(IV)}] & x_{24} = [\text{Tc(VI)}] \\
 x_{12} = [\text{NH}_3\text{OH}^+] & x_{25} = [\text{Tc(V)}] \\
 x_{13} = [\text{N}_2\text{H}_5^+] & x_{26} = [\text{Tc(IV)}]
 \end{array}$$

2.2.2 反応速度式

化学反応の反応速度を v と表記すれば、2.1 章の反応速度式から、それぞれは以下のように表される。

$$v_1 = k_1 x_3 x_{11} / (x_5 + 0.05)^2$$

$$v_2 = k_2 x_3^2 x_{12}^2 / \{x_4^2 x_5^4 (C_N + 0.35)^2\}$$

$$v_3 = k_3 x_3 x_{13} / (x_5 + 0.35)$$

$$v_4 = k_4 x_4 \sqrt{x_6 x_5} C_N^{0.4}$$

$$v_5 = \frac{1}{\Delta t} x (1 - e^{-a \Delta t})$$

$$2x_{13} \geq x_6 \text{ のとき } x = \frac{1}{2} x_6$$

$$2x_{13} < x_6 \text{ のとき } x = x_{13}$$

$$a = \frac{m}{\Delta t \log e}$$

$$v_6 = k_6 x_9 x_7 (2.16 + 12.5 C_N)$$

$$v_7 = k_7 x_9 x_3 / x_5^4$$

$$v_8 = k_8 x_7 x_{13} / x_5^{1.3}$$

$$v_9 = k_9 x_7 x_{11}$$

$$v_{10} = k_{10} x_8 x_{11} (1.6 / x_5^2 + 1.42 x_5)$$

$$v_{11} = k_{11} x_7 x_{12} / x_5$$

$$v_{12} = k_{12} x_2 x_3 x_5 / (x_5 + 0.054)$$

$$v_{13} = k_{13} x_2 x_4 x_5$$

$$v_{14} = k_{14} x_1 x_6 / x_5$$

$$v_{15} = k_{15} x_1 x_4$$

$$v_{16} = k_{16} x_2 \sqrt{x_6} C_N^{0.4} x_5^{0.6}$$

$$v_{17} = k_{17} x_8 x_5$$

$$v_{18} = k_{18} x_5^{1.3} C_N^2 x_6 x_8 / (x_6 + x_8)$$

$$v_{19} = k_{19} x_8 x_9 / x_6^{0.5}$$

$$v_{20} = k_{20} x_4 x_7 (2130 + 186 / x_5)$$

$$v_{21} = k_{21} x_4 x_8 / x_5^{1.3}$$

$$v_{22} = k_{22} x_1 x_{13} / x_5$$

$$v_{23} = k_{23} x_3^2 / (x_5^{2.2} C_N^{0.54})$$

$$v_{24} = k_{24}x_2^2x_5$$

$$v_{25} = k_{25}x_5x_6x_{12}$$

$$v_{26} = k_{26}x_1x_{12} / x_5$$

$$v_{27} = k_{27}x_1x_{11} / x_5^{1.2}$$

$$v_{28} = k_{28}x_2x_{12}$$

$$v_{29} = k_{29}x_{14}x_5$$

$$v_{30} = k_{30}C_Nx_{14}$$

$$v_{31} = k_{31}C_Nx_{18}$$

$$v_{32} = k_{32}C_Nx_{19}$$

$$v_{33} = k_{33}x_3x_{14}$$

$$v_{34} = k_{34}x_3x_{18}$$

$$v_{35} = k_{35}x_1x_{14}$$

$$v_{36} = k_{36}x_1x_{18}$$

$$v_{37} = k_{37}x_{16}^2$$

$$v_{38} = k_{38}x_6x_5$$

$$v_{39} = k_{39}x_6x_{17}$$

$$v_{40} = k_{40}x_6x_{21}$$

$$v_{41} = k_{41}x_1x_6$$

$$v_{42} = k_{42}x_2x_{16}$$

$$v_{43} = k_{43}x_2x_6$$

$$v_{44} = k_{44}x_4x_{16}$$

$$v_{45} = k_{45}x_2x_{17}$$

$$v_{46} = k_{46}x_4x_{17}$$

$$v_{47} = k_{47}x_3x_{17}$$

$$v_{48} = k_{48}x_3x_{21}$$

$$v_{49} = k_{49}x_1x_{21}$$

$$v_{50} = k_{50}x_{22}^2$$

$$v_{51} = k_{51}x_6^4$$

$$v_{52} = k_{52}x_3x_{19}$$

$$v_{53} = k_{53}x_5x_{19}$$

$$v_{54} = k_{54}x_2x_{19}$$

$$v_{55} = k_{55}x_4x_{19}$$

$$v_{56} = k_{56}x_7x_6^2C_N^{1.5} / \{(x_8 + x_6)x_5\}$$

$$v_{57} = k_{57}x_3x_{11} / (x_5 + 0.05)^2$$

$$v_{58} = k_{58}x_3^2x_{12}^2 / \{x_4^2x_5^4(C_N + 0.35)^2\}$$

$$v_{59} = k_{59}x_3x_{13} / (x_5 + 0.35)$$

$$v_{60} = k_{60}x_4\sqrt{x_6x_5}C_N^{0.4}$$

$$v_{61} = \frac{1}{\Delta t}x(1-e^{-a\Delta t})$$

$$2x_{13} \geq x_6 \text{ のとき } x = \frac{1}{2}x_6$$

$$2x_{13} < x_6 \text{ のとき } x = x_{13}$$

$$a = \frac{m}{\Delta t \log e}$$

$$v_{62} = k_{62}x_9x_7(2.16 + 12.5C_N)$$

$$v_{63} = k_{63}x_9x_3 / x_5^4$$

$$v_{64} = k_{64}x_7x_{13} / x_5^{1.3}$$

$$v_{65} = k_{65}x_7x_{11}$$

$$v_{66} = k_{66}x_8x_{11}(1.6 / x_5^2 + 1.42x_5)$$

$$v_{67} = k_{67}x_7x_{12} / x_5$$

$$v_{68} = k_{68}x_2x_3x_5 / (x_5 + 0.054)$$

$$v_{69} = k_{69}x_2x_4x_5$$

$$v_{70} = k_{70}x_1x_6 / x_5$$

$$v_{71} = k_{71}x_1x_4$$

$$v_{72} = k_{72}x_2\sqrt{x_6}C_N^{0.4}x_5^{0.6}$$

$$v_{73} = k_{73}$$

$$v_{74} = k_{74}x_6$$

$$v_{75} = k_{75}x_8x_5$$

$$v_{76} = k_{76}x_5^{1.3}C_N^2x_6x_8 / (x_6 + x_8)$$

$$v_{77} = k_{77}x_8x_9 / x_6^{0.5}$$

$$v_{78} = k_{78}x_4x_7(2130 + 186/x_5)$$

$$v_{79} = k_{79}x_4x_8 / x_5^{1.3}$$

$$v_{80} = k_{80}x_1x_{13} / x_5$$

$$v_{81} = k_{81}x_3^2 / (x_5^{2.2}C_N^{0.54})$$

$$v_{82} = k_{82}x_2^2x_5$$

$$v_{83} = k_{83}x_5x_6x_{12}$$

$$v_{84} = k_{84}x_1x_{12} / x_5$$

$$v_{85} = k_{85}x_1x_{11} / x_5^{1.2}$$

$$v_{86} = k_{86}x_2x_{12}$$

$$v_{87} = k_{87}x_7x_6^2C_N^{1.5} / \{(x_8 + x_6)x_5\}$$

$$v_{88} = k_{88}x_{23}$$

$$v_{89} = k_{89}x_{24}$$

$$v_{90} = k_{90}x_{25}$$

$$v_{91} = k_{91}x_{26}$$

$$v_{92} = k_{92}x_{25}$$

$$v_{93} = k_{93}x_{24}$$

$$v_{94} = k_{94}x_{26}$$

$$v_{95} = k_{95}x_{23}x_5^4x_4$$

$$v_{96} = k_{96}x_{23}x_5^2x_{11}$$

$$v_{97} = k_{97}$$

全硝酸イオン濃度 C_N

$$C_N = x_2 + x_5 + x_8 + x_{12} + x_{13} + 2(x_1 + x_7 + x_{10}) + 3x_4 + 4(x_3 + x_9 + x_{11})$$

2.2.3 成分濃度変化量

化学量論係数(3.5章参照)より、成分濃度変化量 $f(x)$ は、以下のように表される。ここで()内の反応はケース2.において用いる反応であり、前半のケース1.の反応と重複している(2.2.2章参照)。

$$\begin{aligned}
 d/dt[\text{Pu(VI)}] &= v_{12} - 2v_{14} - v_{15} + 2v_{16} - v_{22} + v_{24} - 2v_{26} - 2v_{27} - v_{35} - v_{36} - v_{41} + \\
 &\quad v_{42} + v_{45} - v_{49} + v_{54} (+ v_{68} - 2v_{70} - v_{71} + 2v_{72} - v_{80} + v_{82} - 2v_{84} - \\
 &\quad 2v_{85}) \\
 d/dt[\text{Pu(V)}] &= -v_{12} - v_{13} + 2v_{14} + v_{15} - 2v_{16} + v_{22} + v_{23} - 2v_{24} + 2v_{26} + 2v_{27} - \\
 &\quad v_{28} + v_{35} + v_{36} + v_{41} - v_{42} - v_{45} + v_{47} + v_{49} + v_{52} - v_{54} (-v_{68} - v_{69} \\
 &\quad + 2v_{70} + v_{71} - 2v_{72} + v_{80} + v_{81} - 2v_{82} + 2v_{84} + 2v_{85} - v_{86}) \\
 d/dt[\text{Pu(IV)}] &= -2v_1 - v_2 - v_3 + 2v_4 - v_7 - v_{12} + 2v_{13} + v_{15} + v_{20} + v_{21} - 2v_{23} + \\
 &\quad v_{24} - v_{33} - v_{34} - v_{43} + v_{44} + v_{46} - v_{47} - v_{48} - v_{52} + v_{55} (-2v_{57} - \\
 &\quad v_{58} - v_{59} + 2v_{60} - v_{63} - v_{68} + 2v_{69} + v_{71} + v_{78} + v_{79} - 2v_{81} + v_{82} + \\
 &\quad 3v_{95}) \\
 d/dt[\text{Pu(III)}] &= 2v_1 + v_2 + v_3 - 2v_4 + v_7 + v_{12} - v_{13} - v_{15} - v_{20} - v_{21} + v_{23} + v_{28} + \\
 &\quad v_{33} + v_{34} + v_{43} - v_{44} - v_{46} + v_{48} - v_{55} (+2v_{57} + v_{58} + v_{59} - 2v_{60} + \\
 &\quad v_{63} + v_{68} - v_{69} - v_{71} - v_{78} - v_{79} + v_{81} + v_{86}) - 3v_{95} \\
 d/dt[\text{HNO}_3] &= 2v_1 + 2v_2 - 2v_4 + 4v_6 + 4v_7 + 4v_9 - 4v_{10} + v_{11} - 4v_{13} + 3v_{14} - \\
 &\quad 3v_{16} - 4v_{17} - 3v_{18} + 5v_{19} - 4v_{21} + 4v_{23} - 4v_{24} + v_{25} + 3v_{26} + 4v_{27} - \\
 &\quad 2v_{28} - v_{29} + v_{37} - v_{38} + v_{39} + v_{40} - v_{53} + 3v_{56} (+2v_{57} + 2v_{58} - \\
 &\quad 2v_{60} + 4v_{62} + 4v_{63} + 4v_{65} - 4v_{66} + v_{67} - 4v_{69} + 3v_{70} - 3v_{72}) - v_{73} + \\
 &\quad v_{74} (-4v_{75} - 3v_{76} + 5v_{77} - 4v_{79} + 4v_{81} - 4v_{82} + v_{83} + 3v_{84} + 4v_{85} - \\
 &\quad 2v_{86} + 3v_{87}) - 4v_{95} \\
 d/dt[\text{HNO}_2] &= v_4 - v_5 - v_{14} + v_{16} + v_{18} + v_{19} - v_{25} + v_{37} - v_{38} - v_{39} - v_{40} - v_{41} + \\
 &\quad v_{42} - v_{43} + v_{44} - 4v_{51} - v_{56} (+v_{60} - v_{61} - v_{70} + v_{72}) + v_{73} - v_{74} (+ \\
 &\quad v_{76} + v_{77} - v_{83} - v_{87}) + v_{91} + v_{92} + v_{93} \\
 d/dt[\text{Np(VI)}] &= -v_6 - v_8 - 2v_9 - v_{11} + v_{17} + 2v_{18} - v_{20} - 2v_{56} (-v_{62} - v_{64} - \\
 &\quad 2v_{65} - v_{67} + v_{75} + 2v_{76} - v_{78} - 2v_{87}) \\
 d/dt[\text{Np(V)}] &= 2v_6 + v_7 + v_8 + 2v_9 - 2v_{10} + v_{11} - 2v_{17} - 2v_{18} + 2v_{19} + v_{20} - v_{21} + \\
 &\quad 2v_{56} (+2v_{62} + v_{63} + v_{64} + 2v_{65} - 2v_{66} + v_{67} - 2v_{75} - 2v_{76} + 2v_{77} + \\
 &\quad v_{78} - v_{79} + 2v_{87}) \\
 d/dt[\text{Np(IV)}] &= -v_6 - v_7 + 2v_{10} + v_{17} - 2v_{19} + v_{21} (-v_{62} - v_{63} + 2v_{66} + v_{75} - \\
 &\quad 2v_{77} + v_{79}) \\
 d/dt[\text{U(VI)}] &= v_1 + v_9 + v_{10} + v_{27} (+v_{57} + v_{65} + v_{66} + v_{85}) + 3v_{96} \\
 d/dt[\text{U(IV)}] &= -v_1 - v_9 - v_{10} - v_{27} (-v_{57} - v_{65} - v_{66} - v_{85}) - 3v_{96} \\
 d/dt[\text{NH}_3\text{OH}^+] &= -v_2 - v_{11} - v_{25} - v_{26} - 2v_{28} (-v_{58} - v_{67} - v_{83} - v_{84} - 2v_{86}) - v_{97} \\
 d/dt[\text{N}_2\text{H}_5^+] &= -v_3 - v_5 - v_8 - 2v_{22} (-v_{59} - v_{61} - v_{64} - 2v_{80}) - v_{88} - v_{89} - v_{90}
 \end{aligned}$$

$d/dt[e_{aq}^-]$	$= -v_{29} - v_{30} - v_{33} - v_{35}$
$d/dt[NO]$	$= 2v_{51}$
$d/dt[NO_2]$	$= v_{30} + v_{31} - 2v_{37} + 2v_{38} + v_{39} + v_{41} - v_{42} + v_{43} - v_{44} + 2v_{51}$
$d/dt[NO_3]$	$= v_{32} - v_{39} - v_{45} - v_{46} - v_{47} + v_{53}$
$d/dt[H]$	$= v_{29} - v_{31} - v_{34} - v_{36}$
$d/dt[OH]$	$= -v_{32} - v_{52} - v_{53} - v_{54} - v_{55}$
$d/dt[OH^-]$	$= 2v_{30} + v_{31} + v_{32}$
$d/dt[H_2O_2]$	$= -v_{40} - v_{48} - v_{49} + v_{50}$
$d/dt[HO_2]$	$= v_{48} + v_{49} - 2v_{50}$
$d/dt[Tc(VII)]$	$= -v_{88} + v_{92} + v_{93} - v_{94} - v_{95} - 2v_{96} - v_{97}$
$d/dt[Tc(VI)]$	$= v_{88} - v_{89} - v_{93} + v_{94}$
$d/dt[Tc(V)]$	$= -v_{90} + v_{91} - v_{92} + v_{94} + v_{97}$
$d/dt[Tc(IV)]$	$= v_{89} + v_{90} - v_{91} - v_{94} + v_{95} + 2v_{96}$

上記各成分の濃度変化量 $f(x)$ は、以下の計算式から求められる。

IFG=0 のとき

$$f_i(x) = \frac{dx_i}{dt} = \sum_k^k C_{ik} \cdot V_k + G_i \cdot P \cdot a \cdot [Pu]$$

IFG=1 ~ 4 のとき

$$f_i(x) = \frac{dx_i}{dt} = \sum_k^k C_{ik} \cdot V_k$$

C : 化学量論係数

V : 反応速度

i : 化学種番号

k : 反応式番号

G : 100ev 中での放射線分解生成物 (ラジカル) の分子量

P · a · [Pu] : Radiolytic yield by α -ray of Pu

(備考)

- IFG に対しては、3.3 章の入力カードを参照。

2.2.4 Jacobian 解析解

化学反応式の Jacobian(j_{ij})ⁿ は、 $(\partial v_k / \partial x_j)^n$ から直ちに計算することが出来る。以下に、Jacobian 解析解を示す。

k=1

$$\partial v_1 / \partial x_3 = k_1 x_{11} / (x_5 + 0.05)^2$$

$$\partial v_1 / \partial x_5 = -2k_1 x_3 x_{11} / (x_5 + 0.05)^3$$

$$\partial v_1 / \partial x_{11} = k_1 x_3 / (x_5 + 0.05)^2$$

k=2

$$(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj} = -2k_2 x_3^2 x_{12}^2 / \{x_4^2 x_5^4 (C_N + 0.35)^3\}$$

$$\partial v_2 / \partial x_1 = 2(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_2 = (\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_3 = 2k_2 x_3 x_{12}^2 / \{x_4^2 x_5^4 (C_N + 0.35)^2\} + 4(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_4 = -2k_2 x_3^2 x_{12}^2 / \{x_4^3 x_5^4 (C_N + 0.35)^2\} + 3(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_5 = -4k_2 x_3^2 x_{12}^2 / \{x_4^2 x_5^5 (C_N + 0.35)^2\} + (\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_7 = 2(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_8 = (\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_9 = 4(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_{10} = 2(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_{11} = 4(\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_{12} = 2k_2 x_3^2 x_{12} / \{x_4^2 x_5^4 (C_N + 0.35)^2\} + (\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_2 / \partial x_{13} = (\partial v_2 / \partial C_N)_{xj}$$

k=3

$$\partial v_3 / \partial x_3 = k_3 x_{13} / (x_5 + 0.35)$$

$$\partial v_3 / \partial x_5 = -k_3 x_3 x_{13} / (x_5 + 0.35)^2$$

$$\partial v_3 / \partial x_{13} = k_3 x_3 / (x_5 + 0.35)$$

k=4

$$(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} = 0.4 k_4 x_4 \sqrt{x_6 x_5} / C_N^{0.6}$$

$$\partial v_4 / \partial x_1 = 2(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\begin{aligned}
\partial v_4 / \partial x_2 &= (\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_3 &= 4(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_4 &= k_4 \sqrt{x_6 x_5} C_N^{0.4} + 3(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_5 &= 0.5 k_4 x_4 \sqrt{x_6 / x_5} C_N^{0.4} + (\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_6 &= 0.5 k_4 x_4 \sqrt{x_5 / x_6} C_N^{0.4} \\
\partial v_4 / \partial x_7 &= 2(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_8 &= (\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_9 &= 4(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_{10} &= 2(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_{11} &= 4(\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_{12} &= (\partial v_4 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_4 / \partial x_{13} &= (\partial v_4 / \partial C_N)_{xj}
\end{aligned}$$

k=5

2x₁₃ ≥ x₆ ならば

$$\partial v_5 / \partial x_6 = \frac{1}{\Delta t} (1 - e^{-a \Delta t})$$

2x₁₃ < x₆ ならば

$$\partial v_5 / \partial x_{13} = \frac{1}{\Delta t} (1 - e^{-a \Delta t})$$

k=6

$$\begin{aligned}
(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} &= 12.5 k_6 x_7 x_9 \\
\partial v_6 / \partial x_1 &= 2(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_2 &= (\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_3 &= 4(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_4 &= 3(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_5 &= (\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_7 &= k_6 x_9 (2.16 + 12.5 C_N) + 2(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_8 &= (\partial v_6 / \partial C_N)_{xj} \\
\partial v_6 / \partial x_9 &= k_6 x_7 (2.16 + 12.5 C_N) + 4(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj}
\end{aligned}$$

$$\partial v_6 / \partial x_{10} = 2(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_6 / \partial x_{11} = 4(\partial v_6 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_6 / \partial x_{12} = (\partial v_6 / \partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_6 / \partial x_{13} = (\partial v_6 / \partial C_N)_{xj}$$

k=7

$$\partial v_7 / \partial x_3 = k_7 x_9 / x_5^4$$

$$\partial v_7 / \partial x_5 = -4k_7 x_9 x_3 / x_5^5$$

$$\partial v_7 / \partial x_9 = k_7 x_3 / x_5^4$$

k=8

$$\partial v_8 / \partial x_5 = -1.3k_8 x_7 x_{13} / x_5^{2.3}$$

$$\partial v_8 / \partial x_7 = k_8 x_{13} / x_5^{1.3}$$

$$\partial v_8 / \partial x_{13} = k_8 x_7 / x_5^{1.3}$$

k=9

$$\partial v_9 / \partial x_7 = k_9 x_{11}$$

$$\partial v_9 / \partial x_{11} = k_9 x_7$$

k=10

$$\partial v_{10} / \partial x_5 = k_{10} x_8 x_{11} (-3.2/x_5^3 + 1.42)$$

$$\partial v_{10} / \partial x_8 = k_{10} x_{11} (1.6/x_5^2 + 1.42 x_5)$$

$$\partial v_{10} / \partial x_{11} = k_{10} x_8 (1.6/x_5^2 + 1.42 x_5)$$

k=11

$$\partial v_{11} / \partial x_5 = -k_{11} x_7 x_{12} / x_5^2$$

$$\partial v_{11} / \partial x_7 = k_{11} x_{12} / x_5$$

$$\partial v_{11} / \partial x_{12} = k_{11} x_7 / x_5$$

k=12

$$\partial v_{12} / \partial x_2 = k_{12} x_3 x_5 / (x_5 + 0.054)$$

$$\partial v_{12} / \partial x_3 = k_{12} x_2 x_5 / (x_5 + 0.054)$$

$$\partial v_{12} / \partial x_5 = k_{12} x_2 x_3 / (x_5 + 0.054)^2$$

k=13

$$\partial v_{13}/\partial x_2 = k_{13}x_4x_5$$

$$\partial v_{13}/\partial x_4 = k_{13}x_2x_5$$

$$\partial v_{13}/\partial x_5 = k_{13}x_2x_4$$

k=14

$$\partial v_{14}/\partial x_1 = k_{14}x_6/x_5$$

$$\partial v_{14}/\partial x_5 = -k_{14}x_1x_6/x_5^2$$

$$\partial v_{14}/\partial x_6 = k_{14}x_1/x_5$$

k=15

$$\partial v_{15}/\partial x_1 = k_{15}x_4$$

$$\partial v_{15}/\partial x_4 = k_{15}x_1$$

k=16

$$(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj} = 0.4k_{16}x_2\sqrt{x_6}(x_5/C_N)^{0.6}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_1 = 2(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_2 = k_{16}\sqrt{x_6}C_N^{0.4}x_5^{0.6} + (\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_3 = 4(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_4 = 3(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_5 = 0.6k_{16}x_2\sqrt{x_6}C_N^{0.4}/x_5^{0.4} + (\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_6 = 0.5k_{16}x_2C_N^{0.4}x_5^{0.6}/\sqrt{x_6}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_7 = 2(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_8 = (\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_9 = 4(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_{12} = (\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{16}/\partial x_{13} = (\partial v_{16}/\partial C_N)_{xj}$$

k=17

$$\partial v_{17}/\partial x_5 = 2k_{17}x_8^2x_5$$

$$\partial v_{17}/\partial x_8 = 2k_{17}x_8x_5^2$$

k=18

$$\begin{aligned}
 (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} &= 2k_{18}x_5^{1.3}C_Nx_6x_8/(x_6+x_8) \\
 \partial v_{18}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_2 &= (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_5 &= 1.3k_{18}x_5^{0.2}C_N^2x_8/(x_6+x_8) + (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_6 &= k_{18}x_5^{1.3}C_N^2x_8^2/(x_6+x_8)^2 \\
 \partial v_{18}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_8 &= k_{18}x_5^{1.3}C_N^2x_6^2/(x_6+x_8)^2 + (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_{12} &= (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{18}/\partial x_{13} &= (\partial v_{18}/\partial C_N)_{xj}
 \end{aligned}$$

k=19

$$\begin{aligned}
 \partial v_{19}/\partial x_6 &= -0.5k_{19}x_8x_9/x_6^{1.5} \\
 \partial v_{19}/\partial x_8 &= k_{19}x_9/x_6^{0.5} \\
 \partial v_{19}/\partial x_9 &= k_{19}x_8/x_6^{0.5}
 \end{aligned}$$

k=20

$$\begin{aligned}
 \partial v_{20}/\partial x_4 &= k_{20}x_7(2130 + 186/x_5) \\
 \partial v_{20}/\partial x_5 &= -186x_{20}x_4x_7/x_5^2 \\
 \partial v_{20}/\partial x_7 &= k_{20}x_4(2130 + 186/x_5)
 \end{aligned}$$

k=21

$$\begin{aligned}
 \partial v_{21}/\partial x_4 &= k_{21}x_8/x_5^{1.3} \\
 \partial v_{21}/\partial x_5 &= -1.3k_{21}x_4x_8/x_5^{2.3} \\
 \partial v_{21}/\partial x_8 &= k_{21}x_4/x_5^{1.3}
 \end{aligned}$$

k=22

$$\begin{aligned}\partial v_{22}/\partial x_1 &= k_{22}x_{13}/x_5 \\ \partial v_{22}/\partial x_5 &= -k_{22}x_1x_{13}/x_5^2 \\ \partial v_{22}/\partial x_{13} &= k_{22}x_1/x_5\end{aligned}$$

k=23

$$\begin{aligned}(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} &= -0.54k_{23}x_3^2/(x_5^{2.2}C_N^{1.54}) \\ \partial v_{23}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_2 &= (\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_3 &= 2k_{23}x_3/(x_5^{2.2}C_N^{0.54}) + 4(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_5 &= -2.2k_{23}x_3^2/(x_5^{3.2}C_N^{0.54}) + (\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_8 &= (\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_{12} &= (\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{23}/\partial x_{13} &= (\partial v_{23}/\partial C_N)_{xj}\end{aligned}$$

k=24

$$\begin{aligned}\partial v_{24}/\partial x_2 &= 2k_{24}x_2x_5 \\ \partial v_{24}/\partial x_5 &= k_{24}x_2^2\end{aligned}$$

k=25

$$\begin{aligned}\partial v_{25}/\partial x_5 &= k_{25}x_6x_{12} \\ \partial v_{25}/\partial x_6 &= k_{25}x_5x_{12} \\ \partial v_{25}/\partial x_{12} &= k_{25}x_5x_6\end{aligned}$$

k=26

$$\begin{aligned}\partial v_{26}/\partial x_1 &= k_{26}x_{12}/x_5 \\ \partial v_{26}/\partial x_5 &= -k_{26}x_1x_{12}/x_5^2 \\ \partial v_{26}/\partial x_{12} &= k_{26}x_1/x_5\end{aligned}$$

k=27

$$\begin{aligned}\partial v_{27}/\partial x_1 &= k_{27}x_{11}/x_5^{1.2} \\ \partial v_{27}/\partial x_5 &= -1.2k_{27}x_1x_{11}/x_5^{2.2} \\ \partial v_{27}/\partial x_{11} &= k_{27}x_1/x_5^{1.2}\end{aligned}$$

k=28

$$\begin{aligned}\partial v_{28}/\partial x_2 &= k_{28}x_{12} \\ \partial v_{28}/\partial x_{12} &= k_{28}x_2\end{aligned}$$

k=29

$$\begin{aligned}\partial v_{29}/\partial x_5 &= k_{29}x_{14} \\ \partial v_{29}/\partial x_{14} &= k_{29}x_5\end{aligned}$$

k=30

$$\begin{aligned}(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} &= k_{30}x_{14} \\ \partial v_{30}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_2 &= (\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_5 &= (\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_8 &= (\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_{12} &= (\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_{13} &= (\partial v_{30}/\partial C_N)_{xj} \\ \partial v_{30}/\partial x_{14} &= k_{30}C_N\end{aligned}$$

k=31

$$\begin{aligned}(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} &= k_{31}x_{18} \\ \partial v_{31}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial v_{31}/\partial x_2 &= (\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_5 &= (\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_8 &= (\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_{12} &= (\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_{13} &= (\partial v_{31}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{31}/\partial x_{18} &= k_{31}C_N
\end{aligned}$$

$k=32$

$$\begin{aligned}
(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} &= k_{32}x_{19} \\
\partial v_{32}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_2 &= (\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_5 &= (\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_8 &= (\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_{12} &= (\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_{13} &= (\partial v_{32}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{32}/\partial x_{19} &= k_{32}C_N
\end{aligned}$$

k=33

$$\partial v_{33}/\partial x_3 = k_{33}x_{14}$$

$$\partial v_{33}/\partial x_{14} = k_{33}x_3$$

k=34

$$\partial v_{34}/\partial x_3 = k_{34}x_{18}$$

$$\partial v_{34}/\partial x_{18} = k_{34}x_3$$

k=35

$$\partial v_{35}/\partial x_1 = k_{35}x_{14}$$

$$\partial v_{35}/\partial x_{14} = k_{35}x_1$$

k=36

$$\partial v_{36}/\partial x_1 = k_{36}x_{18}$$

$$\partial v_{36}/\partial x_{18} = k_{36}x_1$$

k=37

$$\partial v_{37}/\partial x_{16} = 2k_{37}x_{16}$$

k=38

$$\partial v_{38}/\partial x_5 = k_{38}x_6$$

$$\partial v_{38}/\partial x_6 = k_{38}x_5$$

k=39

$$\partial v_{39}/\partial x_6 = k_{39}x_{17}$$

$$\partial v_{39}/\partial x_{17} = k_{39}x_6$$

k=40

$$\partial v_{40}/\partial x_6 = k_{40}x_{21}$$

$$\partial v_{40}/\partial x_{21} = k_{40}x_6$$

k=41

$$\partial v_{41}/\partial x_1 = k_{41}x_6$$

$$\partial v_{41}/\partial x_6 = k_{41}x_1$$

k=42

$$\partial v_{42}/\partial x_2 = k_{42}x_{16}$$

$$\partial v_{42}/\partial x_{16} = k_{42}x_2$$

k=43

$$\partial v_{43}/\partial x_3 = k_{43}x_6$$

$$\partial v_{43}/\partial x_6 = k_{43}x_3$$

k=44

$$\partial v_{44}/\partial x_4 = k_{44}x_{16}$$

$$\partial v_{42}/\partial x_{16} = k_{44}x_4$$

k=45

$$\partial v_{45}/\partial x_2 = k_{45}x_{17}$$

$$\partial v_{45}/\partial x_{17} = k_{45}x_2$$

k=46

$$\partial v_{45}/\partial x_4 = k_{46}x_{17}$$

$$\partial v_{46}/\partial x_{17} = k_{46}x_4$$

k=47

$$\partial v_{47}/\partial x_3 = k_{47}x_{17}$$

$$\partial v_{47}/\partial x_{17} = k_{47}x_3$$

k=48

$$\partial v_{48}/\partial x_3 = k_{48}x_{21}$$

$$\partial v_{48}/\partial x_{21} = k_{48}x_3$$

k=49

$$\partial v_{49}/\partial x_1 = k_{49}x_{21}$$

$$\partial v_{49}/\partial x_{21} = k_{49}x_1$$

k=50

$$\partial v_{50}/\partial x_{14} = 2k_{50}x_{14}$$

k=51

$$\partial v_{51}/\partial x_6 = 4k_{51}x_6^3$$

k=52

$$\partial v_{52}/\partial x_3 = k_{52}x_{19}$$

$$\partial v_{52}/\partial x_{19} = k_{52}x_3$$

k=53

$$\partial v_{53}/\partial x_5 = k_{53}x_{19}$$

$$\partial v_{53}/\partial x_{19} = k_{53}x_5$$

k=54

$$\partial v_{54}/\partial x_2 = k_{54}x_{19}$$

$$\partial v_{54}/\partial x_{19} = k_{54}x_2$$

k=55

$$\partial v_{55}/\partial x_4 = k_{55}x_{19}$$

$$\partial v_{55}/\partial x_{19} = k_{55}x_4$$

k=56

$$(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj} = 1.5k_{56}x_6^2x_7C_N^{0.5}/\{(x_8 + x_6)x_5\}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_1 = 2(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_2 = (\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_3 = 4(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_4 = 3(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_5 = -k_{56}x_6^2x_7C_N^{1.5}/\{(x_8 + x_6)x_5^2\} + (\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_6 = 2k_{56}x_6x_7x_8C_N^{1.5}/\{(x_8 + x_6)^2x_5\}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_7 = k_{56}x_6^2C_N^{1.5}/\{(x_8 + x_6)x_5\} + 2(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_8 = -k_{56}x_6^3x_7C_N^{1.5}/\{(x_8 + x_6)^2x_5\} + (\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_9 = 4(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_{12} = (\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{56}/\partial x_{13} = (\partial v_{56}/\partial C_N)_{xj}$$

k=57

$$\partial v_{57}/\partial x_3 = k_{57}x_{11}/(x_5 + 0.05)^2$$

$$\partial v_{57}/\partial x_5 = -2k_{57}x_3x_{11}/(x_5 + 0.05)^3$$

$$\partial v_{57}/\partial x_{11} = k_{57}x_3/(x_5 + 0.05)^2$$

k=58

$$\begin{aligned}
 (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} &= -2k_{58}x_3^2x_{12}^2/\{x_4^2x_5^4(C_N + 0.35)^3\} \\
 \partial v_{58}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_2 &= (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_3 &= 2k_{58}x_3x_{12}^2/\{x_4^2x_5^4(C_N + 0.35)^2\} + 4(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_4 &= -2k_{58}x_3^2x_{12}^2/\{x_4^3x_5^4(C_N + 0.35)^2\} + 3(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_5 &= -4k_{58}x_3^2x_{12}^2/\{x_4^2x_5^5(C_N + 0.35)^2\} + (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_8 &= (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_{12} &= 2k_{58}x_3^2x_{12}/\{x_4^2x_5^4(C_N + 0.35)^2\} + (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{58}/\partial x_{13} &= (\partial v_{58}/\partial C_N)_{xj}
 \end{aligned}$$

k=59

$$\begin{aligned}
 \partial v_{59}/\partial x_3 &= k_{59}x_{13}/(x_5 + 0.35) \\
 \partial v_{59}/\partial x_5 &= -k_{59}x_3x_{13}/(x_5 + 0.35)^2 \\
 \partial v_{59}/\partial x_{13} &= k_{59}x_3/(x_5 + 0.35)
 \end{aligned}$$

k=60

$$\begin{aligned}
 (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} &= 0.4k_{60}x_4\sqrt{x_6x_5}/C_N^{0.6} \\
 \partial v_{60}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_2 &= (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_4 &= k_{60}\sqrt{x_6x_5}C_N^{0.4} + 3(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_5 &= 0.5k_{60}x_4\sqrt{x_6/x_5}C_N^{0.4} + (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_6 &= 0.5k_{60}x_4\sqrt{x_5/x_6}C_N^{0.4} \\
 \partial v_{60}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{60}/\partial x_8 &= (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}
 \end{aligned}$$

$$\partial v_{60}/\partial x_9 = 4(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{60}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{60}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{60}/\partial x_{12} = (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{60}/\partial x_{13} = (\partial v_{60}/\partial C_N)_{xj}$$

k=61

$2x_{13} \geq x_6$ ならば

$$\partial v_{61}/\partial x_6 = \frac{1}{\Delta t}(1 - e^{-a\Delta t})$$

$2x_{13} < x_6$ ならば

$$\partial v_{61}/\partial x_{13} = \frac{1}{\Delta t}(1 - e^{-a\Delta t})$$

k=62

$$(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj} = 12.5k_{62}x_7x_9$$

$$\partial v_{62}/\partial x_1 = 2(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_2 = (\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_3 = 4(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_4 = 3(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_5 = (\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_7 = k_{62}x_9(2.16 + 12.5C_N) + 2(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_8 = (\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_9 = k_{62}x_7(2.16 + 12.5C_N) + 4(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_{12} = (\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{62}/\partial x_{13} = (\partial v_{62}/\partial C_N)_{xj}$$

k=63

$$\partial v_{63}/\partial x_3 = k_{63}x_9/x_5^4$$

$$\partial v_{63}/\partial x_5 = -4k_{63}x_9x_3/x_5^5$$

$$\partial v_{63}/\partial x_9 = k_{63}x_3/x_5^4$$

k=64

$$\partial v_{64}/\partial x_5 = -1.3 k_{64} x_7 x_{13}/x_5^{2.3}$$

$$\partial v_{64}/\partial x_7 = k_{64} x_{13}/x_5^{1.3}$$

$$\partial v_{64}/\partial x_{13} = k_{64} x_7/x_5^{1.3}$$

k=65

$$\partial v_{65}/\partial x_7 = k_{65} x_{11}$$

$$\partial v_{65}/\partial x_{11} = k_{65} x_7$$

k=66

$$\partial v_{66}/\partial x_5 = k_{66} x_8 x_{11} (-3.2/x_5^3 + 1.42)$$

$$\partial v_{66}/\partial x_8 = k_{66} x_{11} (1.6/x_5^2 + 1.42 x_5)$$

$$\partial v_{66}/\partial x_{11} = k_{66} x_8 (1.6/x_5^2 + 1.42 x_5)$$

k=67

$$\partial v_{67}/\partial x_5 = -k_{67} x_7 x_{12}/x_5^2$$

$$\partial v_{67}/\partial x_7 = k_{67} x_{12}/x_5$$

$$\partial v_{67}/\partial x_{12} = k_{67} x_7/x_5$$

k=68

$$\partial v_{68}/\partial x_2 = k_{68} x_3 x_5/(x_5 + 0.054)$$

$$\partial v_{68}/\partial x_3 = k_{68} x_2 x_5/(x_5 + 0.054)$$

$$\partial v_{68}/\partial x_5 = k_{68} x_2 x_3/(x_5 + 0.054)^2$$

k=69

$$\partial v_{69}/\partial x_2 = k_{69} x_4 x_5$$

$$\partial v_{69}/\partial x_4 = k_{69} x_2 x_5$$

$$\partial v_{69}/\partial x_5 = k_{69} x_2 x_4$$

k=70

$$\partial v_{70}/\partial x_1 = k_{70} x_6/x_5$$

$$\partial v_{70}/\partial x_5 = -k_{70} x_1 x_6/x_5^2$$

$$\partial v_{70}/\partial x_6 = k_{70} x_1/x_5$$

k=71

$$\partial v_{71}/\partial x_1 = k_{71}x_4$$

$$\partial v_{71}/\partial x_4 = k_{71}x_1$$

k=72

$$(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj} = 0.4k_{72}x_2\sqrt{x_6}(x_5/C_N)^{0.6}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_1 = 2(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_2 = k_{72}\sqrt{x_6}C_N^{0.4}x_5^{0.6} + (\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_3 = 4(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_4 = 3(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_5 = 0.6k_{72}x_2\sqrt{x_6}C_N^{0.4}/x_5^{0.4} + (\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_6 = 0.5k_{72}x_2C_N^{0.4}x_5^{0.6}/\sqrt{x_6}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_7 = 2(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_8 = (\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_9 = 4(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_{12} = (\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{72}/\partial x_{13} = (\partial v_{72}/\partial C_N)_{xj}$$

k=73

k=74

$$\partial v_{74}/\partial x_6 = k_{74}$$

k=75

$$\partial v_{75}/\partial x_5 = 2k_{75}x_8^2x_5$$

$$\partial v_{75}/\partial x_8 = 2k_{75}x_8x_5^2$$

k=76

$$(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} = 2k_{76}x_5^{1.3}C_Nx_6x_8/(x_6+x_8)$$

$$\partial v_{76}/\partial x_1 = 2(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{76}/\partial x_2 = (\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\begin{aligned}
\partial v_{76}/\partial x_3 &= 4(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_5 &= 1.3k_{76}x_5^{0.2}C_N^2x_8/(x_6+x_8) + (\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_6 &= k_{76}x_5^{1.3}C_N^2x_8^2/(x_6+x_8)^2 \\
\partial v_{76}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_8 &= k_{76}x_5^{1.3}C_N^2x_6^2/(x_6+x_8)^2 + (\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_{12} &= (\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj} \\
\partial v_{76}/\partial x_{13} &= (\partial v_{76}/\partial C_N)_{xj}
\end{aligned}$$

k=77

$$\begin{aligned}
\partial v_{77}/\partial x_6 &= -0.5k_{77}x_8x_9/x_6^{1.5} \\
\partial v_{77}/\partial x_8 &= k_{77}x_9/x_6^{0.5} \\
\partial v_{77}/\partial x_9 &= k_{77}x_8/x_6^{0.5}
\end{aligned}$$

k=78

$$\begin{aligned}
\partial v_{78}/\partial x_4 &= k_{78}x_7(2130 + 186/x_5) \\
\partial v_{78}/\partial x_5 &= -186x_{78}x_4x_7/x_5^2 \\
\partial v_{78}/\partial x_7 &= k_{78}x_4(2130 + 186/x_5)
\end{aligned}$$

k=79

$$\begin{aligned}
\partial v_{79}/\partial x_4 &= k_{79}x_8/x_5^{1.3} \\
\partial v_{79}/\partial x_5 &= -1.3k_{79}x_4x_8/x_5^{2.3} \\
\partial v_{79}/\partial x_8 &= k_{79}x_4/x_5^{1.3}
\end{aligned}$$

k=80

$$\begin{aligned}
\partial v_{80}/\partial x_1 &= k_{80}x_{13}/x_5 \\
\partial v_{80}/\partial x_5 &= -k_{80}x_1x_{13}/x_5^2 \\
\partial v_{80}/\partial x_{13} &= k_{80}x_1/x_5
\end{aligned}$$

k=81

$$\begin{aligned}
 (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} &= -0.54 k_{81} x_3^2 / (x_5^{2.2} C_N^{1.54}) \\
 \partial v_{81}/\partial x_1 &= 2(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_2 &= (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_3 &= 2k_{81} x_3 / (x_5^{2.2} C_N^{0.54}) + 4(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_4 &= 3(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_5 &= -2.2 k_{81} x_3^2 / (x_5^{3.2} C_N^{0.54}) + (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_7 &= 2(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_8 &= (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_9 &= 4(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_{10} &= 2(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_{11} &= 4(\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_{12} &= (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj} \\
 \partial v_{81}/\partial x_{13} &= (\partial v_{81}/\partial C_N)_{xj}
 \end{aligned}$$

k=82

$$\begin{aligned}
 \partial v_{82}/\partial x_2 &= 2k_{82} x_2 x_5 \\
 \partial v_{82}/\partial x_5 &= k_{82} x_2^2
 \end{aligned}$$

k=83

$$\begin{aligned}
 \partial v_{83}/\partial x_5 &= k_{83} x_6 x_{12} \\
 \partial v_{83}/\partial x_6 &= k_{83} x_5 x_{12} \\
 \partial v_{83}/\partial x_{12} &= k_{83} x_5 x_6
 \end{aligned}$$

k=84

$$\begin{aligned}
 \partial v_{84}/\partial x_1 &= k_{84} x_{12} / x_5 \\
 \partial v_{84}/\partial x_5 &= -k_{84} x_1 x_{12} / x_5^2 \\
 \partial v_{84}/\partial x_{12} &= k_{84} x_1 / x_5
 \end{aligned}$$

k=85

$$\begin{aligned}
 \partial v_{85}/\partial x_1 &= k_{85} x_{11} / x_5^{1.2} \\
 \partial v_{85}/\partial x_5 &= -1.2 k_{85} x_1 x_{11} / x_5^{2.2}
 \end{aligned}$$

$$\partial v_{85}/\partial x_{11} = k_{85}x_1/x_5^{1.2}$$

k=86

$$\partial v_{86}/\partial x_2 = k_{86}x_{12}$$

$$\partial v_{86}/\partial x_{12} = k_{86}x_2$$

k=87

$$(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj} = 1.5k_{87}x_6^2x_7C_N^{0.5}/\{(x_8+x_6)x_5\}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_1 = 2(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_2 = (\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_3 = 4(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_4 = 3(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_5 = -k_{87}x_6^2x_7C_N^{1.5}/\{(x_8+x_6)x_5^2\} + (\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_6 = 2k_{87}x_6x_7x_8C_N^{1.5}/\{(x_8+x_6)^2x_5\}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_7 = k_{87}x_6^2C_N^{1.5}/\{(x_8+x_6)x_5\} + 2(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_8 = -k_{87}x_6^3x_7C_N^{1.5}/\{(x_8+x_6)^2x_5\} + (\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_9 = 4(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_{10} = 2(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_{11} = 4(\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_{12} = (\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

$$\partial v_{87}/\partial x_{13} = (\partial v_{87}/\partial C_N)_{xj}$$

k=88

$$\partial v_{88}/\partial x_{23} = k_{88}$$

k=89

$$\partial v_{89}/\partial x_{24} = k_{89}$$

k=90

$$\partial v_{90}/\partial x_{25} = k_{90}$$

k=91

$$\partial v_{91}/\partial x_{26} = k_{91}$$

k=92

$$\partial v_{92} / \partial x_{25} = k_{92}$$

k=93

$$\partial v_{93} / \partial x_{24} = k_{93}$$

k=94

$$\partial v_{94} / \partial x_{26} = k_{94}$$

k=95

$$\partial v_{95} / \partial x_4 = k_{95} x_5^4 x_{23}$$

$$\partial v_{95} / \partial x_5 = 4k_{95} x_4 x_5^3 x_{23}$$

$$\partial v_{95} / \partial x_{23} = k_{95} x_4 x_5^4$$

k=96

$$\partial v_{96} / \partial x_5 = 2k_{96} x_5 x_{11} x_{23}$$

$$\partial v_{96} / \partial x_{11} = k_{96} x_5^2 x_{23}$$

$$\partial v_{96} / \partial x_{23} = k_{96} x_5^2 x_{11}$$

k=97

k=1 ~ 97

97 個の Jacobian 解析解で示されていない式は、全て

$$\partial v_{1 \sim 97} / \partial x_j = 0$$

である。

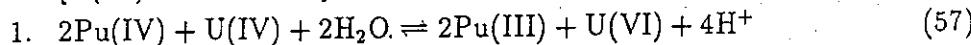
2.3 部分平衡論改良モデル

2.3.1 Two-step model の概要

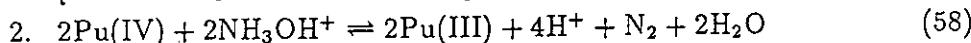
ケース 2.において部分平衡論で取扱う化学反応式 3 個を以下に示す。

U-Pu-Np 系

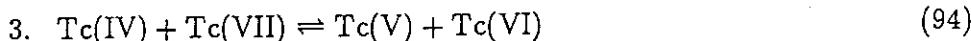
[U(IV) による還元式]



[HAN : NH_3OH^+ による還元式]



U-Pu-Tc-Zr 系



これ迄の平衡論的取扱いでは⁴⁾、

$$F_s(X) = \kappa_{cs} \prod_k [x_k]^{a_{ks}-b_{ks}} - 1 \quad \text{とおき}$$

ここで、 $X = ([x_1], [x_2], \dots, [x_K])^T$ (時間 T における各化学種モル濃度)、

$$F_s(X) = 0$$

の解 X を、 $s = 57, 58, \dots$ で連立させて求めることが課題であり、結果的には、線形方程式解法を核にした反応計算を行なっていた。ここで a_{ks}, b_{ks} は正、逆反応の化学量論係数である。

Two-step model では、U(IV) による反応の方が HAN による反応より速く起きることを利用し、(57) 式を先行させ、 $F_{57}(X) = 0$ の解を先に求め、 $F_{58}(X) = 0$ の解を後で求める方法をとる。つまり、ウランの反応で消費された残りの Pu(IV) が HAN の反応が起きると仮定する。

反応式 (57) によって U(IV) 濃度が ω_1 モル減少すれば、Pu(IV) は $2\omega_1$ モル減少し、逆に Pu(III) が $2\omega_1$ モル増加、U(VI) が ω_1 モル増加、 H^+ が $4\omega_1$ モル増加する。

平衡時の物質収支方程式

$$G_1(\omega_1) = \kappa_{c1}([\text{Pu(IV)}] - 2\omega_1)^2([\text{U(IV)}] - \omega_1) / ([\text{Pu(III)}] + 2\omega_1)^2([\text{U(VI)}] + \omega_1) ([\text{H}^+] + 4\omega_1)^4 \quad (2-1)$$

$$X = X^n + (b_{k1} - a_{k1})\omega_1, \quad X = ([x_1], [x_2], \dots, [x_K])^T$$

が成立するように ω_1 を求める。(2-1) 式ではモル濃度 [Pu(IV)]、[U(IV)]、[Pu(III)]、[U(VI)]、
[H⁺] は [x₁], [x₂], ..., [x_K] に対応する。

平衡状態に達している場合には、左辺 $G_1(\omega_1) = 1$ 、つまり、

$$F_{57}(X) = G_1(\omega_1) - 1 = 0 \text{ である。}$$

このとき、(2-1) 式の右辺を計算するためのモル濃度 [Pu(IV)] 等は、直前の計算値、つまり、該当する時間刻みで動的計算(速度論に基づく計算)の影響のみ加算したモル濃度 ($[x_k]^{n+1}$)^{*} とする。また、平衡定数 $\kappa_{c1} = \kappa_{f1}/\kappa_{b1}$ は、反応式 (57) に適応する逆反応定数を使用する：

$$\kappa_{f1} = 5.0 \times 10^3, \quad \kappa_{b1} = 10^{-4}$$

(2-1) 式は ω_1 に関する高次代数方程式となるので、このまま解くと多くの解が出て適切な値を選ぶのが難しい。むしろ、反応式 $s = 57, 58, \dots$ で連立せず、反復法を用いて解く方法が良い。1変数の Newton/Raphson 法を使って反復式を作り、(57) 式平衡条件を満たす化学種モル濃度 X を求める。このため、 $F(X) = 0$ となる ω_1 をまず求める。m を反復回数とすれば、

$$F^{m+1} = F^m + \partial F_1^m / \partial \omega_1 (\omega_1^{m+1} - \omega_1^m) = F^m + \partial F_1^m / \partial \omega_1 (\delta \omega_1^{m+1})$$

Newton/Raphson 法では、左辺を 0 とする $\delta \omega_1^{m+1}$ を求める。

$A_1^m = \partial F_1^m / \partial \omega_1$ とおき、次式で A_1^m を計算する。

$$A_1^m = (G_1^m)^{-1} \sum_k (a_{k1} - b_{k1})(a_{k1} - b_{k1}) / [x_k]^m \quad (2-2)$$

ここで、 $G_1^m = \kappa_{c1} \prod_k [x_k]^{a_{k1} - b_{k1} m}$

$$A_1^m (\delta \omega_1^{m+1}) = - F_1^m \text{ から、 } \delta \omega_1^{m+1} = - F_1^m / A_1^m \quad (2-3)$$

$[x_k]$ の更新は次式によって行なう。

$$[x_k]^{m+1} = [x_k]^m + (a_{k1} - b_{k1})(\delta \omega_1^{m+1}) \quad (2-4)$$

$\omega_1^0 = 0$ とおき、

$$\omega_1^{m+1} = \omega_1^m + \delta \omega_1^{m+1} \quad (2-5)$$

とし、 $|\delta \omega_s^{m+1} / \omega_s^m| < \varepsilon$ となるまで反復を繰り返す。 $\quad (2-6)$

収束後 (2-4) 式から得た $[x_k]$ の値を用いて反応式 (58) に対応した計算を同様に実行する。ただし、実際の化学反応においてウラナスの反応（反応式 (57)）によって生成した Pu(III) ($k=4$ の時) が HAN の反応（反応式 (58)）の逆反応によって Pu(IV) に戻る（同時に HAN が生成する！）ことは全く考えなくて良いので、Pu(III) のモル濃度に関しては比率 r ($0 \leq r \leq 0.1$) のみ： $[x_k]_r$ が HAN の反応に使われるものとする。これを新たに $([x_k]^{n+1})$ とおき、これを初期値として、反応式 (58) を計算する。なお、(2-1) 式に当たる式は次のとおりである。

$$G_2(\omega_2) = \kappa_{c2} ([\text{Pu(IV)}] - 2\omega_2)^2 ([\text{HAN}] - 2\omega_2)^2 / ([\text{Pu(III)}] + 2\omega_2)^2 ([\text{H}^+] + 4\omega_2)^4 \quad (2-7)$$

平衡定数 $\kappa_{c2} = \kappa_{f2} / \kappa_{b2}$ は、反応式 (58) に適応する逆反応定数を使用する：

$$\kappa_{f2} = 7.32 \times 10^{-1}, \kappa_{b2} = 10^{-2}$$

その後の $[x_k]$ を制式に $[x_k]^{n+1}$ とおく。ただし、Pu(III) については、HAN の反応に使われなかつた分： $[x_k] (1 - r)$ を加算する。

このようにして得られたモル濃度 $[x_k]^{n+1}$ は反応式 (57)、(58) に関する平衡条件は実際には成立していないことに注意を要する。例えば、(57) 式の平衡条件は、

$$1 = \kappa_{c1} [\text{Pu(IV)}]^2 [\text{U(IV)}] / ([\text{Pu(III)}]^2 [\text{U(VI)}] [\text{H}^+])^4 \quad (2-8)$$

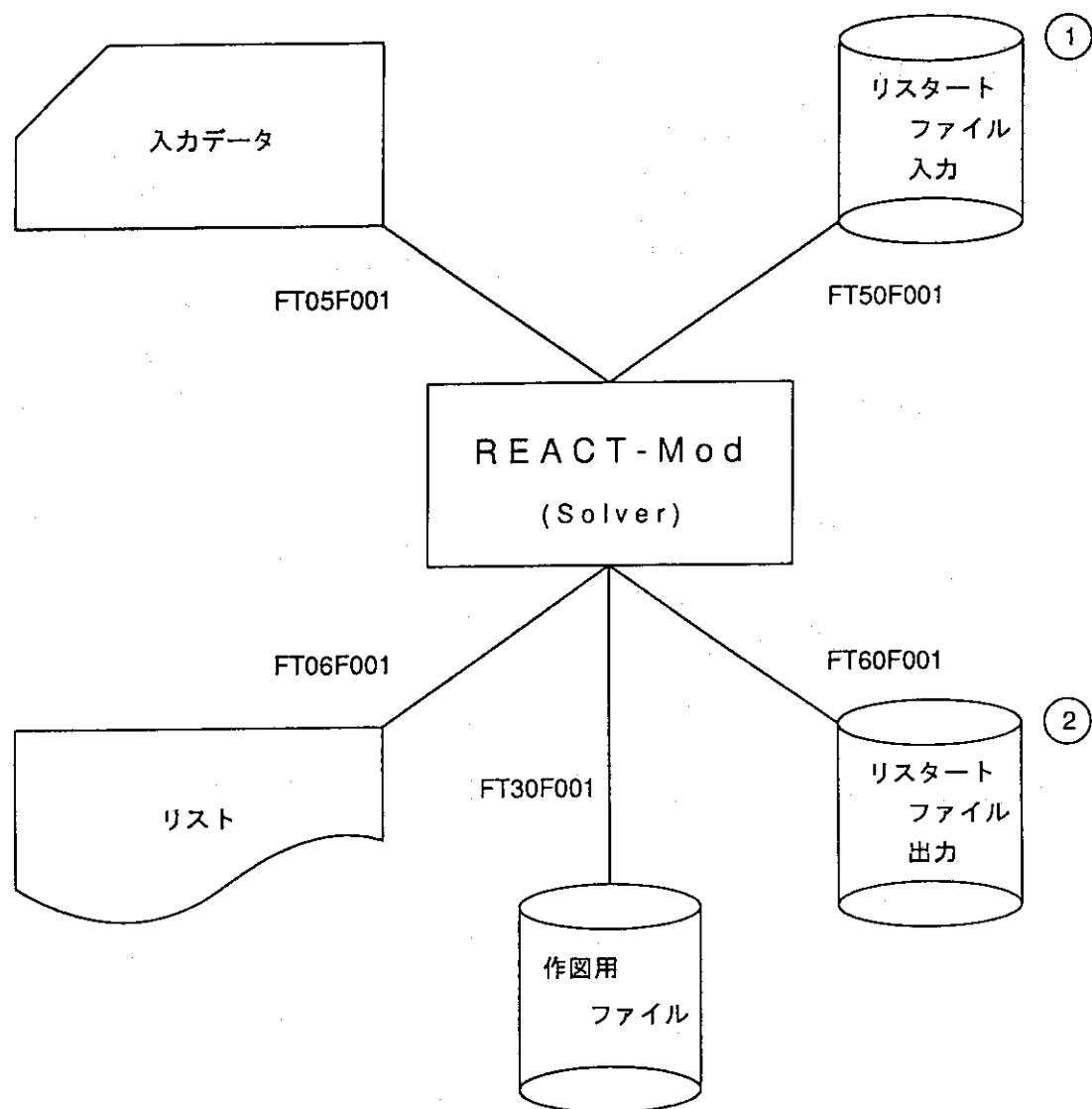
(58) 式に共通に現れる Pu(IV)、Pu(III)、 H^+ のモル濃度が (58) 式の計算後変化している。(58) 式の平衡条件も Pu(III) の濃度に一貫性を欠くので成立しているとは言えない。

以上のプロセスを図示すると次のようになる。

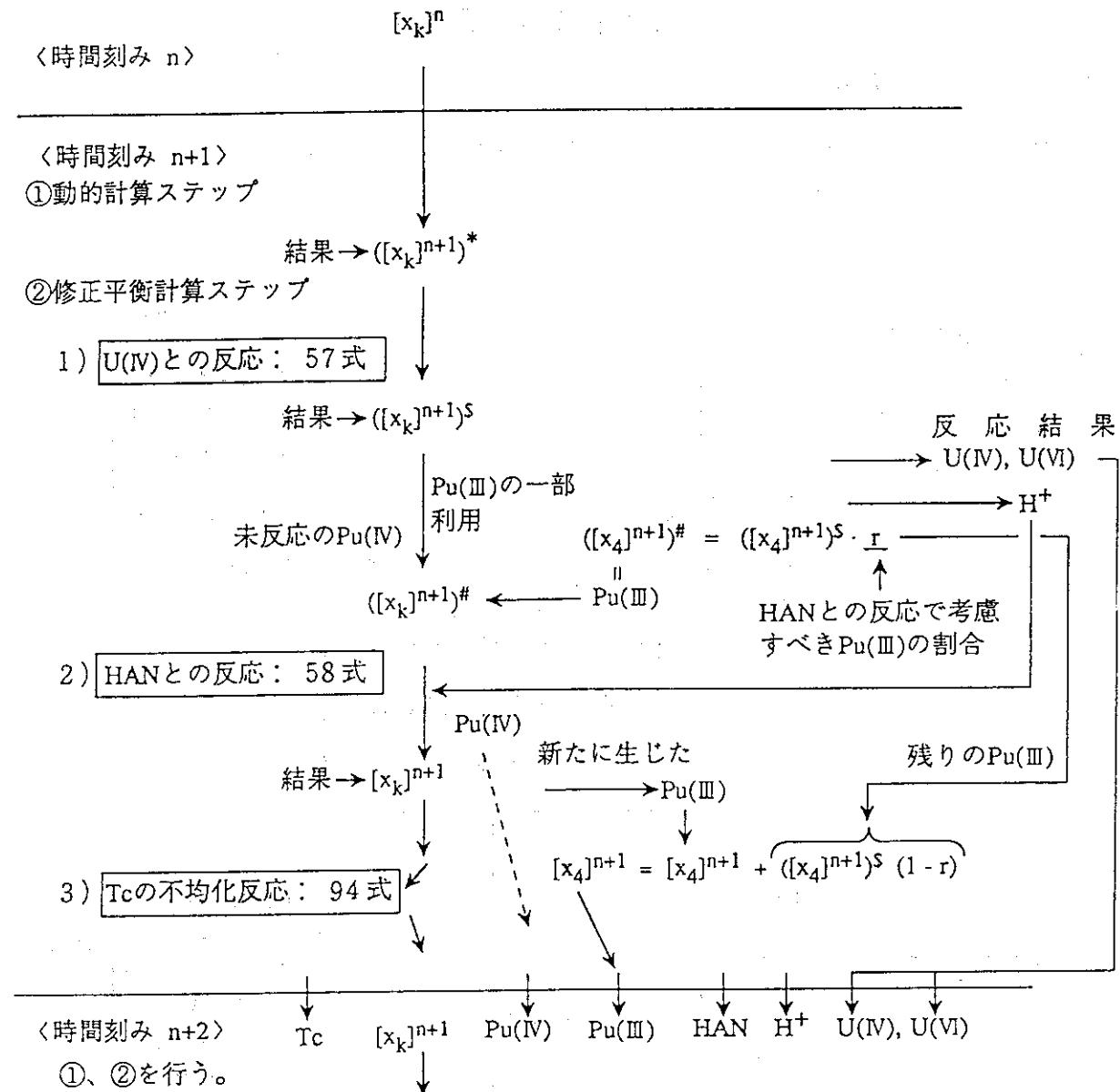
3 プログラムの概要

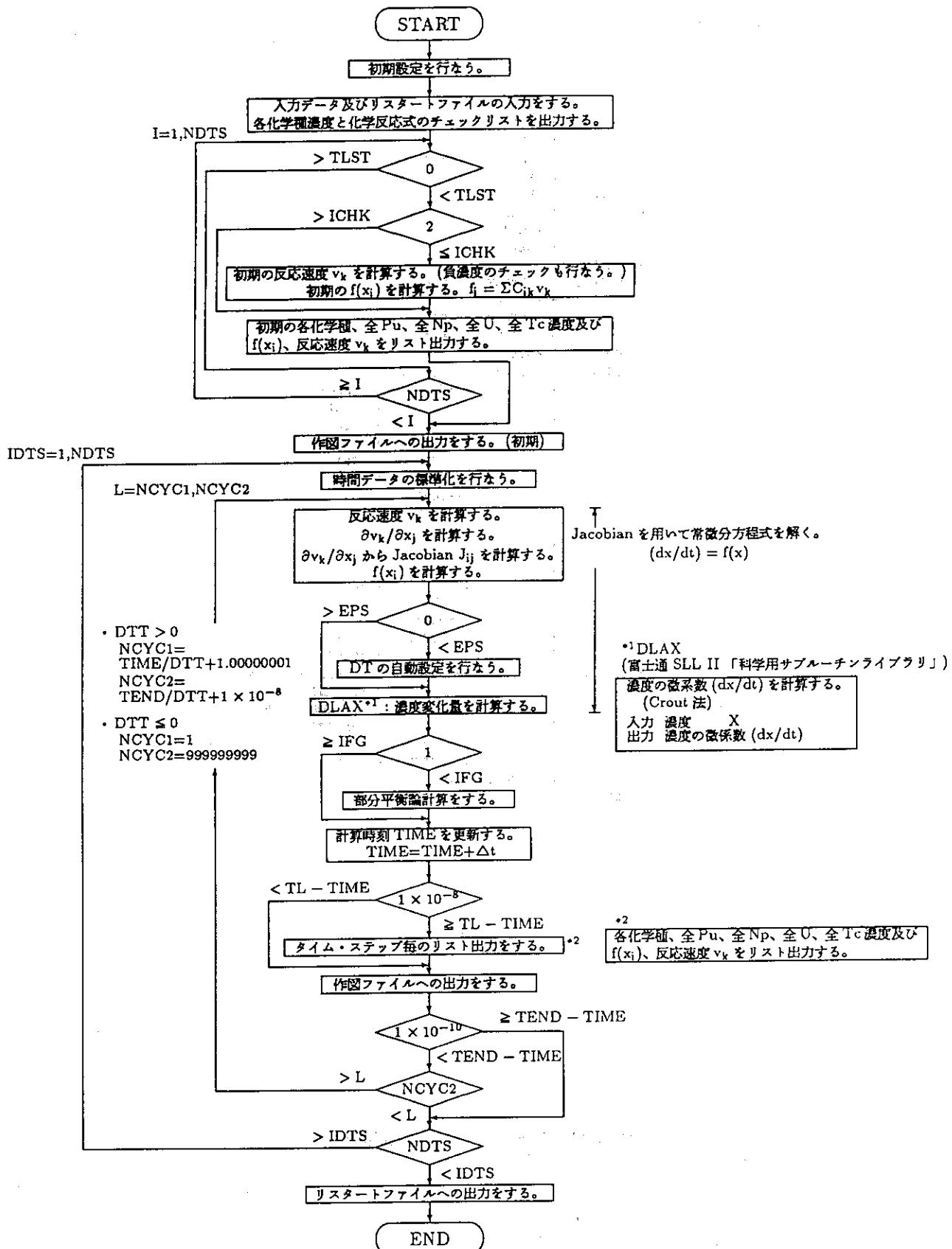
3.1 システム構成

REACT-Mod コードのシステム構成を以下に示す。



①, ② . . . リスタート計算の場合必要





REACT-Mod コードの処理フロー

3.2 木構造と処理フロー

```

MAIN ----INPUT ----*MAX
|      +--*MIN
|      +--RSTIN
|      +--ELMOUT ----*MIN
|      +--EQCHK
+--VCALC ----EPSCHK
|      +--SQRT
|      +--DLOG
|      +--DEXP
+--FCALC
+--OUTLST ----ELMOUT ----*MIN
|      +--CXTOUT
|      +--FUNOUT ----*MIN
|      +--VELOUT ----*MIN
+--OUTFIL ----*MOD
+--SOLVE ----SOLJAC ----TIMSET
|      +--VCALC ----EPSCHK
|      |      +--SQRT
|      |      +--DLOG
|      |      +--DEXP
|      --RVKRXJ ----SQRT
|      |      +--DEXP
+--JCALC
+--FCALC
+--DEFDT ----*MAX
|      +--ABS
|      +--MIN
|      +--SQRT
+--MIN
+--DLAX
+--EQUATM ----*ABS
|      +--CLOCK
+--OUTLST ----ELMOUT ----*MIN
|      +--CXTOUT
|      +--FUNOUT ----*MIN
|      +--VELOUT ----*MIN
+--MOD
+--OUTFIL ----*MOD
+--ELMOUT ----*MIN
+--RSTOUT

```

REACT-Mod コードの木構造図

3.3 入力カード

REACT-Mod コードで使用される、入力カード(データ)の詳細内容を以下に示す。

カード No.1

1. CTIT (C*72)

計算タイトル。グラフの主タイトルとしても用いられる。

変数名	CTIT
フォーマット	A72

カード No.2

1. NDTs (I*4)

時間データの数(カード No.3 でそれぞれ指定)。最大5。

2. ICHK (I*4)

チェックリストフラグ。

0=チェックリストなし

1=化学反応式のリスト

2=Pu、Np、U の物質収支リスト

3. IFINT (I*4)

プロット用ファイルへの出力インターバル。0 の場合は全てステップ出力。

4. NEPS (I*4)

ある化学種濃度が負になった場合の最大メッセージ出力回数。0 の場合は毎回出力する。

(~10)

変数名	NDTS	ICHK	IFINT	NEPS
フォーマット			4I10	

カード No.3

本カードはカード No.2 で指定した NDTs 枚必要である。

1. TEND (R*8)

計算終了時刻(min)。

2. TLST (R*8)

リスト出力間隔(min)。0 の場合は出力しない。

3. DTT (R*8)

時間キザミ幅(min)。DTT=0 とした場合は自動設定される。

4. TPRM1 (R*8)

DTT=0とした場合、 F_f を指定する。

5. TPRM2 (R*8)

DTT=0とした場合、 F_j を指定する。

変数名	TEND	TLST	DTT	TPRM1	TPRM2
フォーマット				5F10.0	

カード No.4 (4枚)

本カードは省略することができる。その場合はリスタート計算と見なされる。(リスタート・ファイルの指定が必要)

1. VOLX (R*8)

溶液体積 (dm³)。カード No.5 を指定する場合に意味をもつ。

2. AX(i) (R*8)^{*1}

化学種 i(1 ~ 26) の初期濃度 (mol/dm³)。

i = 1 Pu(VI)	11 U(IV)	21 H ₂ O ₂
2 Pu(V)	12 NH ₃ OH ⁺	22 HO ₂
3 Pu(IV)	13 N ₂ H ₅ ⁺	23 Tc(VII)
4 Pu(III)	14 e _{aq} ⁻	24 Tc(VI)
5 HNO ₃	15 NO	25 Tc(V)
6 HNO ₂	16 NO ₂	26 Tc(IV)
7 Np(VI)	17 NO ₃	
8 Np(V)	18 H	
9 Np(IV)	19 OH	
10 U(VI)	20 OH ⁻	

*1 … HNO₃、HNO₂、Pu(III) は 0 としない。

変数名	VOLX	{AX(i) i=1 ~ 6}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AX(i) i=7 ~ 13}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AX(i) i=14 ~ 20}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AX(i) i=21 ~ 26}
フォーマット		6F10.0

カード No.5 (4枚)

本カードは省略することができる。時刻0で別溶液を混入する場合に指定する。

1. VOLY (R*8)

混入する溶液体積 (dm³)。

2. AY(i) (R*8) *1

混入溶液内の化学種 i(1 ~ 26) の濃度 (mol/dm³)。

i = 1	Pu(VI)	11	U(IV)	21	H ₂ O ₂
2	Pu(V)	12	NH ₃ OH ⁺	22	HO ₂
3	Pu(IV)	13	N ₂ H ₅ ⁺	23	Tc(VII)
4	Pu(III)	14	e _{aq} ⁻	24	Tc(VI)
5	HNO ₃	15	NO	25	Tc(V)
6	HNO ₂	16	NO ₂	26	Tc(IV)
7	Np(VI)	17	NO ₃		
8	Np(V)	18	H		
9	Np(IV)	19	OH		
10	U(VI)	20	OH ⁻		

計算開始時の濃度は次式のようになる。

$$AX(i) = \{VOLX \cdot AX(i) + VOLY \cdot AY(i)\} / (VOLX + VOLY)$$

変数名	VOLY	{AY(i) i=1 ~ 6}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AY(i) i=7 ~ 13}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AY(i) i=14 ~ 20}
フォーマット		7F10.0
変数名		{AY(i) i=21 ~ 26}
フォーマット		6F10.0

カード No.6 (ネームリスト形式)

本カードは省略することができる。

1. AK(k) (R*8)

k 番目の反応式の反応速度定数 (mol · min)。

2. GPU (R*8)

Pu 全体量。

NAMELIST/CONST/AK(k),AG(i),GPU
 k=1 ~ 97
 i = 1 ~ 26

カード No.7 (ネームリスト形式)

本カードはリスタート計算を行なう時だけ省略することができる。

1. AKF(k) (R*8)
k 番目の反応式の順反応速度定数 (mol · min)。
2. AKB(k) (R*8)
K 番目の反応式の逆反応速度定数 (mol · min)。
3. EPSI (R*8)
部分平衡論計算の収束判定値。

NAMELIST/EQUAT/AKF(k),AKB(k),EPSI
k=1 ~ 97

カード No.8 (ネームリスト形式)

本カードはリスタート計算を行なう時だけ省略することができる。

1. DLTT (R*8)
反応微小時間 (min)。
2. WXM (R*8)
係数 m。

NAMELIST/VFIVE/DLTT,WXM

カード No.9 (ネームリスト形式)

本カードはリスタート計算を行なう時だけ省略することができる。

1. IFG (I*4)
部分平衡論計算を行なうか行なわないかのフラグ。
 - 0= 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Rad 系)
化学反応式 1 ~ 56 の 56 式を計算する。
 - 1= 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)
化学反応式 57 ~ 97 の 41 式を計算する。
 - 2= 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np 系)
化学反応式 57 ~ 87 の 31 式を計算する。
 - 59 ~ 87 の 29 式は速度論計算。
 - 57、58 の 2 式は平衡論計算。
 - 3= 速度論計算及び部分平衡論計算 (Tc-Zr-U-Pu 系)
化学反応式 88 ~ 97 の 10 式を計算する。
 - 88 ~ 93、95 ~ 97 の 9 式は速度論計算。
 - 94 の 1 式は平衡論計算。

4= 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

化学反応式 57 ~ 97 の 41 式を計算する。

- 59 ~ 93、 95 ~ 97 の 38 式は速度論計算。
- 57、 58、 94 の 3 式は平衡論計算。

NAMELIST/FLAG/IFG

カード No.10 (ネームリスト形式)

本カードはリスタート計算を行なう時だけ省略することができる。

1. DTIME (R*8)

各カードの実計算終了時刻の更新幅 (min)。 NNTS の数だけ指定する。

2. CETIME (R*8)

各カードの実計算終了時刻 (min)。 NNTS の数だけ指定する。

3. ETIME (R*8)

コードの実計算終了時刻 (min)。 CETIME で最後のカードに指定した時刻を指定する。

4. IRFG (I*4)

リスタート計算のコントロールフラグ。

0 = リスタート計算のコントロールを行なわない

1 = リスタート計算のコントロールを行なう

5. NNTS (I*4)

計算を開始するカード No(必ず 1 を指定する)。

NAMELIST/TIMED/DTIME(i), CETIME(i), ETIME, IRFG, NNTS
 $i=1 \sim NNTS$

※ リスタート計算を行なわない時は、 1. ~ 4. は 0 を指定する。

3.4 入力データ例

REACT-Mod コードで、U-Pu-Np-Rad 系と U-Pu-Np-Tc-Np 系の両方を選択的に計算するために、選択フラグを追加した入力データモデル及び入力データを 5 ケース示す。

1) ケース 1

1.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-5} (min)

化学反応式数 : 56 個の U-Pu-Np-Rad 系反応式 (速度式 56 個)

初期濃度	Pu(VI)	1.0×10^{-4} [mol/l]	Np(VI)	1.0×10^{-4} [mol/l]
	Pu(V)	1.0×10^{-4} [mol/l]	Np(V)	1.0×10^{-4} [mol/l]
	Pu(IV)	2.0×10^{-1} [mol/l]	Np(IV)	1.0×10^{-4} [mol/l]
	Pu(III)	1.0×10^{-6} [mol/l]	U(VI)	5.0×10^{-1} [mol/l]
	HNO ₃	3.0 [mol/l]	N ₂ H ₅ ⁺	1.0×10^{-2} [mol/l]
	HNO ₂	1.0×10^{-5} [mol/l]	OH ⁻	1.0×10^{-7} [mol/l]
	Pu	1.0×10^1 [gPu/l]		
	・他の化学種は 0.0 [mol/l]			

1.2) 入力データ

```

UPER : REACTION, M-PORSING (U-PU-HP-RAD)
      1      2      10     10
1.0D00  1.0D-1  1.0D-5  0.0D00  0.0D00
1.0D00  1.0D-4  1.0D-4  2.0D-1  1.0D-6  3.0D00  1.0D-5
1.0D-4  1.0D-4  1.0D-4  5.0D-1  0.0D00  0.0D00  1.0D-2
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  1.0D-7
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00
0.0D00

*CONST
  AK(57) = 41*0.00DO,
  GPU    = 1.0D01,
*END

*EQCNT
  AKF   = 97*0.00DO,
  AKB   = 97*0.00DO,
  EPSI  = 2.0D-2,
*END

*VFIVE
  DLTT  = 7.75D-5,
  WIM   = 1.00D00,
*END

*FLAG
  IFG   = 0,----*1
*END

*TIMED
  DTIME = 0.0DO,
  CETIME = 0.0DO,
  ETIME  = 0.0DO,
  IRFG   = 0,
  NNDTS  = 1,
*END

```

2) ケース 2

2.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-5} (min)

化学反応式数 : 41 個の U-Pu-Np-Tc-Zr 系反応式 (速度式 41 個)

初期濃度	: Pu(VI)	1.0×10^{-3}	[mol/l]	NH ₃ OH ⁺	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: Pu(IV)	1.0×10^{-2}	[mol/l]	N ₂ H ₅ ⁺	2.0×10^{-1}	[mol/l]
	: Pu(III)	1.0×10^{-6}	[mol/l]	Tc(VII)	1.0×10^{-2}	[mol/l]
	: HNO ₃	1.0	[mol/l]	Tc(VI)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: HNO ₂	1.0×10^{-5}	[mol/l]	Tc(V)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: U(IV)	1.0×10^{-1}	[mol/l]	Tc(IV)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: Pu	0.0	[gPu/l]			
	・他の化学種は 0.0 [mol/l]					

2.2) 入力データ

UPHTZ : REACTION, M-PORSING (U-PU-NP-TC-ZR)

	1	2	10	10		
1.0D00	1.0D-1	1.0D-5	0.0D00	0.0D00		
1.0D00	1.0D-3	0.0D00	1.0D-2	1.0D-6	1.0D00	1.0D-5
0.0D00	0.0D00	0.0D00	0.0D00	1.0D-1	1.0D-6	2.0D-1
0.0D00						
0.0D00	0.0D00	1.0D-2	1.0D-6	1.0D-6	1.0D-6	
	0.0D00					

```

*CONST
  AK    = 56*0.0D0,
*END

```

```

*EQCNT
  AKF   = 97*0.0D0,
  AKB   = 97*0.0D0,
  EPSI  = 2.0D-2,
*END

```

```

*VFIVE
  DLTT  = 7.75D-5,
  WXM   = 1.00D00,
*END

```

```

*FLAG
  IFG   = 1,----*1
*END

```

```

*TIMED
  DTIME = 0.0D0,
  CETIME= 0.0D0,
  ETIME = 0.0D0,
  IRFG  = 0,
  NNDTS = 1,
*END

```

3) ケース 3

3.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-3} (min)

化学反応式数 : 5 個の U-Pu-Np-Rad 系反応式 (速度式 3 個、平衡式 2 個)

初期濃度	: Pu(VI)	1.0×10^{-3}	[mol/l]	NH ₃ OH ⁺	1.0×10^{-5}	[mol/l]
	: Pu(IV)	2.0×10^{-1}	[mol/l]	N ₂ H ₅ ⁺	1.0×10^{-1}	[mol/l]
	: Pu(III)	1.0×10^{-5}	[mol/l]			
	: HNO ₃	1.0	[mol/l]			
	: HNO ₂	1.0×10^{-5}	[mol/l]			
	: U(IV)	1.0×10^{-1}	[mol/l]			
	: Pu	0.0	[gPu/l]			
	・他の化学種は 0.0 [mol/l]					

3.2) 入力データ

```

UPNE : REACTION, M-PORSING (U-PU-NP.EQUATIONAL-2)
      1      2      10     10
      1.0D00  1.0D-1  1.0D-3  0.0D00  0.0D00
      1.0D00  1.0D-3  0.0D00  2.0D-1  1.0D-5  1.0D00  1.0D-5
      0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  1.0D-1  1.0D-5  1.0D-1
      0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00
      0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00
      0.0D00

&CONST
  AK = 56*0.0DO, 0.0DO, 0.0DO, 3.80D-2, 7.00D-1,
        3.00D4, 36*0.0DO,
&END

&EQCNT
  AKF = 56*0.0DO0, 5.0DO3, 7.32D-1, 39*0.0DO,
  AKB = 56*0.0DO0, 1.0D-4, 1.00D-2, 39*0.0DO,
  EPSI = 2.0D-2,
&END

&VFIVE
  DLTT = 7.75D-5,
  WIM = 1.00D00,
&END

&FLAG
  IFG = 2,-----※1
&END

&TIMED
  DTIME = 0.0DO,
  CETIME = 0.0DO
  ETIME = 0.0DO
  IRFG = 0,
  NBDTS = 1
&END

```

4) ケース 4

4.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-2} (min)

化学反応式数 : 10 個の Tc-Zr-U-Pu 系反応式 (速度式 9 個、平衡式 1 個)

初期濃度	: Pu(IV)	1.0×10^{-2}	[mol/l]	$N_2H_5^+$	2.0×10^{-1}	[mol/l]
	: Pu(III)	1.0×10^{-6}	[mol/l]	Tc(VII)	1.0×10^{-2}	[mol/l]
	: HNO_3	1.0	[mol/l]	Tc(VI)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: HNO_2	1.0×10^{-5}	[mol/l]	Tc(V)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: U(IV)	1.0×10^{-1}	[mol/l]	Tc(IV)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: NH_3OH^+	1.0×10^{-6}	[mol/l]			
	: Pu	0.0	[gPu/l]			
	・他の化学種は 0.0 [mol/l]					

4.2) 入力データ

```

TZUPE : REACTION, M-PORSING (TC-ZR-U-PU, EQUATIONAL-1)
      1       2       10      10
1.0D00  1.0D-1   1.0D-2   0.0D00  0.0D00
1.0D00  0.0D00  0.0D00  1.0D-2   1.0D-6   1.0D00  1.0D-5
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  1.0D-1   1.0D-6   2.0D-1
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00
0.0D00  0.0D00  1.0D-2   1.0D-6   1.0D-6   1.0D-6
0.0D00

*CONST
  AK     = 87*0.0D0,
  AK(94) = 0.0D0,
*END

*EQCNT
  AKF    = 93*0.0D0, 3.30D1, 3*0.0D0,
  AKB    = 93*0.0D0, 3.30D-4, 3*0.0D0,
  EPSI   = 2.0D-2,
*END

*VFIVE
  DLTT   = 7.75D-5,
  WXM    = 1.00D00,
*END

*FLAG
  IFG    = 3,----*1
*END

*TIMED
  DTIME  = 0.0D0,
  CETIME = 0.0D0,
  ETIME  = 0.0D0,
  IRFG   = 0,
  NMDTS = 1,
*END

```

5) ケース 5

5.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-3} (min)

化学反応式数 : 41 個の U-Pu-Np-Tc-Zr 系反応式 (速度式 38 個、平衡式 3 個)

初期濃度	: Pu(VI)	1.0×10^{-3}	[mol/l]	NH ₃ OH ⁺	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: Pu(IV)	1.0×10^{-2}	[mol/l]	N ₂ H ₅ ⁺	2.0×10^{-1}	[mol/l]
	: Pu(III)	2.0×10^{-6}	[mol/l]	Tc(VII)	1.0×10^{-2}	[mol/l]
	: HNO ₃	1.0	[mol/l]	Tc(VI)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: HNO ₂	1.0×10^{-5}	[mol/l]	Tc(V)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: U(IV)	1.0×10^{-1}	[mol/l]	Tc(IV)	1.0×10^{-6}	[mol/l]
	: Pu	0.0	[gPu/l]			
		• 他の化学種は 0.0	[mol/l]			

5.2) 入力データ

UPNTZE: REACTION, M-PORSING (U-PU-NP-TC-ZR, EQUATIONAL-3)

1	2	10	10		
1.0D00	1.0D-1	1.0D-3	0.0D00	0.0D00	
1.0D00	1.0D-3	0.0D00	1.0D-2	1.0D-6	1.0D00 1.0D-5
0.0D00	0.0D00	0.0D00	0.0D00	1.0D-1	1.0D-6 2.0D-1
0.0D00	0.0D00	0.0D00	0.0D00	0.0D00	0.0D00
0.0D00	0.0D00	1.0D-2	1.0D-6	1.0D-6	1.0D-6
0.0D00					

*CONST

AK = 58*0.0D0,
 AK(94) = 0.0D0,

*END

*EQCNT

AKF = 56*0.0D00, 5.0D03, 7.32D-1, 35*0.0D0,
 3.30D1, 3*0.0D0
 AKB = 56*0.0D00, 1.0D-4, 1.00D-2, 35*0.0D0,
 3.30D-4, 3*0.0D0,
 EPSI = 2.0D-2,

*END

*VFIVE

DLTT = 7.75D-5,
 WXM = 1.00D00,

*END

*FLAG

IFG = 4,----*1

*END

*TIMED

DIIME = 0.0D0,
 CETIME = 0.0D0,
 ETIME = 0.0D0,
 IRFG = 0,
 NWDTS = 1,

*END

(備考)

- 各入力データ中の※1は、追加した選択フラグである。

IFG : 部分平衡論計算を行なうか行なわないかのフラグ

0 = 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Rad 系)

1 = 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

2 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np 系)

3 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (Tc-Zr-U-Pu 系)

4 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

- IFG に対する詳細は、3.3 章の入力カード参照。
- 各入力データケースは、4 章の計算結果の表 1 から 5 に対応している。
- 解法の指定が無くなつたため、従来使用していた IOPT データを削除した。(4 章の計算結果参照)

3.5 化学量論係数

REACT-Mod コードの化学反応式中の化学量論係数(左辺では消費されるので負号をつけ、右辺では生成されるので正号をつける。式中に表れない時は 0 となる。)を次頁以降に示す。

備考)

- 各入力データ中の※1は、追加した選択フラグである。

IFG : 部分平衡論計算を行なうか行なわないかのフラグ

0 = 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Rad 系)

1 = 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

2 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np 系)

3 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (Tc-Zr-U-Pu 系)

4 = 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

- IFG に対する詳細は、3.3 章の入力カード参照。
- 各入力データケースは、4 章の計算結果の表 1 から 5 に対応している。
- 解法の指定が無くなったため、従来使用していた IOPT データを削除した。(4 章の計算結果参照)

3.5 化学量論係数

REACT-Mod コードの化学反応式中の化学量論係数(左辺では消費されるので負号をつけ、右辺では生成されるので正号をつける。式中に表れない時は 0 となる。)を次頁以降に示す。

化学量論系数、反応速度定数及び G 値

化学種 (記号)	Pu(VI) x_1	Pu(V) x_2	Pu(IV) x_3	Pu(III) x_4	HNO ₃ x_5	Np(VI) x_6	Np(V) x_7	Np(IV) x_8	U(VI) x_9	U(IV) x_{10}	U(VI) x_{11}	NH ₃ O ⁺ x_{12}	N ₂ H ₅ ⁺ x_{13}	
	e_{aq}^- x_{14}	NO x_{15}	NO ₂ x_{16}	NO ₃ x_{17}	H x_{18}	OH ⁻ x_{19}	OH ⁻ x_{20}	H ₂ O ₂ x_{21}	H ₂ O ₂ x_{22}	Tc(VII) x_{23}	Tc(VI) x_{24}	Tc(V) x_{25}	Tc(IV) x_{26}	
G Value	5.85		0.85	0.85		2.7		1.45						
反応速度定数														
$k_1 = 5 \times 10^3$				-2	+2	+2	+2					+1	-1	
$k_2 = 7.32 \times 10^{-1}$				-1	+1	+2							-1	
$k_3 = 3.8 \times 10^{-2}$				-1	+1									-1
$k_4 = 7 \times 10^{-1}$				+2	-2	+1								
$k_5 = 3 \times 10^4$							-1							-1
$k_6 = 2.5$						+4	-1	+2	-1					
$k_7 = 7 \times 10^1$				-1	+1	+4		+1	-1					
$k_8 = 8.3$						+4	-1	+1						-1
$k_9 = 7$						+4	-2	+2		+1	-1			
$k_{10} = 2.25$						-4		-2	+2	+1	-1			
$k_{11} = 9.21 \times 10^1$						+1	-1	+1						-1
$k_{12} = 2.5 \times 10^2$			+1	-1	+1									
$k_{13} = 3.7 \times 10^1$				-1	+2	-1	-4							
$k_{14} = 7.9$			-2	+2		+3	-1							
$k_{15} = 2.76 \times 10^2$		-1	+1	+1	-1									
$k_{16} = 3.58$		+2	-2			-3	+1							
$k_{17} = 8 \times 10^{-4}$						-4		+1	-2	+1				
$k_{18} = 9 \times 10^{-4}$						-3	+1	+2	-2					
$k_{19} = 4.75 \times 10^{-4}$						+5	+1	+2	-2					
$k_{20} = 1$					+1	-1		-1	+1					

化学量論係数、反応速度定数及び G 値

化學組 (記号)	Pu(VI) x ₁	Pu(V) x ₂	Pu(IV) x ₃	Pu(III) x ₄	HNO ₃ x ₅	HNO ₂ x ₆	Np(VI) x ₇	Np(V) x ₈	Np(IV) x ₉	U(VI) x ₁₀	U(IV) x ₁₁	NH ₃ OH ⁺ x ₁₂	N ₂ H ₅ ⁺ x ₁₃
	e _{aq} x ₁₄	NO x ₁₅	NO ₂ x ₁₆	NO ₃ x ₁₇	H x ₁₈	OH ⁻ x ₁₉	H ₂ O ₂ x ₂₀	Tc(VII) x ₂₁	HO ₂ x ₂₂	Tc(VI) x ₂₃	Tc(V) x ₂₄	Tc(IV) x ₂₅	Tc(IV) x ₂₆
G Value	5.85		0.85				2.7		1.45				
反応速度定数													
k ₂₁ = 5.98 × 10 ⁻²				+1		-1	-4			-1		+1	
k ₂₂ = 3.14 × 10 ⁻¹	-1	+1											-2
k ₂₃ = 1.65 × 10 ⁻³		+1	-2	+1		+4							
k ₂₄ = 3.45 × 10 ⁻¹	+1	-2	+1			-4							
k ₂₅ = 4.36 × 10 ²							+1	-1				-1	
k ₂₆ = 7.7 × 10 ⁻²	-2	+2				+3						-1	
k ₂₇ = 1.86 × 10 ²	-2	+2				+4					+1	-1	
k ₂₈ = 6.64 × 10 ⁻²		-1			+1	-2						-2	
k ₂₉ = 1.44 × 10 ¹²	-1						-1						
k ₃₀ = 1.2 × 10 ¹²		-1		+1									-2
k ₃₁ = 3.6 × 10 ⁸				+1		-1		+1					
k ₃₂ = 6 × 10 ⁷				+1					+2				
k ₃₃ = 1.8 × 10 ¹¹				-1	+1								
k ₃₄ = 6 × 10 ⁸				-1	+1			-1		+1			
k ₃₅ = 3.9 × 10 ¹²	-1	+1											
k ₃₆ = 1.5 × 10 ¹⁰	-1	+1					-1						
k ₃₇ = 6 × 10 ⁹							+1	+1					
k ₃₈ = 2.4							-2		-1	-1			
k ₃₉ = 3.3 × 10 ⁷							+2						
k ₄₀ = 4.5 × 10 ⁵							+1	-1	+1	-1		-1	

化学量論係数、反応速度定数及び G 値

化学位 (番号)	Pu(VI) x ₁	Pu(V) x ₂	Pu(IV) x ₃	Pu(III) x ₄	HNO ₃ x ₅	Np(VI) x ₆	Np(V) x ₇	Np(IV) x ₈	U(VI) x ₁₀	U(IV) x ₁₁	NH ₃ O ⁺ x ₁₂	N ₂ H ₅ ⁺ x ₁₃
	C _{aq} x ₁₄	NO x ₁₅	NO ₂ x ₁₆	NO ₃ x ₁₇	H x ₁₈	OH ⁻ x ₁₉	H ₂ O ₂ x ₂₀	Tc(VII) x ₂₁	Tc(VI) x ₂₂	Tc(V) x ₂₃	Tc(V) x ₂₄	Tc(IV) x ₂₆
G Value	5.85		0.85	0.85		2.7		1.45				
反応速度定数												
k ₄₁ = 6	-1	+1						-1				
k ₄₂ = 5.4 × 10 ⁵	+1	-1						+1				
k ₄₃ = 4.2 × 10 ⁻¹			-1		-1			-1				
k ₄₄ = 1.56 × 10 ⁵			+1		+1			+1				
k ₄₅ = 6 × 10 ¹⁰	+1	-1			-1							
k ₄₆ = 1.5 × 10 ¹⁰			+1		+1			-1				
k ₄₇ = 1.5 × 10 ⁵			+1		-1							
k ₄₈ = 1.2 × 10 ⁵			-1		-1							
k ₄₉ = 1.8		-1	+1						-1		+1	
k ₅₀ = 6 × 10 ⁷								+1		-2		
k ₅₁ = 7.8 × 10 ³		+2	+2					-4				
k ₅₂ = 1.2 × 10 ⁶		+1	-1					-1				
k ₅₃ = 8.4 × 10 ⁹						+1		-1				
k ₅₄ = 6 × 10 ¹⁰		+1	-1					-1				
k ₅₅ = 2.7 × 10 ¹⁰			+1		-1							
k ₅₆ = 9 × 10 ⁻⁴						+3	-1	-2	+2			
k ₅₇ = 5 × 10 ³					-2	+2	+2			+1	-1	
k ₅₈ = 7.32 × 10 ⁻¹					-1	+1	+2				-1	
k ₅₉ = 3.8 × 10 ⁻²					-1	+1					-1	
k ₆₀ = 7 × 10 ⁻¹					+2	-2	-2	+1				

化学量論係数、反応速度定数及び G 値

化学組 (記号)	Pu(VI) x_1	Pu(V) x_2	Pu(IV) x_3	Pu(III) x_4	HNO ₃ x_5	Np(VI) x_6	Np(V) x_7	Np(IV) x_8	U(VI) x_{10}	U(VI) x_{11}	NH ₃ OH ⁺ x_{12}	N ₂ H ₅ ⁺ x_{13}
	e_{aq}^- x_{14}	NO x_{15}	NO ₂ x_{16}	NO ₃ x_{17}	H x_{18}	OH ⁻ x_{19}	OH ⁻ x_{20}	H ₂ O ₂ x_{21}	Tc(VII) x_{23}	Tc(V) x_{24}	Tc(V) x_{25}	Tc(IV) x_{26}
G Value	5.85		0.85	0.85					2.7	1.45		
反応速度定数												
$k_{61} = 3 \times 10^4$									-1			-1
$k_{62} = 2.5$						+4			-1	+2	-1	
$k_{63} = 7 \times 10^1$				-1	+1	+4			+1	-1		
$k_{64} = 8.3$							-1	+1			-1	
$k_{65} = 7$					+4		-2	+2		+1	-1	
$k_{66} = 2.25$						-4			-2	+2	+1	-1
$k_{67} = 9.21 \times 10^1$						+1		-1	+1			-1
$k_{68} = 2.5 \times 10^2$	+1	-1	-1	+1								
$k_{69} = 3.7 \times 10^1$	-1	+2	-1	-4								
$k_{70} = 7.9$	-2	+2		+3	-1							
$k_{71} = 2.76 \times 10^2$	-1	+1	+1	-1								
$k_{72} = 3.58$	+2	-2		-3	+1							
$k_{73} = 1 \times 10^{-5}$				-1	+1							
$k_{74} = 3 \times 10^{-3}$				+1	-1							
$k_{75} = 8 \times 10^{-4}$				-4		+1	-2	+1				
$k_{76} = 9 \times 10^{-4}$				-3	+1	+2	-2					
$k_{77} = 4.75 \times 10^{-4}$				+5	+1		+2	-2				
$k_{78} = 1$				+1	-1		-1	+1				
$k_{79} = 5.98 \times 10^{-2}$			+1	-1	-4			-1	+1			
$k_{80} = 3.14 \times 10^{-1}$	-1	+1									-2	

化学量論係数、反応速度定数及び G 値

化学種 (記号)	Pu(VI) x ₁	Pu(V) x ₂	Pu(IV) x ₃	Pu(III) x ₄	HNO ₃ x ₅	HNO ₂ x ₆	Np(VI) x ₇	Np(V) x ₈	U(VI) x ₁₀	U(V) x ₁₁	NH ₃ OH ⁺ x ₁₂	N ₂ H ₅ ⁺ x ₁₃	
	c _{aq} x ₁₄	NO x ₁₅	NO ₂ x ₁₆	NO ₃ x ₁₇	H x ₁₈	OH x ₁₉	OH ⁻ x ₂₀	H ₂ O ₂ x ₂₁	Tc(VII) x ₂₂	Tc(VI) x ₂₃	Tc(V) x ₂₄	Tc(IV) x ₂₅	Tc ₆
G Value	5.85		0.85		2.7		1.45						
反応速度定数													
k ₆₁ = 1.65 × 10 ⁻³		+1		-2		+1	+4						
k ₆₂ = 3.45 × 10 ⁻¹	+1		-2	+1		-4							
k ₆₃ = 4.36 × 10 ²						+1	-1				-1		
k ₆₄ = 7.7 × 10 ⁻²	-2		+2			+3					-1		
k ₆₅ = 1.86 × 10 ²	-2		+2			+4				+1	-1		
k ₆₆ = 6.64 × 10 ⁻²		-1			+1	-2				-1	+1		
k ₆₇ = 9 × 10 ⁻⁴					+3	-1	-2	+2		-1		-1	
k ₆₈ = 6.6 × 10 ⁻⁵										-1	+1		
k ₆₉ = 2.5										-1		-1	
k ₇₀ = 2.5										-1		-1	
k ₇₁ = 1 × 10 ⁻¹						+1				+1		+1	
k ₇₂ = 3.3 × 10 ⁻²							+1			+1		-1	
k ₇₃ = 6.6 × 10 ⁻³							+1			-1			
k ₇₄ = 3.3 × 10 ¹										-1		-1	
k ₇₅ = 7.82 × 10 ⁻⁴			+3	-3	-4					-1	+1	+1	
k ₇₆ = 4.6 × 10 ⁻¹										-1	-3		
k ₇₇ = 1 × 10 ⁻⁷										-2		+2	
										-1		-1	

3.6 JCL

REACT-Mod コードのための各種 JCL を示す。

3.6.1 ロードモジュール作成 JCL

ロードモジュールを作成するための JCL 例を以下に示す。

```
T(03) C(04) I(04) W(01) SRP
//FORTEX EXEC FORTEX,SO='JXXXX.REACT95', -----※ 1
//          A='ELM(*),NONUM',B='NOPRINT',OPT=B
//SYSINC DD DSN=JXXXX.REACT95.INC.FORT77,DISP=SHR,LABEL=(,,,IN) -----※ 2
//LKEDCTEX EXEC LKEDCTEX,LM='JXXXX.REACT95',UNIT=DXXXX -----※ 3
//
```

(備考)

- JCL 中の※ 1 から※ 3 を以下に示す。

※ 1 . . . REACT-Mod コードソースファイル

※ 2 . . . REACT-Mod コードインクルードファイル

※ 3 . . . 作成されるロードモジュールファイル

3.6.2 計算実行 JCL

計算を実行するための JCL 例を以下に示す。

```

T(06) C(04) I(04) W(01) SRP
//LMGOEX EXEC LMGOEX,LM='JXXXX.REACT95' ----- ※1
//FT60F001 DD DUMMY, ----- ※2
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//FT50F001 DD DUMMY ----- ※3
//FT30F001 DD DSN=&&GRP,DISP=(NEW,PASS), ----- ※4
//          UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,50),RLSE),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//SYSIN    DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(UPNR),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN) ----- ※5
//

```

(備考)

- JCL 中の※1 から※5 を以下に示す。

※1 . . . REACT-Mod コードロードモジュールファイル
 ※2 . . . リスタートデータ出力ファイル
 ※3 . . . リスタートデータ入力ファイル
 ※4 . . . 作図用データ出力ファイル
 ※5 . . . REACT-Mod コード入力データファイル

3.6.3 作図実行 JCL

作図を実行するための JCL 例を以下に示す。

```

T(06) C(04) W(04) I(04) GRP
//LMGOEX EXEC LMGOEX,LM='JXXXX.REACT95' ----- ※ 1
//FT60F001 DD DUMMY, ----- ※ 2
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//FT50F001 DD DUMMY ----- ※ 3
//FT30F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOT00,DISP=(NEW,PASS),----- ※ 4
//          UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,50),RLSE),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//SYSIN   DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(UPNR),DISP=SHR ----- ※ 5
//*****
//FORT77P EXEC FORTTEX,SO='JXXXX.REACT1G', ----- ※ 6
//          A='ELM(*),NONUM',B='NOPRINT',OPT=B
//SYSINC  DD DSN=JXXXX.REACT95.INC.FORT77,DISP=SHR ----- ※ 7
//LINKP   EXEC LKEDEX,GRLIB=PNL
//GOP     EXEC GOEX
//FT11F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOT00,DISP=(OLD,DELETE) ----- ※ 8
//SYSIN   DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(PLOT),DISP=SHR ----- ※ 9
// EXPAND  GRNLP,SYSOUT='*'
//

```

(備考)

- JCL 中の※1 から※5 を以下に示す。

※1 . . . REACT-Mod コードロードモジュールファイル

※2 . . . リスタートデータ出力ファイル

※3 . . . リスタートデータ入力ファイル

※4 . . . 作図計算結果出力ファイル

※5 . . . REACT-Mod コード入力データファイル

※6 . . . 作図用ソースファイル

※7 . . . REACT-Mod コード作図用インクルードファイル

※8 . . . 作図用データ入力ファイル

※9 . . . REACT-Mod コード作図用入力データファイル

4 計算結果例

REACT-Mod コードを用いて、選択して行なった 5 ケースの計算結果を以下の表 1 から 5 に示す。

表 1. ケース 1 速度論計算 (U-Pu-Np-Rad 系) IFG=0

Pu(VI)	Pu(V)	Pu(IV)	Pu(III)	HNO ₃	HNO ₂	Np(VI)	Np(V)
1.0000D - 04	1.0000D - 04	2.0000D - 01	1.0000D - 06	3.0000D + 00	1.0000D - 05	1.0000D - 04	1.0000D - 04
2.0234D - 04	1.9501D - 07	1.9988D - 01	1.2270D - 04	3.0001D + 00	3.7059D - 10	7.5949D - 05	1.4156D - 04
Np(IV)	U(VI)	U(IV)	NH ₃ OH ⁺	N ₂ H ₅ ⁺	e _{aq} ⁻	NO	NO ₂
1.0000D - 04	5.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
8.2495D - 05	5.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	9.9631D - 03	1.1658D - 21	6.8640D - 21	1.6080D - 08
NO ₃	H	OH	OH ⁻	H ₂ O ₂	HO ₂	Tc(VII)	Tc(VI)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 07	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
9.8578D - 13	7.0364D - 16	4.3807D - 17	4.2888D - 06	6.3242D - 11	1.1243D - 07	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Tc(V)	Tc(IV)						
0.0000D + 00	0.0000D + 00						
0.0000D + 00	0.0000D + 00						

- CPU = 12m51s98, ΔT = 1.0×10^{-5} (min), TIME(実計算時間) = 1.000(min)

表 2. ケース 2 速度論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系) IFG=1

Pu(VI)	Pu(V)	Pu(IV)	Pu(III)	HNO ₃	HNO ₂	Np(VI)	Np(V)
1.0000D - 03	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06	1.0000D + 00	1.0000D - 05	0.0000D + 00	0.0000D + 00
3.2357D - 08	6.9037D - 04	6.4838D - 07	1.0310D - 02	1.0113D + 00	2.4107D - 08	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Np(IV)	U(VI)	U(IV)	NH ₃ OH ⁺	N ₂ H ₅ ⁺	e _{aq} ⁻	NO	NO ₂
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 01	1.0000D - 06	2.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	6.9056D - 03	9.3094D - 02	9.1635D - 07	1.9593D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
NO ₃	H	OH	OH ⁻	H ₂ O ₂	HO ₂	Tc(VII)	Tc(VI)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	4.9311D - 03	2.3650D - 03
Tc(V)	Tc(IV)						
1.0000D - 06	1.0000D - 06						
2.3598D - 03	3.4706D - 04						

- CPU = 12m46s44, ΔT = 1.0×10^{-5} (min), TIME(実計算時間) = 1.000(min)

表 3. ケース 3 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np 系) IFG=2

Pu(VI)	Pu(V)	Pu(IV)	Pu(III)	HNO ₃	HNO ₂	Np(VI)	Np(V)
1.0000D - 03	0.0000D + 00	2.0000D - 01	1.0000D - 05	1.0000D + 00	1.0000D - 05	0.0000D + 00	0.0000D + 00
1.0000D - 03	0.0000D + 00	2.3756D - 04	1.9977D - 01	1.3995D + 00	1.5817D - 09	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Np(IV)	U(VI)	U(IV)	NH ₃ OH ⁺	N ₂ H ₅ ⁺	e _{aq} ⁻	NO	NO ₂
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 01	1.0000D - 05	1.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	1.0000D - 01	1.1063D - 10	2.2952D - 04	9.9979D - 02	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
NO ₃	H	OH	OH ⁻	H ₂ O ₂	HO ₂	Tc(VII)	Tc(VI)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Tc(V)	Tc(IV)						
0.0000D + 00	0.0000D + 00						
0.0000D + 00	0.0000D + 00						

- CPU = 00m08s01, ΔT = 1.0×10^{-3} (min), TIME(実計算時間) = 1.000(min)

表 4. ケース 4 速度論計算及び部分平衡論計算 (Tc-Zr-U-Pu 系) IFG=3

Pu(VI)	Pu(V)	Pu(IV)	Pu(III)	HNO ₃	HNO ₂	Np(VI)	Np(V)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06	1.0000D + 00	1.0000D - 05	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	9.9998D - 07	1.0000D + 00	2.3220D - 08	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Np(IV)	U(VI)	U(IV)	NH ₃ OH ⁺	N ₂ H ₅ ⁺	ϵ_{aq}^-	NO	NO ₂
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 01	1.0000D - 06	2.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	1.0975D - 03	9.8902D - 02	9.0000D - 07	1.9513D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
NO ₃	H	OH	OH ⁻	H ₂ O ₂	HO ₂	Tc(VII)	Tc(VI)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	3.9168D - 03	2.9750D - 03
Tc(V)	Tc(IV)						
1.0000D + 06	1.0000D + 06						
2.9646D + 03	1.4663D + 04						

- CPU = 00m00s97, $\Delta T = 1.0 \times 10^{-2}$ (min), TIME(実計算時間) = 1.000(min)

表 5. ケース 5 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系) IFG=4

Pu(VI)	Pu(V)	Pu(IV)	Pu(III)	HNO ₃	HNO ₂	Np(VI)	Np(V)
1.0000D - 03	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06	1.0000D + 00	1.0000D - 05	0.0000D + 00	0.0000D + 00
3.4986D - 08	6.8778D - 04	6.4201D - 07	1.0313D - 02	1.0220D + 00	2.6072D - 08	0.0000D + 00	0.0000D + 00
Np(IV)	U(VI)	U(IV)	NH ₃ OH ⁺	N ₂ H ₅ ⁺	ϵ_{aq}^-	NO	NO ₂
0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 01	1.0000D - 06	2.0000D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
0.0000D + 00	6.9097D - 03	9.3090D - 02	1.0215D - 04	1.9430D - 01	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00
NO ₃	H	OH	OH ⁻	H ₂ O ₂	HO ₂	Tc(VII)	Tc(VI)
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	1.0000D - 02	1.0000D - 06
0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	0.0000D + 00	3.0342D - 03	3.4840D - 03
Tc(V)	Tc(IV)						
1.0000D - 06	1.0000D - 06						
3.4671D - 03	1.7622D - 05						

- CPU = 00m09s29, $\Delta T = 1.0 \times 10^{-3}$ (min), TIME(実計算時間) = 1.000(min)

備考)

上段 ··· 各化学種 中段 ··· 初期濃度 下段 ··· 1min 後の濃度

- 表 1 から 5 中の IFG に對しては、3.3 章参照。

5 結論

核燃料サイクルにおいて主要なアクチノイドとされるウラン、プルトニウムおよびネプツニウムを対象に、硝酸溶液系における各種の化学反応の過渡現象を追跡するマクロなモデル：REACT-Mod を完成した。これは、主として再処理プロセスを念頭においているので、テクネチウムの挙動も扱うことができる。これらの系には、極めて迅速な反応として放射線化学反応と Pu(IV) の還元反応、Tc の不均化反応があり、一方非常にゆっくりとした反応もある。その両者の進行を正確に追おうとすると、どうしても最も迅速な反応に引きづられて、微少な時間刻み幅の計算（計算時間の増大を招く）にならざるを得ない。したがって、REACT-Mod では、Two-step model（部分平衡論）による改良を試みつつも、全部を速度論で行うモデルも残さざるを得なかった。今後の方向として、コンピュータの高速化に依存しつつも、より優れた数値解法が現れることを願っている。

次に、対象とする反応系の拡大（すなわち化学反応数の増大）であるが、REACT-Mod における結果から、反応式の個数が例えれば一桁増えても、計算時間への影響は小さいと言える。最も直接的な影響は、迅速反応による時間刻み幅である。したがって、対象とする反応系を Am や Cm にまで拡大する事に原則問題は無い。但し、新規反応の中に、現在の REACT-Mod にのっている反応以上に迅速なものがあれば、一工夫必要かも知れない。

最後に、序論でも述べたように、各金属イオンや硝酸等の化学種それ自体の特性（振る舞い）を記述した精巧なモデル（ミクロあるいはマクロスケール）が出現すれば、ここで追跡している現象そのものが、速度式を与えることなく描写出来るであろう。その実現が最も興味深い次の目標である。

参考文献

- 1) 館盛勝一 “DIST：ピュレックス系分配比計算コードシステム” JAERI 1337 (1996).
- 2) 館盛勝一 “アクチノイド元素の硝酸水溶液系化学反応数値モデル：REACT” JAREI-M 90-018 (1990).
- 3) 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).
- 4) 石黒美佐子、館盛勝一、内藤新司朗 “アクチノイド元素の化学反応の部分平衡論的数学モデル” JAERI 93-056 (1993).

5 結論

核燃料サイクルにおいて主要なアクチノイドとされるウラン、プルトニウムおよびネプツニウムを対象に、硝酸溶液系における各種の化学反応の過渡現象を追跡するマクロなモデル：REACT-Mod を完成した。これは、主として再処理プロセスを念頭においているので、テクネチウムの挙動も扱うことができる。これらの系には、極めて迅速な反応として放射線化学反応と Pu(IV) の還元反応、Tc の不均化反応があり、一方非常にゆっくりとした反応もある。その両者の進行を正確に追おうとすると、どうしても最も迅速な反応に引きづられて、微少な時間刻み幅の計算（計算時間の増大を招く）にならざるを得ない。したがって、REACT-Mod では、Two-step model（部分平衡論）による改良を試みつつも、全部を速度論で行うモデルも残さざるを得なかった。今後の方向として、コンピュータの高速化に依存しつつも、より優れた数値解法が現れることを願っている。

次に、対象とする反応系の拡大（すなわち化学反応数の増大）であるが、REACT-Mod における結果から、反応式の個数が例えれば一桁増えても、計算時間への影響は小さいと言える。最も直接的な影響は、迅速反応による時間刻み幅である。したがって、対象とする反応系を Am や Cm にまで拡大する事に原則問題は無い。但し、新規反応の中に、現在の REACT-Mod にのっている反応以上に迅速なものがあれば、一工夫必要かも知れない。

最後に、序論でも述べたように、各金属イオンや硝酸等の化学種それ自体の特性（振る舞い）を記述した精巧なモデル（ミクロあるいはマクロスケール）が出現すれば、ここで追跡している現象そのものが、速度式を与えることなく描写出来るであろう。その実現が最も興味深い次の目標である。

参考文献

- 1) 館盛勝一 “DIST：ピュレックス系分配比計算コードシステム” JAERI 1337 (1996).
- 2) 館盛勝一 “アクチノイド元素の硝酸水溶液系化学反応数値モデル：REACT” JAREI-M 90-018 (1990).
- 3) 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).
- 4) 石黒美佐子、館盛勝一、内藤新司朗 “アクチノイド元素の化学反応の部分平衡論的数学モデル” JAERI 93-056 (1993).

付 錄

A. リスタート計算の方法

A.1 繰り返し自動計算

A.2 JCL

A.2.1 リスタート計算実行 JCL

A.2.2 作図実行 JCL

A.3 入力データ例

A.4 サブルーチン

A.5 コモン

B. REACT-Mod のサブルーチンとコモン

A.1 サブルーチン

A.2 コモン

C. REACT-Mod のソースプログラム

A リスタート計算の方法

以前の REACT コード²⁾に組み込まれていた、リスタート計算を実行しやすくするために、REACT-Mod コードにおいては以下の改良がくわえられている。

A.1 繰り返し自動計算

以前の REACT コード²⁾のリスタート計算は、

1. 初期計算用の JCL を実行(手作業)
2. リスタート計算用の JCL を実行(手作業)
 - ・目的とする実計算終了時刻までリスタート計算用 JCL を繰り返す(手作業)。
 - ・リスタート計算を行なう回数と同じ数の入力データを作成する(手作業)。
 - ・リスタート計算を行なう回数と同じ数の作図用データファイルが作成される。

であった。上記作業をもっと行ないやすくするため、REACT-Mod コードでは、

1. 初期計算用の JCL を実行(手作業)
2. リスタート計算用の JCL を実行(自動)
 - ・目的とする実計算終了時刻までリスタート計算用 JCL を TSS コマンドで繰り返す(自動)。
 - ・各リスタート計算終了時に入力データの更新をする(自動)。
 - ・作図用データファイルは、初期計算からリスタート計算終了までのデータを 1 つのファイルに作成する。

と改良された。改良前と改良後の比較を分りやすく以下に示す。

1) 改良前

1. 初期計算
↓ (SUB 手作業)
2. リスタート計算
↓ (SUB 手作業)
3. リスタート計算
↓ (SUB 手作業)
4. リスタート計算
↓ (SUB 手作業)
5. リスタート計算
↓ (SUB 手作業)
6. リスタート計算
↓
7. 終了(実計算終了時刻)

2) 改良後

1. 初期計算
↓ (SUB TSS コマンド自動)
2. リスタート計算
↓ (SUB TSS コマンド自動)
- 3.(5.) リスタート計算
↓ ↑ (SUB TSS コマンド自動)
- 4.(6.) リスタート計算
↓
7. 終了(実計算終了時刻)

この様にリスタート計算を TSS コマンドにより、自動で行なうことで、計算実行に対する作業時間の短縮が出来るようになった。

備考)

- 新しいリスタート計算の正常終了メッセージとして、コンディションコード 5 が表示される。

A.2 JCL

REACT-Mod コードのリスタート計算を実行するための JCL を示す。

A.2.1 リスタート計算実行 JCL

リスタート計算を実行するための JCL 例を以下に示す。リスタート計算を、TSS コマンドで自動計算させるには、最低 4 つの JCL を用意する必要がある。

1) 初期計算

```

T(04) C(04) W(04) I(04) GRP
//LMGDEX EXEC LMGDEX,LM='JXXXX.REACT95' -----※1
//FT60F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST00,DISP=(NEW,CATLG), -----※2
//          UNIT=DXXXX,SPACE=(TRK,(15,15),RLSE),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//FT50F001 DD DUMMY -----※3
//FT30F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOTO,DISP=(NEW,CATLG), -----※4
//          UNIT=DXXXX,SPACE=(TRK,(50,50),RLSE),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//SYSIN    DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(START0),DISP=SHR -----※5
// EXEC TSSCMD,COND=(4,LT) -----※6
      SUB REACT95.CNTL(RST00)

```

(備考)

- JCL 中の※1 から※6 を以下に示す。

※1 REACT-Mod コードロードモジュールファイル

※2 リスタートデータ出力ファイル(作成)

※3 リスタートデータ入力ファイル(ダミー)

※4 作図用データ出力ファイル(作成)

※5 REACT-Mod コード入力データファイル

※6 TSS コマンド(リスタート計算 1 実行)

2) リスタート計算 1

```

T(04) C(04) W(04) I(04) GRP
//LMGOEX EXEC LMGOEX,LM='JXXXX.REACT95' -----※1
//FT60F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST01,DISP=(NEW,CATLG), -----※2
//          UNIT=DXXXX,SPACE=(TRK,(15,15),RLSE),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=6208,BLKSIZE=6212,DSORG=PS)
//FT50F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST00,DISP=SHR -----※3
//FT30F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOTO,DISP=MOD -----※4
//SYSIN    DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(RST0),DISP=SHR -----※5
// EXEC TSSCMD,COND=(4,LT) -----※6
      SUB REACT95.CNTL(RST01)

```

(備考)

- JCL 中の※1 から※6 を以下に示す。

※1 . . . REACT-Mod コードロードモジュールファイル

※2 . . . リスタートデータ出力ファイル(作成)

※3 . . . リスタートデータ入力ファイル

※4 . . . 作図用データ出力ファイル

※5 . . . REACT-Mod コード入力データファイル

※6 . . . TSS コマンド(リスタート計算 2 実行)

3) リスタート計算 2

```
T(04) C(04) W(04) I(04) GRP
//LMGOEX EXEC LMGOEX,LM='JXXXX.REACT95' ----- ※1
//FT60F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST00,DISP=SHR ----- ※2
//FT50F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST01,DISP=SHR ----- ※3
//FT30F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOTO,DISP=MOD ----- ※4
//SYSIN DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(RST0),DISP=SHR ----- ※5
// EXEC TSSCMD,COND=(4,LT) ----- ※6
      SUB REACT95.CNTL(RST02)
```

備考)

- JCL 中の※1 から※6 を以下に示す。

※1 . . . REACT-Mod コードロードモジュールファイル
※2 . . . リスタートデータ出力ファイル
※3 . . . リスタートデータ入力ファイル
※4 . . . 作図用データ出力ファイル
※5 . . . REACT-Mod コード入力データファイル
※6 . . . TSS コマンド(リスタート計算 3 実行)

4) リスタート計算 3

```

T(04) C(04) W(04) I(04) GRP
//LMGOEX EXEC LMGOEX,LM='JXXXX.REACT95' -----※1
//FT60F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST01,DISP=SHR -----※2
//FT50F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.RST00,DISP=SHR -----※3
//FT30F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOTO,DISP=MOD -----※4
//SYSIN DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(RST0),DISP=SHR -----※5
// EXEC TSSCMD,COND=(4,LT) -----※6
      SUB REACT95.CNTL(RST01)

```

備考)

- JCL 中の※1 から※6 を以下に示す。

※1 . . . REACT-Mod コードロードモジュールファイル
 ※2 . . . リスタートデータ出力ファイル
 ※3 . . . リスタートデータ入力ファイル
 ※4 . . . 作図用データ出力ファイル
 ※5 . . . REACT-Mod コード入力データファイル
 ※6 . . . TSS コマンド(リスタート計算 2 実行)

備考)

- REACT-Mod コードロードモジュールファイル作成については、3.6.1 章のロードモジュール作成 JCL を参照。

A.2.2 作図実行 JCL

作図を実行するための JCL 例を以下に示す。

```
T(03) C(04) W(04) I(04) GRP
//FORT77P EXEC FORTEX,SO='JXXXX.REACT1G', -----※1
//          A='ELM(*),NONUM',B='NOPRINT',OPT=B
//SYSINC   DD DSN=JXXXX.REACT95.INC.FORT77,DISP=SHR -----※2
//LINKP    EXEC LKEDEX,GRLIB=PNL
//GOP      EXEC GOEX
//FT11F001 DD DSN=JXXXX.REACT95.PLOTO,DISP=SHR -----※3
//SYSIN    DD DSN=JXXXX.REACT95.DATA(PLOT),DISP=SHR -----※4
// EXPAND  GRNLP,SYSOUT='*'
//
```

備考)

- JCL 中の※1 から※4 を以下に示す。

※1 . . . 作図用ソースファイル

※2 . . . REACT-Mod コード作図用インクルードファイル

※3 . . . 作図用データ入力ファイル

※4 . . . REACT-Mod コード作図用入力データファイル

A.3 入力データ例

REACT-Mod コードで、リスタート計算用データを追加した入力データモデル及び入力データ示す。

1) 初期計算データ

1.1) 入力データモデル

計算方法 : M-porsing 法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-5} (min)

化学反応式数 : 56 個の U-Pu-Np-Rad 系反応式 (速度式 56 個)

初期濃度	Pu(VI)	1.0×10^{-4}	[mol/l]	Np(VI)	1.0×10^{-4}	[mol/l]
	Pu(V)	1.0×10^{-4}	[mol/l]	Np(V)	1.0×10^{-4}	[mol/l]
	Pu(IV)	2.0×10^{-1}	[mol/l]	Np(IV)	1.0×10^{-4}	[mol/l]
	Pu(III)	1.0×10^{-6}	[mol/l]	U(VI)	5.0×10^{-1}	[mol/l]
	HNO ₃	3.0	[mol/l]	N ₂ H ₅ ⁺	1.0×10^{-2}	[mol/l]
	HNO ₂	1.0×10^{-5}	[mol/l]	OH ⁻	1.0×10^{-7}	[mol/l]
	Pu	1.0×10^1	[gPu/l]			
	・他の化学種は 0.0 [mol/l]					

1.2) 入力データ

```

UPHR : REACTION, M-PORSING (U-PU-NP-RAD)
      1      2      10     10
1.0D-1  1.0D-1  1.0D-5  0.0D00  0.0D00
1.0D00  1.0D-4  1.0D-4  2.0D-1  1.0D-6  3.0D00  1.0D-5
1.0D-4  1.0D-4  1.0D-4  5.0D-1  0.0D00  0.0D00  1.0D-2
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  1.0D-7
0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00  0.0D00
0.0D00

*CONST
  AK(57) = 41*0.00D0,
  GPU    = 1.0D01,
*END

*EQCNT
  AKF   = 97*0.00D0,
  AKB   = 97*0.00D0,
  EPSI  = 2.0D-2,
*END

*VFIVE
  DLTT  = 7.75D-5,
  WXM   = 1.00D00,
*END

*FLAG
  IFG   = 0,
*END

*TIMED
  DTIME = 1.0D-1, -----※1
  CETIME = 1.0D00, -----※2
  ETIME  = 1.0D00, -----※3
  IRFG   = 1, -----※4
  NWDTS = 1, -----※5
*END

```

(備考)

- 入力データ中の※1から※5は、追加したリスタート計算用データである。

DTIME : 各カードの実計算時刻の更新幅 (min)

CETIME : 各カードの実計算終了時刻 (min)

ETIME : コード実計算終了時刻 (min)

IRFG : リスタート計算コントロールフラグ

0 = リスタート計算のコントロールを行なわない

1 = リスタート計算のコントロールを行う

NNDTS : 計算を開始するカード No(必ず1を指定する)

0を指定した場合、計算は行なわない

- NNDTSは時間データのカードNo1から計算を始める事を意味する。2を指定した場合、時間データのカードNo2が用意されていれば、そのまま計算を行なう。もし、時間データのカードNo2が用意されていなければ、エラーとなる。
- ネームリストTIMEDに対しての詳細は、本文3.3の入力カード参照。

2) リスタート計算データ

2.1) 入力データモデル

計算方法 : M-parsing法

実計算時間 : 1 (min)

時間キザミ幅 : 1.0×10^{-5} (min)

化学反応式数 : 56個のU-Pu-Np-Rad系反応式(速度式56個)

初期濃度 : リスタートデータファイルから読み込む

2.2) 入力データ

UPMR	:	REACTION, M-PARSING (U-PU-NP-RAD)		
	1	2	10	10
1.0D-1	1.0D-1	1.0D-5	0.0D00	0.0D00

A.4 サブルーチン

REACT-Mod コードで、リスタート計算を実行しやすくするために、修正をしたサブルーチンは 5 個である。

以下にサブルーチンの修正内容を示す。

1. INPUT ... リスタート計算用データ(ネームリスト形式)の読み込み部分追加。
2. MAIN ... リスタート計算終了判定文の追加。
3. RSTIN ... リスタートデータファイルの読み込み部分追加。
4. RSTOUT ... リスタートデータファイルへの書き込み部分追加。
5. SOLJAC ... リスタート計算コントロール部分追加。

(備考)

- 1. から 5. のサブルーチンに対する機能詳細は、付録 B.1 のサブルーチン参照。

A.5 コモン

リスタート計算修正に伴い、REACT-Mod コードでパラメータの受渡しをするのに、以下のコモン(インクルードファイル中のメンバー COMMON)を追加した。

COTM(追加)

COMMON /COTM/ DTIME(NDTC), CETIME(NDTC),
ETIME, CTIME, IRFG, NNDTS, ICY1

DTIME(NDTS) . . . 各カードの実計算終了時刻の更新幅

CETIME(NDTS) . . . 各カードの実計算終了時刻

ETIME . . . コードの実計算終了時刻

CTIME . . . 実計算終了更新時刻

IRFG . . . リスタート計算のコントロールフラグ

0 = リスタート計算のコントロールを行なわない

1 = リスタート計算のコントロールを行う

NNDTS . . . 計算を開始するカード No

ICY1 . . . サイクル数

備考)

- コモンに対する詳細は、付録 B.2 のコモンを参照。

B REACT-Mod のサブルーチンとコモン

B.1 サブルーチン

REACT-Mod コードで使用される、サブルーチンの機能内容を次頁に示す。

各モジュール(サブルーチン)の名称と機能

モジュール名	機能	備考
BLOCKD	コモン変数に初期値を与える。	AKには標準的な反応速度定数、AGには100eVの放射線吸収で生成する分解生成物の分子個数、AC及びACCには反応における化学量論係数を与える。
CXTOUT	全Pu、全Np、全U、全Tc濃度をリスト出力する。	
DEFDT	(修正)Porsing法において、DTを自動的に設定する。	入力データでDTを設定した場合には自動設定はしない。
ELMOUT	各化学種濃度をリスト出力する。	
EPSCHK	負濃度のチェックを行なう。	[Pu(III)]、[HNO ₃]、[HNO ₂]については、濃度0ではいけないので最小値を10 ⁻¹⁰ としている。
EQCHK	化学反応式のチェック・リストの出力を行なう。	
EQUATM	部分平衡論計算を行なう。	[U(IV)]、[HAN]、[Tc]によるThree Step Modelである。
FCALC	f(x _i)を計算する。(v _k より)	$f_i = \sum C_{ik} v_i$
FUNOUT	f(x _i)値をリスト出力する。	
INPUT	計算データを入力する。	
JCALC	$\partial v_k / \partial x_j$ から Jacobian J _{ij} を計算する。	$J_{ij} = \sum_k C_{ik} \frac{\partial v_k}{\partial x_j}$
MAIN	計算コード・メイン・ルーチン	
OUTFIL	作図ファイルへの出力を行なう。	
OUTLST	タイム・ステップ毎のリスト出力を行なう。	
RSTIN	リスタートファイルの入力を行なう。	
RSTOUT	リスタートファイルへ出力を行なう。	
RVKRXJ	$\partial v_k / \partial x_j$ を計算する。	
SOLJAC	M-Porsing法の制御	通常の Jacobian を用いて常微分方程式を解く。これは2次までの Taylor の展開に基づいている。
SOLVE	常微分方程式の解の制御	M-Porsing法
TIMSET	時間データの標準化を行なう。	時刻 T ₁ で DT を変えた場合の例 NC1=3 NC2=6 XDT=3 · DT ₂ · XTIM TLについても同様
VCALC	反応速度 v _k を計算する。	
VELOUT	反応速度 v _k をリスト出力する。	

B.2 コモン

REACT-Mod コードで使用される、コモンの詳細内容を次頁以降に示す。

各モジュール(コモン)の名称と機能

CHARACTER

CHARACTER CPGM*8, CTIT*72, CELM*5

備考)

CPGM、CTIT、CELMに対しては、モジュール名 COMC を参照

INPLICIT

INPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)

PARAMETER

PARAMETER (NELM=26, NREF=97, NDTC=5)

NELM : 化学種の数 [I * 4]

1=Pu(VI)	11=U(IV)	21=H ₂ O ₂
2=Pu(V)	12=NH ₃ OH ⁺	22=HO ₂
3=Pu(IV)	13=N ₂ H ₅ ⁺	23=Tc(VII)
4=Pu(III)	14=e _{aq} ⁻	24=Tc(VI)
5=HNO ₃	15=NO	25=Tc(V)
6=HNO ₂	16=NO ₂	26=Tc(IV)
7=Np(VI)	17=NO ₃	
8=Np(V)	18=H	
9=Np(IV)	19=OH	
10=U(VI)	20=OH ⁻	

NREF : 反応式の数 [I * 4]

NDTC : 時間データの最大数 [I * 4]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMI
ICHK	: チェック・リスト・フラグ 0= チェックリストなし 1= 化学反応式のリスト 2=Pu、Np、U の物質収支リスト [I * 4]
ICYC	: サイクル数 [I * 4]
IDTS	: 時間データ番号 [I * 4]
NDTS	: 時間データ数 [I * 4]
IFINT	: 作図ファイルへの出力インターバル [I * 4]
NEPS	: エラーメッセージの最大出力回数 [I * 4]
NEPSC(NELM)	: エラー回数のカウンタ [I * 4]

モジュール名	COMR1
TIME0	: 計算開始時刻 (min) (リスタート以外は0) [R * 8]
TIME	: 現時刻 (min) [R * 8]
DT	: 時間キザミ幅 (min) [R * 8]
TEND(NDTC)	: 計算終了時刻 (min) [R * 8]
TLST(NDTC)	: リスト出力間隔 (min) [R * 8]
DTT(NDTC)	: 時間キザミ幅 (min) [R * 8]
TPRM1(NDTC)	: F_f の指定 [R * 8]
TPRM2(NDTC)	: F_J の指定 [R * 8]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMR2	
RADIO	: Radiolytic yield by α -ray of Pu	[R * 8]
AG(NELM)	: G 値 (100eV での放射線分解生成物の生成分子個数)	[R * 8]
GPU	: Pu 全体量	[R * 8]
CN	: 全硝酸イオン濃度 C_N (mol/dm ³)	[R * 8]
CN04	: $C_N^{0.4}$ (mol/dm ³)	[R * 8]
AX(NELM)	: 化学種 x_i 濃度 (mol/dm ³)	[R * 8]
AK(NREF)	: 反応速度定数 K_k (mol · min)	[R * 8]
AV(NREF)	: 反応速度 v_k	[R * 8]
AF(NELM)	: 化学種 x_i の生成速度 $f_i = dx_i/dt$	[R * 8]
AJ(NELM,NELM)	: Jacobian J_{ij}	[R * 8]
AC(NELM,NREF)	: 化学量論係数 C_{ik}	[R * 8]
RVRX(NREF,NELM)	: $\partial v_k / \partial x_j$	[R * 8]

モジュール名	COMR3	
XPU0	: 初期の全 Pu 濃度 (mol/dm ³)	[R * 8]
XU0	: 初期の全 U 濃度 (mol/dm ³)	[R * 8]
XNP0	: 初期の全 Np 濃度 (mol/dm ³)	[R * 8]
XTC0	: 初期の全 Tc 濃度 (mol/dm ³)	[R * 8]
TEPSC(NELM)	: 負濃度の積算用	[R * 8]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMR4	
DTMAX	: DT の最大値 (min)	[R * 8]
DTMIN	: DT の最小値 (min)	[R * 8]
IDTMX	: 最大の DT となったサイクル数	[I * 4]
IDTMN	: 最小の DT となったサイクル数	[I * 4]
モジュール名	COMR5	
AKF(NREF)	: 順反応速度定数 (mol · min) (部分平衡論計算で使用)	[R * 8]
AKB(NREF)	: 逆反応速度定数 (mol · min) (部分平衡論計算で使用)	[R * 8]
EPSI	: 部分平衡論計算の収束判定値	[R * 8]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMR6
LOOPEQ	: 部分平衡論計算の反復回数 [I * 4]
モジュール名	COMR7
ACC(NELM,NREF)	: 化学量論係数(部分平衡論計算で使用) [R * 8]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMR8
DLTT	: 反応微小時間 (min) [R * 8]
WXM	: 係数 m [R * 8]
WXA	: 係数 a [R * 8]
$a = \frac{m}{\Delta t \log e}$	
モジュール名	COMR9
CX(NELM)	: 化学種濃度 (mol/dm ³) [R * 8]

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COMC
CPGM	: コード名 [C * 8]
CTIT	: 計算タイトル [C * 72]
CELM(NELM)	: 化学種 x_i の名称 [C * 5]

モジュール名	FG
IFG	: 部分平衡論計算を行なうか行なわないかのフラグ [I * 4] 0= 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Rad 系) 1= 全て速度論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系) 2= 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np 系) 3= 速度論計算及び部分平衡論計算 (Tc-Zr-U-Pu 系) 4= 速度論計算及び部分平衡論計算 (U-Pu-Np-Tc-Zr 系)

各モジュール(コモン)の名称と機能

モジュール名	COTM
DTIME(NDTC)	: 各カードの実計算終了時刻の更新幅 (min) [R * 8]
CETIME(NDTC)	: 各カードの実計算終了時刻 (min) [R * 8]
ETIME	: コードの実計算終了時刻 (min) [R * 8]
CTIME	: 実計算終了更新時刻 (min) [R * 8]
IRFG	: リスタート計算のコントロールフラグ [I * 4] 0 = リスタート計算のコントロールを行なわない 1 = リスタート計算のコントロールを行なう
NNDTS	: 計算を開始するカード No [I * 4]
ICY1	: サイクル数 [I * 4]

C REACT-Mod のソースプログラム

DSN 1 REACT-MOD		DATE 96-06-19 TIME 17:20
MODULE	PAGE	
1 BLOCKD	1
2 CXTOUT	9
3 DEFDT	10
4 ELMOUT	11
5 EPSCNK	12
6 EQCHK	13
7 EQUATH	14
8 FCALC	18
9 FUNOUT	19
10 INPUT	20
11 JCALC	22
12 MAIN	23
13 OUTFIL	24
14 OUTLST	25
15 RSTIN	26
16 RSTOUT	27
17 RVKRXJ	28
18 SOLJAC	36
19 SOLVE	38
20 TINSET	39
21 VCALC	40
22 VELOUT	42

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 1
 MODULE : BLOCKD

```

  SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  1 1      BLOCK DATA BLOCKD
  2 2      *INCLUDE COMMON
  3 3      C
  4 4      PARAMETER ( NNM = NELM=NREF )
  5 5      C
  6 6      C** CONSTANTS OF REACTION VELOCITY *** AK=95
  7 7      C..U-PU-NP (R)..
  8 8      DATA AK / 5.000+3, 7.320-1, 3.800-2, 7.000-1, 3.000+4,
  9 9      .      2.500+0, 7.000+1, 8.300+0, 7.000+0, 2.250+0,
 10 10     .      9.210+1, 2.500+2, 3.700+1, 7.900+0, 2.760+2,
 11 11     .      3.580+0, 8.000-4, 9.000-4, 4.750+4, 1.000+0,
 12 12     .      5.980-2, 3.140-1, 1.650-3, 3.450-1, 4.360+2,
 13 13     .      7.700-2, 1.860+2, 6.640-2, 1.440+12, 1.200+12,
 14 14     .      3.600+8, 6.000+7, 1.600+11, 6.000+8, 3.900+12,
 15 15     .      1.500+10, 6.000+9, 2.400+0, 3.300+7, 4.500+5,
 16 16     .      6.000+0, 5.400+5, 4.200-1, 1.560+5, 6.000+10,
 17 17     .      1.500+10, 1.500+5, 1.200+5, 1.800+0, 6.000+7,
 18 18     .      7.800+3, 1.200+8, 8.400+9, 6.000+10, 2.700+10,
 19 19     .      9.000-4,
 20 20      C..U-PU-NP-TC-ZR..
 21 21     .      5.000+3, 7.320-1, 3.800-2, 7.000-1, 3.000+4,
 22 22     .      2.500+0, 7.000+1, 8.300+0, 7.000+0, 2.250+0,
 23 23     .      9.210+1, 2.500+2, 3.700+1, 7.900+0, 2.760+2,
 24 24     .      3.580+0, 1.000-5, 3.000-3, 8.000-4, 9.000-4,
 25 25     .      4.750+4, 1.000+0, 5.980-2, 3.140-1, 1.650-3,
 26 26     .      3.450+1, 4.360+2, 7.700-2, 1.860+2, 6.640-2,
 27 27     .      9.000-4,
 28 28     .      6.600+5, 2.50000, 2.50000, 1.000-1, 3.300-2,
 29 29     .      6.600-3, 3.300+1, 7.820-4, 4.600-1, 1.000-7 /
 30 30      C
 31 31      C** CONSTANTS OF G VALUE 3M (N+) *** AG=26
 32 32      DATA AG / 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0,
 33 33     .      0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0,
 34 34     .      0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 5.850+0, 0.000+0,
 35 35     .      8.500+1, 8.500-1, 0.000+0, 2.700+0, 0.000+0,
 36 36     .      1.450+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0, 0.000+0,
 37 37     .      0.000+0 /
 38 38      C
 39 39      DATA GPU / 1.0000/
 40 40      C
 41 41      C** CHEMICAL COEFFICIENTS IN REACTION EQUATION ***
 42 42      C.. EQUATION 1 ... PU(VI)
 43 43      DATA (ACC(1,1), I = 1, NREF)
 44 44      C..U-PU-NP (R)..
 45 45     . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 46 46     . , 000, 000, +100, 000, -200, -100, +200, 000, 000,
 47 47     . , 000, 000, 000, -100, 000, +100, 000, 000, -200, -200,
 48 48     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100,
 49 49     . , 000, 000, 000, 000, -100, +100, 000, 000, 000, +100,
 50 50     . , 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, +100,
 51 51     . , 000, 000,
 52 52      C..U-PU-NP-TC-ZR..
 53 53     . , 000, 000, 000, 600, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 54 54     . , 000, 000, +100, 000, -200, -100, +200, 000, 000,
 55 55     . , 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000, +100, 000,
 56 56     . , -200, -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 57 57     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000 /
 58 58      C.. EQUATION 2 ... PU(V)
 59 59      DATA (ACC(2,1), I = 1, NREF)
 60 60      C..U-PU-NP (R)..
 61 61     . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 62 62     . , 000, 000, -100, -100, +200, +100, -200, 000, 000,
 63 63     . , 000, 000, 000, +100, +100, -200, 000, 000, +200, +200,
 64 64     . , -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, +100,
 65 65     . , 000, 000, 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000, -100,
 66 66     . , 000, +100, 000, +100, 000, 000, +100, 000, 000, -100,
 67 67     . , 000, 000,
 68 68      C..U-PU-NP-TC-ZR..
 69 69     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 70 70     . , 000, 000, -100, -100, +200, +100, -200, 000, 000,
 71 71     . , 000, 000, 000, 000, 000, +100, +100, -200, 000,
 72 72     . , +200, +200, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 73 73     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000 /
 74 74      C.. EQUATION 3 ... PU(IV)
 75 75      DATA (ACC(3,1), I = 1, NREF)
 76 76      C..U-PU-NP (R)..
 77 77     . / -200, -100, -100, +200, 000, 000, -100, 000, 000, 000,
 78 78     . , 000, 000, -100, +200, 000, +100, 000, 000, 000, 000,
 79 79     . , 000, +100, +100, 000, -200, +100, 000, 000, 000, 000,
 80 80     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, 000, 000,
 81 81     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, +100, 000,
 82 82     . , +100, -100, -100, 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000,
 83 83     . , +100, 000,
 84 84      C..U-PU-NP-TC-ZR..
 85 85     . , -200, -100, -100, +200, 000, 000, -100, 000, 000, 000,
 86 86     . , 000, 000, -100, +200, 000, +100, 000, 000, 000, 000,
 87 87     . , 000, 000, 000, +100, +100, 000, -200, +100, 000, 000,
 88 88     . , 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 89 89     . , 000, 000, +300, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000 /
 90 90      C.. EQUATION 4 ... PU(III)
 91 91      DATA (ACC(4,1), I = 1, NREF)
 92 92      C..U-PU-NP (R)..
 93 93     . / +200, +100, +100, -200, 000, 000, +100, 000, 000, 000,
 94 94     . , 000, 000, +100, -100, 000, -100, 000, 000, 000, 000,
 95 95     . , 000, -100, -100, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 2
 MODULE 1 BLOCK0

```

SEQ SUB ....4....1....t....z....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
 96 96 . +100, 000, 000, 000, 000, +100, +100, -100, 000, 000, 000, 000,
 97 97 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000, 000,
 98 98 . -100, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 99 99 . -100, 000,
100 100 C..U-PU-NP-TC-ZR..
101 101 . / +200, +100, +100, -200, 000, 000, +100, 000, 000, 000, 000,
102 102 . 000, 000, +100, -100, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
103 103 . 000, 000, 000, -100, -100, 000, +100, 000, 000, 000, 000,
104 104 . 000, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
105 105 . 000, 000, -300, 000, 000,
106 106 C.. EQUATION 3 ... HNO3(N+)
107 107 DATA (ACC( 5, 1), I = 1, NREF)
108 108 C..U-PU-NP (R)..
109 109 . / +200, +200, 000, -200, 000, +400, +400, 000, 000, +400,
110 110 . -400, +100, 000, -400, +300, 000, -300, -400, -300,
111 111 . +500, 000, -400, 000, +400, -400, +100, +300, +400,
112 112 . -200, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
113 113 . +100, -100, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
114 114 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
115 115 . 000, +300,
116 116 C..U-PU-NP-TC-ZR..
117 117 . / +200, +200, 000, -200, 000, +400, +400, 000, 000, +400,
118 118 . -400, +100, 000, -400, +300, 000, -300, -100, +100,
119 119 . -400, -300, +500, 000, -400, 000, +400, -400, +100,
120 120 . +300, +400, -200, +300, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
121 121 . 000, 000, -400, 000, 000,
122 122 C.. EQUATION 6 ... HNO2
123 123 DATA (ACC( 4, 1), I = 1, NREF)
124 124 C..U-PU-NP (R)..
125 125 . / 000, 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
126 126 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, +100, 000, 000, +100,
127 127 . +100, 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000,
128 128 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
129 129 . +100, -100, -100, -100, +100, -100, +100, 000, 000,
130 130 . 000, 000, 000, 000, 000, -400, 000, 000, 000, 000,
131 131 . 000, -100,
132 132 C..U-PU-NP-TC-ZR..
133 133 . 000, 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
134 134 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, +100, 000, -100, 000,
135 135 . 000, +100, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
136 136 . 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, +100, 000,
137 137 . +100, 000, 000, 000, 000,
138 138 C.. EQUATION 7 ... NP(VI)
139 139 DATA (ACC( 7, 1), I = 1, NREF)
140 140 C..U-PU-NP (R)..
141 141 . / 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000, -100, -200,
142 142 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, +200,
143 143 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
144 144 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
145 145 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
146 146 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
147 147 . 000, -200,
148 148 C..U-PU-NP-TC-ZR..
149 149 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000, -100, -200,
150 150 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
151 151 . +100, +200, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
152 152 . 000, 000, 000, -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
153 153 . 000, 000, 000, 000, 000, 000,
154 154 C.. EQUATION 8 ... NP(V)
155 155 DATA (ACC( 8, 1), I = 1, NREF)
156 156 C..U-PU-NP (R)..
157 157 . / 000, 000, 000, 000, 000, +200, +100, +100, +100, +200,
158 158 . -200, +100, 000, 000, 000, 000, 000, -200, -200,
159 159 . +200, +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
160 160 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
161 161 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
162 162 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
163 163 . 000, +200,
164 164 C..U-PU-NP-TC-ZR..
165 165 . 000, 000, 000, 000, 000, +200, +100, +100, +100, +200,
166 166 . -200, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
167 167 . -200, -200, +200, +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
168 168 . 000, 000, 000, +200, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
169 169 . 000, 000, 000, 000, 000, 000,
170 170 C.. EQUATION 9 ... KP(IY)
171 171 DATA (ACC( 9, 1), I = 1, NREF)
172 172 C..U-PU-NP (R)..
173 173 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, 000, 000, 000,
174 174 . +200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, 000, 000,
175 175 . -200, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
176 176 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
177 177 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
178 178 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
179 179 . 000, 000,
180 180 C..U-PU-NP-TC-ZR..
181 181 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, 000, 000, 000,
182 182 . +200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
183 183 . +100, 000, -200, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000,
184 184 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
185 185 . 000, 000, 000, 000, 000, 000,
186 186 C.. EQUATION 10 ... U(VI)
187 187 DATA (ACC(10, 1), I = 1, NREF)
188 188 C..U-PU-NP (R)..
189 189 . / +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100,
190 190 . +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 3
 MODULE : BLOCKD

```

  SEG SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  191 191 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100,
  192 192 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  193 193 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  194 194 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  195 195 . 000, 000,
  196 196 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  197 197 . +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100,
  198 198 . +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  199 199 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  200 200 . 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  201 201 . 000, 000, 000, 000, +300, 000
  202 202 C.. EQUATION 11 ... UCIV
  203 203 DATA (AC(11, I), I = 1, NREF)
  204 204 C..U-PU-NP (R)..
  205 205 . / -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
  206 206 . -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  207 207 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
  208 208 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  209 209 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  210 210 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  211 211 . 000, 000,
  212 212 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  213 213 . -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
  214 214 . -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  215 215 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  216 216 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  217 217 . 000, 000, 000, -300, 000
  218 218 C.. EQUATION 12 ... HAWC(H3OH+)
  219 219 DATA (AC(12, I), I = 1, NREF)
  220 220 C..U-PU-NP (R)..
  221 221 . / 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  222 222 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  223 223 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, 000,
  224 224 . -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  225 225 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  226 226 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  227 227 . 000, 000,
  228 228 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  229 229 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  230 230 . 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  231 231 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
  232 232 . -100, 000, -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  233 233 . 000, 000, 000, 000, 000, -100
  234 234 C.. EQUATION 13 ... N2H3+
  235 235 DATA (AC(13, I), I = 1, NREF)
  236 236 C..U-PU-NP (R)..
  237 237 . / 000, 000, -100, 000, -100, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
  238 238 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  239 239 . 000, 000, 000, -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  240 240 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  241 241 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  242 242 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  243 243 . 000, 000,
  244 244 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  245 245 . 000, 000, -100, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
  246 246 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  247 247 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, -200, 000, 000, 000, 000, 000,
  248 248 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
  249 249 . 000, 000, 000, 000, 000, 000
  250 250 C.. EQUATION 14 ... EAQ-
  251 251 DATA (AC(14, I), I = 1, NREF)
  252 252 C..U-PU-NP (R)..
  253 253 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  254 254 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  255 255 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  256 256 . 000, -100, -100, 000, 000, 000, -100, 000, 000, -100, 000,
  257 257 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  258 258 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  259 259 . 000, 000,
  260 260 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  261 261 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  262 262 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  263 263 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  264 264 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  265 265 . 000, 000, 000, 000, 000, 000
  266 266 C.. EQUATION 15 ... NO
  267 267 DATA (AC(15, I), I = 1, NREF)
  268 268 C..U-PU-NP (R)..
  269 269 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  270 270 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  271 271 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  272 272 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  273 273 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  274 274 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  275 275 . 000, 000,
  276 276 C..U-PU-NP-TC-ZR..
  277 277 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  278 278 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  279 279 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  280 280 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  281 281 . 000, 000, 000, 000, 000, 000
  282 282 C.. EQUATION 16 ... NO2
  283 283 DATA (AC(16, I), I = 1, NREF)
  284 284 C..U-PU-NP (R)..
  285 285 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 4
 MODULE : BLOCKS

```

  SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
246 246 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
247 247 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
248 248 . 000, 000, +100, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
249 249 . -200, +200, +100, 000, +100, -100, +100, -100, 000, 000, 000, 000,
250 250 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
251 251 . 000, 000,
252 252 C..U-PU-NP-TC-ZR..
253 253 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
254 254 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
255 255 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
256 256 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
257 257 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
258 258 C.. EQUATION 17 ... N03
259 259 DATA (AC(17, I), I = 1, NREF)
260 260 C..U-PU-NP (R).. .
301 301 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
302 302 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
303 303 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
304 304 . 000, 000, 000, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
305 305 . 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
306 306 . -100, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, 000,
307 307 . 000, 000,
308 308 C..U-PU-NP-TC-ZR..
309 309 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
310 310 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
311 311 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
312 312 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
313 313 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
314 314 C.. EQUATION 18 ... N
315 315 DATA (AC(18, I), I = 1, NREF)
316 316 C..U-PU-NP (R).. .
317 317 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
318 318 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
319 319 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
320 320 . 000, +100, 000, -100, 000, 000, -100, 000, 000, 000, -100,
321 321 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
322 322 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
323 323 . 000, 000,
324 324 C..U-PU-NP-TC-ZR..
325 325 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
326 326 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
327 327 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
328 328 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
329 329 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
330 330 C.. EQUATION 19 ... OH
331 331 DATA (AC(19, I), I = 1, NREF)
332 332 C..U-PU-NP (R).. .
333 333 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
334 334 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
335 335 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
336 336 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
337 337 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
338 338 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100, -100, -100,
339 339 . -100, 000,
340 340 C..U-PU-NP-TC-ZR..
341 341 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
342 342 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
343 343 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
344 344 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
345 345 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
346 346 C.. EQUATION 20 ... OH-
347 347 DATA (AC(20, I), I = 1, NREF)
348 348 C..U-PU-NP (R).. .
349 349 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
350 350 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
351 351 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
352 352 . 000, 000, +200, +100, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
353 353 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
354 354 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
355 355 . 000, 000,
356 356 C..U-PU-NP-TC-ZR..
357 357 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
358 358 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
359 359 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
360 360 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
361 361 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
362 362 C.. EQUATION 21 ... H202
363 363 DATA (AC(21, I), I = 1, NREF)
364 364 C..U-PU-NP (R).. .
365 365 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
366 366 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
367 367 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
368 368 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
369 369 . 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
370 370 . 000, 000, -100, -100, +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
371 371 . 000, 000,
372 372 C..U-PU-NP-TC-ZR..
373 373 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
374 374 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
375 375 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
376 376 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
377 377 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
378 378 C.. EQUATION 22 ... H02
379 379 DATA (AC(22, I), I = 1, NREF)
380 380 C..U-PU-NP (R).. .

  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD           DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 5
          MODULE : BLOCK0
  -----
589 589 .....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
590 590 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
591 591 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
592 592 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
593 593 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
594 594 C..U-PU-NP-TC-ZR..
595 595   DATA (AC(23, I), I = 1, NREF)
596 596 C..U-PU-NP (R).. / 
597 597 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
598 598 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
599 599 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
600 600 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
601 601 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
602 602 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
603 603 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
604 604 C..U-PU-NP-TC-2R..
605 605 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
606 606 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
607 607 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
608 608 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, +100, /
609 609 . +100, -100, -100, -200, -100
610 610 C..EQUATION 23 ... TC(V1)
611 611   DATA (AC(23, I), I = 1, NREF)
612 612 C..U-PU-NP (R).. / 
613 613 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
614 614 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
615 615 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
616 616 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
617 617 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
618 618 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
619 619 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
620 620 C..U-PU-NP-TC-ZR..
621 621 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
622 622 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
623 623 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
624 624 . 000, 000, 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
625 625 . -100, +100, 000, 000, 000
626 626 C..EQUATION 24 ... TC(V1)
627 627   DATA (AC(24, I), I = 1, NREF)
628 628 C..U-PU-NP (R).. / 
629 629 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
630 630 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
631 631 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
632 632 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
633 633 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
634 634 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
635 635 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
636 636 C..U-PU-NP-TC-ZR..
637 637 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
638 638 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
639 639 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
640 640 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
641 641 . 000, 000, 000, 000, +100, 000, 000, +100, 000, 000, 000, 000, 000, /
642 642 C..EQUATION 25 ... TC(V)
643 643   DATA (AC(25, I), I = 1, NREF)
644 644 C..U-PU-NP (R).. / 
645 645 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
646 646 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
647 647 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
648 648 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
649 649 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
650 650 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
651 651 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
652 652 C..U-PU-NP-TC-ZR..
653 653 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
654 654 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
655 655 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
656 656 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
657 657 . 000, -100, +100, +200, 000
658 658 C
659 659 C** INITIAL ZERO CLEAR ***
660 660   DATA RVRX / MNM=0.000 /
661 661   DATA DTMAX, DTMIN / 0.000, 9.999020 /
662 662   DATA IDTMX, IDTMN / 2#0 /
663 663   DATA NEPSC / NELM#0 /
664 664   DATA TEPSC / NELM=0.000 /
665 665 C
666 666 C** PROGRAM NAME ***
667 667   DATA CPGM / 'REACT' /
668 668 C
669 669 C** ELEMENTS NAME *** CELM=22
670 670   DATA CELM
671 671 . / 'PU(6)', 'PU(5)', 'PU(4)', 'PU(3)', 'HN03', 'HN02', 'NP(6)', /
672 672 . 'NP(5)', 'NP(4)', 'U(6)', 'U(4)', 'HAN', 'N2HS+', 'EA0-',
673 673 . 'NO', 'ND2', 'N03', 'H', 'OH', 'OR-', 'R2O2',
674 674 . 'HD2', 'TC(7)', 'TC(6)', 'TC(5)', 'TC(4)' /
675 675 C

```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 6
 MODULE : BLOCKD

```

  SEQ  SUB  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8.
  476  476  C** CHEMICAL COEFFICIENTS IN REACTION EQUATION(ACC) ***
  477  477  C** U-PU-NP-TC-ZR **
  478  478  DATA (ACC(1,57),I=1,NELM)
  479  479  .  / 000, 000, -100, +100, +200, 000, 000,
  480  480  .  000, 000, 500,-500, 000, 000, 000,
  481  481  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  482  482  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  483  483  DATA (ACC(1,58),I=1,NELM)
  484  484  .  / 000, 000, -100, +100, +200, 000, 000,
  485  485  .  000, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
  486  486  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  487  487  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  488  488  DATA (ACC(1,59),I=1,NELM)
  489  489  .  / 000, 000, -100, +100, 000, 000, 000,
  490  490  .  000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
  491  491  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  492  492  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  493  493  DATA (ACC(1,60),I=1,NELM)
  494  494  .  / 000, 000, +200, -200, -200, +100, 000,
  495  495  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  496  496  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  497  497  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  498  498  DATA (ACC(1,61),I=1,NELM)
  499  499  .  / 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
  500  500  .  000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
  501  501  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  502  502  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  503  503  DATA (ACC(1,62),I=1,NELM)
  504  504  .  / 000, 000, 000, 000, +400, 000, -100,
  505  505  .  +200, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
  506  506  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  507  507  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  508  508  DATA (ACC(1,63),I=1,NELM)
  509  509  .  / 000, 000, -100, +100, +400, 000, 000,
  510  510  .  +100, -100, 000, 000, 000, 000, 000,
  511  511  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  512  512  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  513  513  DATA (ACC(1,64),I=1,NELM)
  514  514  .  / 000, 000, 000, 000, 000, 000, -100,
  515  515  .  +100, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
  516  516  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  517  517  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  518  518  DATA (ACC(1,65),I=1,NELM)
  519  519  .  / 000, 000, 000, 000, +400, 000, -200,
  520  520  .  +200, 000, +100, -100, 000, 000, 000,
  521  521  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  522  522  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  523  523  DATA (ACC(1,66),I=1,NELM)
  524  524  .  / 000, 000, 000, 000, -400, 000, 000,
  525  525  .  -200, +200, +100, -100, 000, 000, 000,
  526  526  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  527  527  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  528  528  DATA (ACC(1,67),I=1,NELM)
  529  529  .  / 000, 000, 000, 000, +100, 000, -100,
  530  530  .  +100, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
  531  531  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  532  532  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  533  533  DATA (ACC(1,68),I=1,NELM)
  534  534  .  / +100, -100, -100, +100, 000, 000, 000,
  535  535  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  536  536  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  537  537  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  538  538  DATA (ACC(1,69),I=1,NELM)
  539  539  .  / 000, -100, +200, -100, -400, 000, 000,
  540  540  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  541  541  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  542  542  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  543  543  DATA (ACC(1,70),I=1,NELM)
  544  544  .  / -200, +200, 000, 000, +300, -100, 000,
  545  545  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  546  546  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  547  547  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  548  548  DATA (ACC(1,71),I=1,NELM)
  549  549  .  / -100, +100, +100, -100, 000, 000, 000,
  550  550  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  551  551  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  552  552  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  553  553  DATA (ACC(1,72),I=1,NELM)
  554  554  .  / +200, -200, 000, 000, -300, +100, 000,
  555  555  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  556  556  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  557  557  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  558  558  DATA (ACC(1,73),I=1,NELM)
  559  559  .  / 000, 000, 000, 000, -100, +100, 000,
  560  560  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  561  561  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  562  562  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  563  563  DATA (ACC(1,74),I=1,NELM)
  564  564  .  / 000, 000, 000, 000, +100, -100, 000,
  565  565  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  566  566  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
  567  567  .  000, 000, 000, 000, 000, 000, /
  568  568  DATA (ACC(1,75),I=1,NELM)
  569  569  .  / 000, 000, 000, 000, -400, 000, +100,
  570  570  .  -200, +100, 000, 000, 000, 000, 000,
```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 7
 MODULE : BLOCKD

 SEQ SUB+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
 571 571 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 572 572 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 573 573 DATA (ACC(1,76),I=1,NELM)
 574 574 . / 000, 000, 000, 000, -300, +100, +200,
 575 575 . -200, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 576 576 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 577 577 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 578 578 DATA (ACC(1,77),I=1,NELM)
 579 579 . / 000, 000, 000, 000, +500, +100, 000,
 580 580 . +200, -200, 000, 000, 000, 000, 000,
 581 581 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 582 582 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 583 583 DATA (ACC(1,78),I=1,NELM)
 584 584 . / 000, 000, +100, -100, 000, 000, -100,
 585 585 . +100, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 586 586 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 587 587 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 588 588 DATA (ACC(1,79),I=1,NELM)
 589 589 . / 000, 000, +100, -100, -400, 000, 000,
 590 590 . -100, +100, 000, 000, 000, 000, 000,
 591 591 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 592 592 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 593 593 DATA (ACC(1,80),I=1,NELM)
 594 594 . / -100, +100, 000, 000, 000, 000, 000,
 595 595 . 000, 000, 000, 000, -200, 000,
 596 596 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 597 597 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 598 598 DATA (ACC(1,81),I=1,NELM)
 599 599 . / 000, +100, -200, +100, +400, 000, 000,
 600 600 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 601 601 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 602 602 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 603 603 DATA (ACC(1,82),I=1,NELM)
 604 604 . / +100, -200, +100, 000, -400, 000, 000,
 605 605 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 606 606 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 607 607 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 608 608 DATA (ACC(1,83),I=1,NELM)
 609 609 . / 000, 000, 000, 000, +100, -100, 000,
 610 610 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
 611 611 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 612 612 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 613 613 DATA (ACC(1,84),I=1,NELM)
 614 614 . / -200, +200, 000, 000, +300, 000, 000,
 615 615 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
 616 616 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 617 617 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 618 618 DATA (ACC(1,85),I=1,NELM)
 619 619 . / -200, +200, 000, 000, +400, 000, 000,
 620 620 . 000, 000, +100, -100, 000, 000, 000,
 621 621 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 622 622 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 623 623 DATA (ACC(1,86),I=1,NELM)
 624 624 . / 000, -100, 000, +100, -200, 000, 000,
 625 625 . 000, 000, 000, 000, -200, 000, 000,
 626 626 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 627 627 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 628 628 DATA (ACC(1,87),I=1,NELM)
 629 629 . / 000, 000, 000, 000, +300, -100, -200,
 630 630 . +200, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 631 631 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 632 632 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, /
 633 633 DATA (ACC(1,88),I=1,NELM)
 634 634 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 635 635 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
 636 636 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 637 637 . 000, -100, +100, 000, 000, /
 638 638 DATA (ACC(1,89),I=1,NELM)
 639 639 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 640 640 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
 641 641 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 642 642 . 000, 000, -100, 000, +100, 000, /
 643 643 DATA (ACC(1,90),I=1,NELM)
 644 644 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 645 645 . 000, 000, 000, 000, 000, -100, 000,
 646 646 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 647 647 . 000, 000, 000, -100, +100, 000, /
 648 648 DATA (ACC(1,91),I=1,NELM)
 649 649 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 650 650 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 651 651 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 652 652 . 000, 000, 000, +100, -100, 000, /
 653 653 DATA (ACC(1,92),I=1,NELM)
 654 654 . / 000, 000, 000, 000, 000, +100, 000,
 655 655 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 656 656 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 657 657 . 000, +100, 000, -100, 000, /
 658 658 DATA (ACC(1,93),I=1,NELM)
 659 659 . / 000, 000, 000, 000, 000, +100, 000,
 660 660 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 661 661 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 662 662 . 000, +100, -100, 000, 000, /
 663 663 DATA (ACC(1,94),I=1,NELM)
 664 664 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
 665 665 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 8
 MODULE : BLOCKD

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
666 666 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
667 667 . 000, -100, +100, +100, -100
668 668 DATA (ACC(1,95),I=1,NELM)
669 669 . / 000, 000, +300, -300, -400, 000, 000,
670 670 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
671 671 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
672 672 . 000, -100, 000, 000, +100
673 673 DATA (ACC(1,96),I=1,NELM)
674 674 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
675 675 . 000, 000, +300, -300, 000, 000, 000,
676 676 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
677 677 . 000, -200, 000, 000, +200
678 678 DATA (ACC(1,97),I=1,NELM)
679 679 . / 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
680 680 . 000, 000, 000, 000, -100, 000, 000,
681 681 . 000, 000, 000, 000, 000, 000, 000,
682 682 . 000, -100, 000, +100, 000
683 683 C
684 684 END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 9
 MODULE : CXTOUT

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
685 1 C*****
686 2 C** CXTOUT ***
687 3 C*****
688 4 SUBROUTINE CXTOUT
689 5 C
690 6 C** LIST OUTPUT OF TOTAL CONC. OF PU, NP, U, TC ***
691 7 *INCLUDE COMMON
692 8 C
693 9 XPU = AX(1) + AX(2) + AX(3) + AX(4)
694 10 XNP = AX(7) + AX(8) + AX(9)
695 11 XU = AX(10) + AX(11)
696 12 XTC = AX(23) + AX(24) + AX(25) + AX(26)
697 13 C
698 14 IF (XPU > 0.000) THEN
699 15 OPU = 1.002*(XPU/XPU - 1.000)
700 16 ELSE
701 17 OPU = 0.000
702 18 END IF
703 19 C
704 20 IF (XNP > 0.000) THEN
705 21 ONP = 1.002*(XNP/XNP - 1.000)
706 22 ELSE
707 23 ONP = 0.000
708 24 END IF
709 25 C
710 26 IF (XU > 0.000) THEN
711 27 OU = 1.002*(XU/XU - 1.000)
712 28 ELSE
713 29 OU = 0.000
714 30 END IF
715 31 C
716 32 IF (XTCO > 0.000) THEN
717 33 OTC = 1.002*(XTCO/XTCO - 1.000)
718 34 ELSE
719 35 OTC = 0.000
720 36 END IF
721 37 C
722 38 WRITE(6, 6000) 'PU', XPU, XPU, OPU,
723 39 . 'NP', XNP, XNP, ONP,
724 40 . 'U', XU, XU, OU,
725 41 . 'TC', XTC, XTC, OTC
726 42 RETURN
727 43 C
728 44 6000 FORMAT(1HO,3X,'** TOTAL CONCENTRATION VALANCE **'
729 45 . /1H ,6X,12X,'INIT',10X,'NOW',11X,'DEF. (X)'
730 46 . /1H ,6X,'TOTAL ',A,1P3014.4)
731 47 END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 10
 MODULE : DEFOT

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
732 1 C*****
733 2 C** DEFDT ***
734 3 C*****
735 4      SUBROUTINE DEFDT ( EPS, EPS2 )
736 5 C
737 6 C** DEFINE DT OF (N)-PORSING ***
738 7 *INCLUDE COMMON
739 8 C
740 9      QMAX = 0.000
741 10     QMAXR = 0.000
742 11     DO 4100 I = 1, NELM
743 12       DO 4000 J = 1, NELM
744 13         QMAX = MAX( QMAX, ABS( AJ(J, I) ) )
745 14   4000  CONTINUE
746 15   QMAX = MAX( QMAX, ABS( AF(I) ) )
747 16   4100 CONTINUE
748 17 C
749 18     IF (QMAX .LE. 0.000) QMAX = 1.000
750 19     IF (QMAXR .LE. 0.000) QMAXR = 1.000
751 20     DT = 7.000=MIN( EPS/QMAX/400.000, EPS2/SQRT(QMAXR)/40.000 )
752 21     CCCCC DT = 7.000=MIN( EPS/QMAX/400.000, 5.000=EPS2/QMAXR )
753 22 C
754 23      RETURN
755 24      END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 11
 MODULE : ELMOUT

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
756 1 C*****
757 2 C** ELMOUT ***
758 3 C*****
759 4      SUBROUTINE ELMOUT ( IX )
760 5 C
761 6 C** LIST OUTPUT OF ELEMENTAL CONCENTRATION ***
762 7 *INCLUDE COMMON
763 8 C
764 9      DIMENSION XX(NELM)
765 10 C
766 11      PARAMETER ( NLL = ? )
767 12      PARAMETER ( NNN = (NELM - 1)/NLL + 1 )
768 13 C
769 14      IE = 0
770 15 *VOCL LOOP,SCALAR
771 16      DO 4000 I = 1, NNN
772 17        IS = IE + 1
773 18        IE = MIN(NELM, IE + NLL)
774 19        WRITE(6, 6000) (CELMC(J), J = IS, IE)
775 20        WRITE(6, 6100) (XX(J) , J = IS, IE)
776 21   4000 CONTINUE
777 22 C
778 23      RETURN
779 24 C
780 25      6000 FORMAT(1H0,7A14)
781 26      6100 FORMAT(1H ,5X,1P7D14.4)
782 27      END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
  
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 12
 MODULE : EPSCHK

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
783 1 ****
784 2 C** EPSCHK ***
785 3 ****
786 4 SUBROUTINE EPSCHK ( VX )
787 5 C
788 6 C** CONCENTRATION MINIMUM CHECK ***
789 7 *INCLUDE COMMON
790 8 C
791 9      DIMENSION VX(NELM)
792 10     EPSO(NELM), ICKT(NELM)
793 11     DATA EPSO / 3=0.000, 3*1.00-10, 20=0.000 /
794 12     DATA NECT / 0 /
795 13 C
796 14     ICK = 0
797 15     DO 4000 I = 1, NELM
798 16       IF (VX(I) .LT. EPSO(I)) THEN
799 17         ICK = ICK + 1
800 18         ICXT(ICK) = I
801 19         NEPSC(I) = NEPSC(I) + 1
802 20         TEPS(I) = TEPS(I) + VX(I) - EPSO(I)
803 21       END IF
804 22     4000 CONTINUE
805 23 C
806 24     IF (ICK .GT. 0) THEN
807 25       IF (NEPS.EQ.0 .OR. NECT.LE.NEPS) THEN
808 26         NECT = NECT + 1
809 27         WRITE(6, 6000) TIME, ICYC
810 28         WRITE(6, 6100) 'OLD', (CELW(ICKT(I)), VX(ICKT(I)), I=1,ICK)
811 29         WRITE(6, 6100) 'NEW', (CELW(ICKT(I)), EPSO(ICKT(I)), I=1,ICK)
812 30       END IF
813 31 *VOCL LOOP,SCALAR
814 32     DO 4100 I = 1, ICK
815 33       VX(ICKT(I)) = EPSO(ICKT(I))
816 34     4100 CONTINUE
817 35   END IF
818 36 C
819 37   RETURN
820 38 C
821 39   6000 FORMAT(1HD,'*** WARNING IN EPSCHK, NEXTS CONC. ARE MODIFIED',
822 40   .           ' AT TIME ',IPD13.4,',',I8,' CYCLES')
823 41   6100 FORMAT(1H , '<<',A,' CONCENTRATION>>',
824 42   .           3/(1H ,2X,5(2X,A,1P09.1)))
825 43   END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 13
 MODULE : EQCHK

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
826 1 C*****
827 2 C** EQCHK ***
828 3 C*****
829 4 SUBROUTINE EQCHK
830 5 C
831 6 C** CHECK OF CHEMICAL EQUATIONS ***
832 7 C
833 8 #INCLUDE COMMON
834 9 C
835 10 CHARACTER=80 CP, CM
836 11 CHARACTER=3 CW
837 12 C
838 13 WRITE(6, 6000) CPGM, CTIT
839 14 C
840 15 *VOCAL LOOP,SCALAR
841 16 DO 4200 I = 1, NREF
842 17 CP = ' '
843 18 CM = ' '
844 19 NP = 0
845 20 NN = 0
846 21 C
847 22 DO 4000 J = 1, NELX
848 23 IF (ACC(J, I) .GT. 0.000) THEN
849 24 IF (NP .GT. 0) THEN
850 25 CP(NP+1:NP+3) = ' + '
851 26 NP = NP + 3
852 27 END IF
853 28 IF (ACC(J, I) .LT. 1.000) THEN
854 29 WRITE(CW, '(F3.0)') ACC(J, I)
855 30 CP(NP+1:NP+2) = CW(2:2) //''
856 31 NP = NP + 2
857 32 END IF
858 33 CP(NP+1:NP+5) = CELN(J)
859 34 NP = NP + 5
860 35 C
861 36 ELSE IF (ACC(J, I) .LT. 0.000) THEN
862 37 IF (NN .GT. 0) THEN
863 38 CM(NN+1:NN+3) = ' + '
864 39 NN = NN + 3
865 40 END IF
866 41 IF (ACC(J, I) .LT. -1.000) THEN
867 42 WRITE(CW, '(F3.0)') -ACC(J, I)
868 43 CM(NN+1:NN+2) = CW(2:2) //''
869 44 NN = NN + 2
870 45 END IF
871 46 CM(NN+1:NN+5) = CELN(J)
872 47 NN = NN + 5
873 48 END IF
874 49 4000 CONTINUE
875 50 C
876 51 CM(NN+1) = '=> //CP(1:NP)
877 52 WRITE(6, 6100) I, AR(I), CM
878 53 4200 CONTINUE
879 54 C
880 55 RETURN
881 56 C
882 57 6000 FORMAT(INI,<<< ',A,' >>> ',A
883 58 , /1H,*****' /1H,*****' /1H,*****'
884 59 , /1H, '** CHEMICAL REACTION EQUATIONS **'
885 60 , /1H,*****' /1H,*****' /1H,*****')
886 61 6100 FORMAT(1HO, ' K',12.2, '=',1PD11.3,3X,A)
887 62 END
888 63
889 64 ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD           DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 14
MODULE 2 EQUATN
-----
888 1      .....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
889 2      C*** EQUATN ***
890 3      C*****+
891 4      C MODIFIED BY HISAKO ISHIGURO
892 5      C IN ORDER TO CHANGE THE TREATMENTS OF INVERSE REACTION COEFFICIENT
893 6      C OF U(4) AND HAN REACTIONS
894 7          SUBROUTINE EQUATN (ICON)
895 8      C
896 9      C** CALCULATE MATERIAL CONCENTRATIONS USENG EQUATIONAL MODEL ***
897 10     INCLUDE COMMON
898 11     C
899 12     PARAMETER ( NEG = 4 )
900 13     C
901 14     CHARACTER*5 KN(17)
902 15     DIMENSION VV(NEG), IP(NEG)
903 16     DIMENSION MU(NEG), PS(NEG), GS(NEG), FS(NEG),
904 17     .          AKC(NEG), DTC(NEG), DTOK(NEG), DTOM(NEG),
905 18     .          AST(NEG,NEG), RK(NEML,NEG)
906 19     DIMENSION AC(NEML,REF)
907 20     C
908 21     C
909 22     EPSZ = 0.0
910 23     ISW = 1
911 24     IJ = 0
912 25     DO 1 I = 57,REF
913 26     IF (AKB(I).NE.0.000) THEN
914 27         IJ = IJ + 1
915 28         AKC(IJ) = AKB(I)/AKB(I)
916 29         DO 11 J = 1 , NEML
917 30             AC(I,J) = ACC(J,I)
918 31     11    CONTINUE
919 32     END IF
920 33     1 CONTINUE
921 34     R=0.00001
922 35     J=0
923 36     C      WRITE(6,102) J,8,CX(3),CX(4),CX(11),CX(12)
924 37     C 102 FORMAT(' **** J,R,PU(4),PU(3),U(4),HAN'/15,SD12.3)
925 38     C
926 39     IF(IFG.EQ.3) GO TO 9901
927 40     C
928 41     ***** REACTION BY U(4)
929 42     *****
930 43     C CALCULATE FIRST REACTION
931 44     J=1
932 45     PS(J) = 5.0D-1
933 46     C      PS(J) = 1.0
934 47     C      PS(J) = -1.0
935 48     LOOPEQ=0
936 49     C KEEP THE PREVIOUS DENSITY OF PU(3)
937 50     C CX4=CX(4)
938 51     C SET THE PU(4) RATIO FOR THE SECOND REACTION
939 52     C
940 53     3101 CONTINUE
941 54     LOOPEQ = LOOPEQ + 1
942 55     GS(J) = AKC(J)
943 56     DO 4200 I = 1 , NEML
944 57     IF (CX(I) .LT. 1.0D-20) THEN
945 58         CXWK = 1.0D-20
946 59     ELSE
947 60         CXWK = CX(I)
948 61     END IF
949 62     GS(J) = GS(J)*CXWK*(-AC(I,J))
950 63     4200 CONTINUE
951 64     C 2 CONTINUE
952 65     C
953 66     IF (ABS(GS(J)-1.000).LT.EPS1)           GO TO 9996
954 67     9998 IF(LOOPEQ.GT.20) GO TO 9996
955 68     C
956 69     C
957 70     C CALCULATE PS, FS
958 71     IF (ABS(GS(J)).GT.1.0D-60) THEN
959 72         FS(J) = -1.000*(GS(J)*(-PS(J))-1.000)
960 73     ELSE
961 74         FS(J) = 1.000
962 75     END IF
963 76     C 4 CONTINUE
964 77     C** CALC. COEFFICIENTS MATRIX A11 AND A22
965 78     AST(J,J) = 0.0D0
966 79     C 6 CONTINUE
967 80     C 5 CONTINUE
968 81     DO 4400 K = 1 , NEML
969 82     IF (CX(K) .LT. 1.0D-20) THEN
970 83         CXWK = 1.0D-20
971 84     ELSE
972 85         CXWK = CX(K)
973 86     END IF
974 87     AST(J,J) = AST(J,J)+AC1(K,J)*AC1(K,J)/CXWK
975 88     4400 CONTINUE
976 89     IF (ABS(GS(J)).GT.1.0D-60) THEN
977 90         AST(J,J) = AST(J,J)*PS(J)=GS(J)*(-PS(J))
978 91     ELSE
979 92         AST(J,J) = 0.000
980 93     END IF
981 94     C 8 CONTINUE
982 95     C 7 CONTINUE

```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD           DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 15
      MODULE : EQUATH
      ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
500   SUB ...+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
501   C** SOLVE DELTA OMEGA BY GAUSS ELIMINATION ***
502   C     CALL BLAX (AST, NER, IJ, FS, EPSZ, ISV, IS, VW, IP, JCON)
503   C     IF (ICON .NE. 0)                               GO TO 9999
504   C     CALCULATE FIRST REACTION
505   C       DTO(J)=0,
506   C       IF(CABS(AST(I,J))>10.E-30) DTO(J)=FS(J)/AST(I,J)
507   C     9 CONTINUE
508   C
509   C     == CHECK DTO ===
510   C       DTOMK(J) = -1.0060
511   C       DTOMX(J) = 1.0060
512   C       DO 4500 I = 1, NELM
513   C         IF (ABS(AC1(I,J)) .LT. 1.00-60)          GO TO 4500
514   C         WK = -1.000*CX(I)/AC1(I,J)
515   C         IF (AC1(I,J) .LT. 0.000) THEN
516   C           IF (WK .LT. DTOMX(J)) DTOMX(J) = WK
517   C         ELSE
518   C           IF (WK .GT. DTOMK(J)) DTOMK(J) = WK
519   C         END IF
520   C       4500  CONTINUE
521   C       DTOMN(J) = DTOMK(J)*0.900
522   C       DTOMX(J) = DTOMX(J)*0.900
523   C
524   C       IF (DTO(J) .LT. DTOMK(J)) THEN
525   C         DTO(J) = DTOMK(J)
526   C       ELSE IF (DTO(J) .GT. DTOMX(J)) THEN
527   C         DTO(J) = DTOMX(J)
528   C       END IF
529   C     4510 CONTINUE
530   C     IF VARTATION IS VERY SMALL THEN ITERATION END
531   C     IF(CABS(DTO(J)).LT.1.D-20) GO TO 9996
532   C
533   C     == CALC. NEW CONCENTRATIONS ===
534   C     DO 4600 I = 1, NELM
535   C       CX(I) = CX(I) + AC1(I,J)*DTO(J)
536   C     4600 CONTINUE
537   C     WRITE(6,101) LOOPEQ,J,GS(J),FS(J),AST(J,J),DTO(J),CX(3),CX(4),
538   C     *(CX(1),CX(2))
539   C     101 FORMAT(*,LOOPEQ,J,GS,FS,AST,DTO,PU(4),PU(3),UC(4),HAN*)
540   C     *214,8012.3)                                GO TO 3101
541   C
542   C     9996 LOOPEQ=0
543   C     IF PU(3), RESERVE THE RATIO (R-1) OF PU(3) MOL DEKSITY
544   C     PRODUCED BY UC(4) REACTION
545   C     AND STORE BACK THE PREVIOUS DENSITY FOR PU(3)
546   C     J=1
547   C     CY4=CX(4)*(1.-R)
548   C     CX(4)=CX(4)*R
549   C     WRITE(6,101) LOOPEQ,J,GS(J),FS(J),AST(J,J),DTO(J),CX(3),CX(4),
550   C     *(CX(1),CX(2))
551   C     **** REACTION BY HAN
552   C     ****
553   C     CALCULATE SECOND REACTION
554   C     J=2
555   C     PS(J) = -5.0D-1
556   C     PS(J) = 5.0D-1
557   C     3100 CONTINUE
558   C     LOOPEQ=LOOPEQ+1
559   C     GS(J) = AKC(J)
560   C     DO 4201 I = 1, NELM
561   C       IF (CX(I) .LT. 1.00-20) THEN
562   C         CXWK = 1.00-20
563   C       ELSE
564   C         CXWK = CX(I)
565   C       END IF
566   C       GS(J) = GS(J)*CXWK*(-AC1(I,J))
567   C     4201  CONTINUE
568   C     2 CONTINUE
569   C
570   C     IF (ABS(GS(J)-1.000).LT.EPS1)                  GO TO 9999
571   C     IF(LOOPEQ.GT.20) GO TO 9999
572   C     9997 CONTINUE
573   C
574   C     CALCULATE PS, FS
575   C     IF (ABS(GS(J)).GT.1.0D-60) THEN
576   C       FS(J) = -1.000*(GS(J)*(-PS(J))-1.000)
577   C     ELSE
578   C       FS(J) = 1.000
579   C     END IF
580   C     4 CONTINUE
581   C     == CALC. COEFFICIENTS MATRIX A11 AND A22
582   C     AST(I,J) = 0.000
583   C     6 CONTINUE
584   C     5 CONTINUE
585   C     DO 4401 K = 1, NELM
586   C       IF (CX(K) .LT. 1.00-20) THEN
587   C         CXWK = 1.00-20
588   C       ELSE
589   C         CXWK = CX(K)
590   C       END IF
591   C       AST(J,J) = AST(J,J)+AC1(K,J)*AC1(K,J)/CXWK
592   C       IF (CX(K) .LT. 1.00-10) GO TO 4401
593   C       CXWK = CX(K)
594   C
595   C     ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD           DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 16
      MODULE : EQUATK
      -----
      S20  SUB  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1078  191  C   AST(J,J) = AST(J,J)+AC1(K,J)*AC1(K,J)/CXWK
1079  192  4401  CONTINUE
1080  193  IF (ABS(GS(J)),GT.1.0D-6D) THEN
1081  194  AST(J,J) = AST(J,J)*PS(J)=GS(J)*=(-PS(J))
1082  195  ELSE
1083  196  AST(J,J) = 0.000
1084  197  END IF
1085  198  C   8   CONTINUE
1086  199  C   7   CONTINUE
1087  200  *** SOLVE DELTA OMEGA BY GAUSS ELIMINATION ***
1088  201  C   CALL DLAX (AST, NEQ, IJ, FS, EPSZ, ISW, IS, VV, IP, ICON)
1089  202  C   IF (ICON .NE. 0)                               GO TO 9999
1090  203  DTO(J)=0.
1091  204  IF (ABS(AST(J,J)).GT.1.0E-30) DTO(J)=FS(J)/AST(J,J)
1092  205  C   9   CONTINUE
1093  206  C
1094  207  *** CHECK DTO ***
1095  208  DTOMK(J) = -1.0060
1096  209  DTOMX(J) = 1.0060
1097  210  DO 4501 I = 1, NELM
1098  211  IF (ABS(AC1(I,J)) .LT. 1.0D-6D)               GO TO 4501
1099  212  VK = -1.000*CX(I)/AC1(I,J)
1100  213  IF (AC1(I,J) .LT. 0.000) THEN
1101  214  IF (VK .LT. DTOMK(J)) DTOMX(J) = VK
1102  215  ELSE
1103  216  IF (VK .GT. DTOMK(J)) DTOMX(J) = VK
1104  217  END IF
1105  218  4501  CONTINUE
1106  219  DTOMK(J) = DTOMK(J)=0.900
1107  220  DTOMX(J) = DTOMX(J)=0.900
1108  221  C
1109  222  IF (DTO(J) .LT. DTOMK(J)) THEN
1110  223  DTO(J) = DTOMK(J)
1111  224  ELSE IF (DTO(J) .GT. DTOMX(J)) THEN
1112  225  DTO(J) = DTOMX(J)
1113  226  END IF
1114  227  C   IF VARTIATION IS VERY SMALL THEN ITERATION END
1115  228  IF (ABS(DTO(J)).LT.1.0-20) GO TO 9999
1116  229  C
1117  230  *** CALC. NEW CONCENTRATIONS ***
1118  231  DO 4601 I = 1, NELM
1119  232  CX(I) = CX(I) + AC1(I,J)*DTO(J)
1120  233  4601 CONTINUE
1121  234  C   WRITE(6,101) LOOPER,J,GS(J),FS(J),AST(J,J),DTO(J),CX(3),CX(4),
1122  235  C   =CX(11),CX(12)
1123  236  CSN.....                                GO TO 3100
1124  237  C
1125  238  C
1126  239  9999 CONTINUE
1127  240  C   ADD THE MOL DENSITY OF Pu(3) PRODUCED BY U(4) REACTION
1128  241  J=21
1129  242  CX(4)=CX(4)*CY4
1130  243  C   WRITE(6,101) LOOPER,J,GS(J),FS(J),AST(J,J),DTO(J),CX(3),CX(4),
1131  244  C   =CX(11),CX(12)
1132  245  C
1133  246  IF(IFG.EQ.2) GO TO 9888
1134  247  9901 CONTINUE
1135  248  C
1136  249  ***** REACTION BY TC
1137  250  ****
1138  251  C   CALCULATE SECOND REACTION
1139  252  J=3
1140  253  IF(IFG.EQ.3) J=1
1141  254  PS(J) = -5.00-1
1142  255  3102 CONTINUE
1143  256  LOOPER=LOOPER+1
1144  257  GS(J) = AKC(J)
1145  258  DO 4202 I = 1, NELM
1146  259  IF (CX(I) .LT. 1.0D-20) THEN
1147  260  CXWK = 1.0D-20
1148  261  ELSE
1149  262  CXWK = CX(I)
1150  263  END IF
1151  264  GS(J) = GS(J)=CXWK*=-AC1(I,J)
1152  265  4202  CONTINUE
1153  266  C
1154  267  IF (ABS(GS(J)-1.000).LT.EPS1)               GO TO 9990
1155  268  IF(LOOPER.GT.20) GO TO 9990
1156  269  9991 CONTINUE
1157  270  C   CALCULATE PS, FS
1158  271  IF (ABS(GS(J)).GT.1.0D-6D) THEN
1159  272  FS(J) = -1.0D0*(GS(J)==(-PS(J))-1.0D0)
1160  273  ELSE
1161  274  FS(J) = 1.000
1162  275  END IF
1163  276  *** CALC. COEFFICIENTS MATRIX A11 AND A22
1164  277  AST(J,J) = 0.000
1165  278  DO 4402 K = 1, NELM
1166  279  IF (CX(K) .LT. 1.0D-20) THEN
1167  280  CXWK = 1.0D-20
1168  281  ELSE
1169  282  CXWK = CX(K)
1170  283  END IF
1171  284  AST(J,J) = AST(J,J)+AC1(K,J)*AC1(K,J)/CXWK
1172  285  4402  CONTINUE
      ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD          DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 17
MODULE : ERUATH
*****
      SUB      ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1173 286      IF (ABSGS(J))>1.0D-60) THEN
1174 287          AST(J,J) = AST(J,J)*PS(J)*GS(J)*(-PS(J))
1175 288      ELSE
1176 289          AST(J,J) = 0.000
1177 290      END IF
1178 291 C** SOLVE DELTA OMEGA BY GAUSS ELIMINATION ***
1179 292      DTO(J)=0.
1180 293      IF(ABS(AST(J,J))>1.0E-30) DTO(J)=FS(J)/AST(J,J)
1181 294 C
1182 295 C** CHECK DTO ***
1183 296      DTOMK(J) = -1.0060
1184 297      DTOMX(J) = 1.0060
1185 298      DO 4502 I = 1, NELM
1186 299          IF (ABS(AC1(I,J)) .LT. 1.0D-60)           GO TO 4502
1187 300          VK = -1.000*CX(I)/AC1(I,J)
1188 301          IF (AC1(I,J) .LT. 0.000) THEN
1189 302              IF (VK .LT. DTOMX(J)) DTOMX(J) = VK
1190 303          ELSE
1191 304              IF (VK .GT. DTOMX(J)) DTOMX(J) = VK
1192 305          END IF
1193 306      4502 CONTINUE
1194 307      DTOMN(J) = DTOMN(J)*0.900
1195 308      DTOMZ(J) = DTOMZ(J)*0.900
1196 309 C
1197 310      IF (DTO(J) .LT. DTOMN(J)) THEN
1198 311          DTO(J) = DTOMN(J)
1199 312      ELSE IF (DTO(J) .GT. DTOMZ(J)) THEN
1200 313          DTO(J) = DTOMZ(J)
1201 314      END IF
1202 315 C IF VARIATION IS VERY SMALL THEN ITERATION END
1203 316      IF(ABS(DTO(J))<1.0E-20) GO TO 9990
1204 317 C
1205 318 C** CALC. NEW CONCENTRATIONS ***
1206 319      DO 4602 I = 1, NELM
1207 320          CX(I) = CX(I) + AC1(I,J)*DTO(J)
1208 321      4602 CONTINUE
1209 322 C
1210 323 C
1211 324 9990 CONTINUE
1212 325 C
1213 326      CALL CLOCK ( ICPU )
1214 327      IF (ICPU > 90) THEN
1215 328          WRITE (6,*)
1216 329          WRITE (6,*)
1217 330          WRITE (6,*)
1218 331          STOP 555
1219 332      END IF
1220 333 C$W IF (LOOPEQ.GT.10) THEN
1221 334 C      WRITE (6,*)
1222 335 C$W END IF
1223 336 9888 RETURN
1224 337 ENO
      ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 18
 MODULE : FCALC

```

 1225 1      ****FCALC ***
 1226 2      C** FCALC ***
 1227 3      ****FCALC ***
 1228 4      SUBROUTINE FCALC
 1229 5      C
 1230 6      C** CALCULATE FUNCTION F(X) ***
 1231 7      #INCLUDE COMMON
 1232 8      C
 1233 9      DO 4200 I = 1, NELM
 1234 10     IF(IFG,E0.0) THEN
 1235 11     C... U-PU-NP (R) ...
 1236 12     AFC(I) = RADIO*AGC(I)
 1237 13     ELSE
 1238 14     C... U-PU-NP-TC-ZR ...
 1239 15     AFC(I) = 0.000
 1240 16     END IF
 1241 17     DO 4000 K = 1, NREF
 1242 18     AFC(I) = AFC(I) + AC(I, K)*AV(K)
 1243 19     4000 CONTINUE
 1244 20     4200 CONTINUE
 1245 21     C
 1246 22     RETURN
 1247 23     END
  . . . . . 1. . . . . 2. . . . . 3. . . . . 4. . . . . 5. . . . . 6. . . . . 7. . . . . 8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 19
 MODULE : FUNOUT

```

 1248 1      ****FUNOUT ***
 1249 2      C** FUNOUT ***
 1250 3      ****FUNOUT ***
 1251 4      SUBROUTINE FUNOUT
 1252 5      C
 1253 6      C** LIST OUTPUT OF REACTION FUNCTION F(X,T) ***
 1254 7      #INCLUDE COMMON
 1255 8      C
 1256 9      PARAMETER ( NLL = 7 )
 1257 10     PARAMETER ( NNM = (KELM - 1)/NLL + 1 )
 1258 11     C
 1259 12     WRITE(6, 6000)
 1260 13     IE = 0
 1261 14     #VOCL LOOP_SCALAR
 1262 15     DO 4000 I = 1, NNM
 1263 16     IS = IE + 1
 1264 17     IE = MIN(KELM, IE + NLL)
 1265 18     WRITE(6, 6100) (J, J = IS, IE)
 1266 19     WRITE(6, 6200) (AFC(J), J = IS, IE)
 1267 20     4000 CONTINUE
 1268 21     C
 1269 22     RETURN
 1270 23     C
 1271 24     6000 FORMAT(1HO,3X,'*** REACTION FUNCTION, F(X,T) ***')
 1272 25     6100 FORMAT(1HO,3X,7('F-',12.2,1,10I))
 1273 26     6200 FORMAT(1H ,3X,1P7D14.4)
 1274 27     END
  . . . . . 1. . . . . 2. . . . . 3. . . . . 4. . . . . 5. . . . . 6. . . . . 7. . . . . 8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD           DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 20
      MODULE : INPUT
      -----
      1  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
      2  C***** INPUT ***
      3  C***** INPUT
      4      SUBROUTINE INPUT
      5  C
      6  C** INPUT DATA / CHANGE CONSTANTS ***
      7  #INCLUDE COMMON
      8  C
      9      DIMENSION AY(NELM)
     10  NAMELIST / CONST / AK, AG, GPU
     11  NAMELIST / ECRIT / AKF, AKB, EPSI
     12  NAMELIST / VFIVE / DLTT, VNM
     13  NAMELIST / FLAG / IFG
     14  NAMELIST / TIMED / DTIME, CETIME, ETIME, IRFG, NNOTS
     15  C DATA GPU / 1.000 /
     16  DATA R238, R239, R240, R241, R242
     17  .          / .0100, .7500, .1500, .0700, .0200 /
     18  CTK.1994.6<
     19  C
     20  ICY1=0
     21  C.. CONTROL DATA ...
     22  READ (5, 5000) CTIT, NOTS, ICHK, IFINT, NEPS
     23  NOTS = MAX(1, MIN(NDTC, NOTS))
     24  WRITE(6, 6000) CPGM, CTIT, NOTS
     25  C
     26  IF (NOTS.LE.0 .OR. NOTS.GT.NDTC) THEN
     27  WRITE(6, 7000) NOTS, NDTC
     28  STOP 999
     29  END IF
     30  DO 4000 I = 1, NOTS
     31  READ (5, 5100) TEND(I), TLST(I), DTT(I), TPRM1(I), TPRM2(I)
     32  4000 CONTINUE
     33  C
     34  IFINT = MAX(1, IFINT)
     35  WRITE(6, 6200) ICHK, IFINT, NEPS
     36  C
     37  C.. INITIAL CONCENTRATION AND VOLUME ...
     38  C.. IF NOT SPECIFIED, RESTART ASSUMED ...
     39  READ (5, 5100, END=3000) VOLX, AX
     40  C
     41  C.. ADDITIONAL CONCENTRATION AND VOLUME ...
     42  READ (5, 5100) VOLY, AY
     43  C
     44  C.. CHANGE REACTION VELOCITY CONSTANT ...
     45  READ (5, CONST, END=3100)
     46  READ (5, ECRIT, END=3100)
     47  READ (5, VFIVE, END=3100)
     48  READ (5, FLAG, END=3100)
     49  READ (5, TIMED, END=3100)
     50  C
     51  TIME0 = 0.000
     52  GO TO 3100
     53  C
     54  C.. RESTART INPUT ...
     55  3000 CONTINUE
     56  VOLX = 0.000
     57  VOLY = 0.000
     58  CALL RSTIN
     59  C
     60  C.. PRINT OUT ...
     61  3100 CONTINUE
     62  IF(IRFG.EQ.1) THEN
     63  DO 1 I=1,NOTS
     64    IF(I.LT.NNOTS) THEN
     65      TEND(I) = CETIME(I)
     66    END IF
     67  1 CONTINUE
     68  END IF
     69  WRITE(6, 6100) (1, TEND(I), TLST(I), DTT(I), TPRM1(I), TPRM2(I),
     70                                I = 1, NOTS )
     71  WRITE(6, 6640) (1,DTIME(I),CETIME(I),I=1,NNOTS)
     72  WRITE(6, 6650) ETIME,CTIME,IRFG,NNOTS
     73  WRITE(6, 6620) DLTT, VNM
     74  WRITE(6, 6630) IFG
     75  WRITE(6, 6300) 'INITIAL', VOLX
     76  CALL ELMOUT ( AX )
     77  WRITE(6, 6600) (1, AKF(I), I = 1, NREF),
     78  .          (1, AKB(I), I = 1, NREF)
     79  WRITE(6, 6610) EPSI
     80  C
     81  IF (VOLY.GT. 0.000) THEN
     82  WRITE(6, 6300) 'ADDITIONAL', VOLY
     83  CALL ELMOUT ( AV )
     84  DO 4100 I = 1, NELM
     85    AX(I) = (VOLX*AX(I) + VOLY*AY(I))/(VOLX + VOLY)
     86  4100 CONTINUE
     87  VOLX = VOLX + VOLY
     88  WRITE(6, 6300) 'MODIFIED', VOLX
     89  CALL ELMOUT ( AX )
     90  END IF
     91  XPO0 = AX(1) + AX(2) + AX(3) + AX(4)
     92  XPO1 = AX(7) + AX(8) + AX(9)
     93  XUO = AX(10) + AX(11)
     94  XTC0 = AX(23) + AX(24) + AX(25) + AX(26)
     95  C
      ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 21
 MODULE : INPUT

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1370 96      RADIO = ( 567.1600*R238 + 1.929300*R239 + 7.098*R240
1371 97      . + 3.39000*R241 + 0.114600*R242 )*1.00-3
1372 98      RADIO = RADIO*1.0359-7*GPU=60.000
1373 99      WRITE(6, 6500) GPU, RADIO, (I, AG(I), I = 1, NELM)
1374 100 C
1375 101 IF (ICCHK .EQ. 0) THEN
1376 102      WRITE(6, 6400) (I, AK(I), I = 1, NREF)
1377 103 ELSE
1378 104      CALL ECCHK
1379 105 END IF
1380 106 C
1381 107      RETURN
1382 108 C
1383 109 5000 FORMAT(A72
1384 110 , /BN,4I10)
1385 111 5100 FORMAT(BN,7F10.0)
1386 112 C
1387 113 6000 FORMAT(1H1,'<< ',A,' >>',3X,A
1388 114 . /1H0,*****'INPUT DATA LIST *****'
1389 115 . /1H ,*** INPUT DATA LIST ***
1390 116 . /1H ,*****'TIME CONTROL DATA ...'
1391 117 . /1H0,2X,' CYCLE NO. ',1S)
1392 118 . /1H0,2X,' CYCLE NO. ',1S)
1393 119 6100 FORMAT(1H0,2X,10X,'TEND(MIN) LIST(MIN) DT (MIN) '
1394 120 . ' PARM-1 PARM-2'
1395 121 . /1H ,2X,' CYCLE ',12,' ',1P0113.3))
1396 122 6200 FORMAT(1H0,2X,' CHA PRINT ',1S
1397 123 . /1H ,2X,' FILE INT. ',1S
1398 124 . /1H ,2X,' EPS MAX P. ',1S)
1399 125 6300 FORMAT(1H0,2X,' A, VOLUME AND CONCENTRATION ...'
1400 126 . /1H0,2X,' VOLUME ',1P0111.3,' (DN=1)')
1401 127 6400 FORMAT(1H0,2X,' REACTION CONSTANT ...'
1402 128 . /19(1H ,5(2X,'K',12,2,1P0111.3,1,2X)))
1403 129 6500 FORMAT(1H0,'PU CONCENTRATION ',1P0111.3,' (GPU/L)'
1404 130 . ' PAK(PU) ',1P0111.3
1405 131 . /1H0,2X,' G VALUE AT 3M H+ ...'
1406 132 . /19(1H ,5(2X,'G',12,2,1P0111.3,1,2X)))
1407 133 6600 FORMAT(1H0,2X,' REACTION RATE CONSTANT OF EQUATION ...'
1408 134 . /19(1H ,5(2X,'KF',12,2,1P0111.3,1,2X))
1409 135 . /1H ,2X,'KF',12,2,1P0111.3,1,2X))
1410 136 . /19(1H ,5(2X,'KB',12,2,1P0111.3,1,2X))
1411 137 . /1H ,2X,'KB',12,2,1P0111.3,1,2X))
1412 138 6610 FORMAT(1H0,2X,' CONVERGENCE CONDITION ',1P0111.3)
1413 139 6620 FORMAT(1H0,2X,' REACTION FIVE ...'
1414 140 . /1H ,2X,'BLTT ',1P0111.3,2X,'VIN ',1P0111.3)
1415 141 6630 FORMAT(1H0,2X,' CONTROL FLAG ...'
1416 142 . /1H ,2X,'IFG ',12)
1417 143 6640 FORMAT(1H0,2X,' CONTROL TIME ...'
1418 144 . /1H ,15,2X,'OTIME ',1P0111.3,2X,'CTIME ',1P0111.3))
1419 145 6650 FORMAT(1H ,7X,'ETIME ',1P0111.3,2X,'CTIME ',1P0111.3,2X,
1420 146 . 'IRFG ',13,2X,'NNOTS ',1S)
1421 147 C
1422 148 7000 FORMAT(1H0,'** ERROR IN INPUT, NOTS ',1S,' IS INVALID, '
1423 149 . ' MAX NO. ',1S)
1424 150      END
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 22
 MODULE : JCALC

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1425 1 C*****
1426 2 ** JCALC ***
1427 3 ****
1428 4      SUBROUTINE JCALC
1429 5 C
1430 6 ** CALCULATE JACOBIAN J(N) ***
1431 7 #INCLUDE COMMON
1432 8 C
1433 9      DO 4200 J = 1, NELM
1434 10      DO 4200 I = 1, NELM
1435 11      AJCI, J) = 0.000
1436 12      DO 4000 K = 1, NREF
1437 13      AJCI, J) = AJ(I, J) + AC(I, K)*RVX(K, J)
1438 14      4000 CONTINUE
1439 15      4200 CONTINUE
1440 16 C
1441 17      RETURN
1442 18      END
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 23
 MODULE : MAIN

```

-----  

1443 1 C*****  

1444 2 C** ACTINIDE REACTION ANALYSIS IN AQUA  

1445 3 C*****  

1446 4 C  

1447 5 *INCLUDE COMMON  

1448 6 C  

1449 7 C** DATA INPUT ***  

1450 8 CALL INPUT  

1451 9 ICYC = ICY1  

1452 10 IDTS = 1  

1453 11 TIME = TIME0  

1454 12 DT = DT(NHOTS)  

1455 13 C  

1456 14 C** INITIAL OUTPUT ***  

1457 15 #VCL LOOP,SCALAR  

1458 16 DO 4000 I = NHOTS, NOTS  

1459 17 DO 4000 I = 1, NOTS  

1460 18 IF (TILT(I) .GT. 0.00D0) THEN  

1461 19 WRITE(6, '(IH1)')  

1462 20 IF (ICNK .GE. 2) THEN  

1463 21 CALL VACALC ( AX )  

1464 22 CALL FCALC  

1465 23 END IF  

1466 24 CALL OUTLST  

1467 25 GO TO 3000  

1468 26 END IF  

1469 27 4000 CONTINUE  

1470 28 C  

1471 29 3000 CONTINUE  

1472 30 CALL OUTFIL  

1473 31 C  

1474 32 C** SOLVE REACTION EQUATION ***  

1475 33 CALL SOLVE  

1476 34 C  

1477 35 CALL RSTOUT  

1478 36 IF((IRFG.EQ.1).AND.(ETIME-TIME .LE. 1.0D-10)) THEN  

1479 37 STOP 5  

1480 38 END IF  

1481 39 C  

1482 40 STOP  

1483 41 END  

-----  

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 24
 MODULE : OUTFIL

```

-----  

1484 1 C*****  

1485 2 C** OUTFIL ***  

1486 3 C*****  

1487 4 SUBROUTINE OUTFIL  

1488 5 C  

1489 6 C** FILE OUTPUT ***  

1490 7 *INCLUDE COMMON  

1491 8 C  

1492 9 IF (ICYC .LE. 0) THEN  

1493 10 WRITE(30) CTIT  

1494 11 WRITE(30) NELM, NREF  

1495 12 WRITE(30) CELM  

1496 13 END IF  

1497 14 C  

1498 15 IF (MOD(ICYC,IFINT).EQ.0 .OR. TEND(IDTS)-TIME.LE.1.0D-10) THEN  

1499 16 WRITE(30) TIME, AX, AF, AV  

1500 17 END IF  

1501 18 C  

1502 19 RETURN  

1503 20 END  

-----  

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 25
MODULE : OUTLST

```
*****  
SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8  
1504 1 C*****  
1505 2 ** OUTLST ***  
1506 3 C*****  
1507 4 SUBROUTINE OUTLST  
1508 5 C  
1509 6 ** LIST OUTPUT ***  
1510 7 #INCLUDE COMMON  
1511 8 C  
1512 9 CHARACTER=4 CTH(NDTS) / '1-ST', '2-ND', '3-RD', '4-TH', '5-TH' /  
1513 10 C  
1514 11 WRITE(6, 6000) TIME, ICYC, CTH(IDTS), DT, LOOPR  
1515 12 CALL ELMOUT ( AX )  
1516 13 IF (ICRK .GE. 2) THEN  
1517 14 CALL EXITOUT  
1518 15 CALL FUNOUT  
1519 16 CALL VELOUT.  
1520 17 END IF  
1521 18 C  
1522 19 RETURN  
1523 20 C  
1524 21 6000 FORMAT(1HD,120(''))  
1525 22 . /IN ,/* TIME',IP012.4,' (MIN)',III,' CYCLES IN ',  
1526 23 . A,' LOOP, DT ',011.3,' (MIN)'  
1527 24 . 6X,'EO-LOOP IN THIS CYCLE ',18,' '')  
1528 25 . /IN ,120(''))  
1529 26 END
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 26
MODULE : RSTIN

```
*****  
SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8  
1530 1 C*****  
1531 2 ** RSTIN ***  
1532 3 C*****  
1533 4 SUBROUTINE RSTIN  
1534 5 C  
1535 6 ** RESTART FILE INPUT ***  
1536 7 #INCLUDE COMMON  
1537 8 C  
1538 9 WRITE(6, 6000)  
1539 10 READ (50) NELMX, NREFX, TIME0  
1540 11 IF (NELMX.NE.NELM .OR. NREFX.NE.NREF) THEN  
1541 12 WRITE(6, 6100)  
1542 13 STOP 999  
1543 14 END IF  
1544 15 READ (50) AX, AK  
1545 16 READ (50) AG, GPU  
1546 17 READ (50) AF, AKB, EPSI  
1547 18 READ (50) DLTT, VXM  
1548 19 READ (50) IFG, ICY1  
1549 20 READ (50) DTIME,CETIME  
1550 21 READ (50) ETIME,CTIME,IRFG,NKDT  
1551 22 IF(IRFG.EQ.1) THEN  
1552 23 TEND(NKDT)-CTIME  
1553 24 END IF  
1554 25 RETURN  
1555 26 C  
1556 27 6000 FORMAT(1HD,2X,'... RESTART ASSUMED ...')  
1557 28 6100 FORMAT(1H ,*** ERROR IN RSTIN, NELM OR NREF UNMATCHED')  
1558 29 END
```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 27
MODULE : RSTOUT

```
*****  
SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8  
1559 1 C*****  
1560 2 ** RSTOUT ***  
1561 3 C*****  
1562 4 SUBROUTINE RSTOUT  
1563 5 C  
1564 6 ** RESTART FILE OUTPUT ***  
1565 7 #INCLUDE COMMON  
1566 8 C  
1567 9 WRITE(60) NELM, NREF, TIME  
1568 10 WRITE(60) AX, AK  
1569 11 WRITE(60) AG, GPU  
1570 12 WRITE(60) AF, AKB, EPSI  
1571 13 WRITE(60) DLTT, VXM  
1572 14 WRITE(60) IFG, ICY1  
1573 15 IF(IRFG.EQ.1) THEN  
1574 16 DO 1 I=1,NOTS  
1575 17 IF((TIME .GE. CETIME(I)).OR.  
1576 18 . (CETIME(I)-TIME .LE. 1.0D-10)) THEN  
1577 19 NKDT = I + 1  
1578 20 END IF  
1579 21 1 CONTINUE  
1580 22 CTIME = TIME + DTIME(NKDT)  
1581 23 END IF  
1582 24 WRITE(60) DTIME,CETIME  
1583 25 WRITE(60) ETIME,CTIME,IRFG,NKDT  
1584 26 RETURN  
1585 27 END
```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 28
 MODULE : RVKRJ

```

  SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1586  1 C*****
1587  2 C** RVKRJ ***  

1588  3 C*****  

1589  4      SUBROUTINE RVKRJ  

1590  5 C  

1591  6 C** CALCULATE <V(K)/V(J) ***  

1592  7 #INCLUDE COMMON  

1593  8 IF(IFG,EQ,0) THEN  

1594  9 C..... U-PU-NP (R) .....
```

C.. K = 1 ...

```

  RVRX( 1, 3) = AX(1)*AX(1)/(AX(5) + 0.05D0)**2
  RVRX( 1, 5) = -2.000*AK(1)*AX(3)*AX(1)/(AX(5) + 0.05D0)**3
  RVRX( 1, 13) = AK(1)*AX(3)/(AX(5) + 0.05D0)**2
```

C.. K = 2 ...

```

  RV2RCM = -2.000*AK(2)*AX(3)**2*AX(12)**2
  . / ( AX(4)**2*AX(5)**4*(CN + 0.35D0)**3 )
  RVRX( 2, 1) = 2.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 2) =     RV2RCM
  RVRX( 2, 3) = 2.000*AK(2)*AX(3)*AX(12)**2
  . / ( AX(4)**2*AX(5)**4*(CN + 0.35D0)**2 )
  . + 4.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 4) = -2.000*AK(2)*AX(3)**2*AX(12)**2
  . / ( AX(4)**3*AX(5)**4*(CN + 0.35D0)**2 )
  . + 3.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 5) = -4.000*AK(2)*AX(3)**2*AX(12)**2
  . / ( AX(4)**2*AX(5)**5*(CN + 0.35D0)**2 )
  . + RV2RCM
  RVRX( 2, 7) = 2.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 8) =     RV2RCM
  RVRX( 2, 9) = 4.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 10) = 2.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 11) = 4.000*RV2RCM
  RVRX( 2, 12) = 2.000*AK(2)*AX(3)**2*AX(12)
  . / ( AX(4)**2*AX(5)**4*(CN + 0.35D0)**2 )
  . + RV2RCM
  RVRX( 2, 13) =     RV2RCM
```

C.. K = 3 ...

```

  RVRX( 3, 3) = AK(3)*AX(13)/(AX(5) + 0.35D0)
  RVRX( 3, 5) = -AK(3)*AX(3)*AX(13)/(AX(5) + 0.35D0)**2
  RVRX( 3, 13) = AK(3)*AX(3)/(AX(5) + 0.35D0)
```

C.. K = 4 ...

```

  RV4RCM = 0.400*AK(4)*AX(4)*SQRT(AX(6)*AX(5))/CN=0.600
  RVRX( 4, 1) = 2.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 2) =     RV4RCM
  RVRX( 4, 3) = 4.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 4) = AK(4)*SQRT(AX(6)*AX(5))/CN04
  . + 3.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 5) = 0.500*AK(4)*AX(4)*SQRT(AX(6)/AX(5))/CN04
  . + RV4RCM
  RVRX( 4, 6) = 0.500*AK(4)*AX(4)*SQRT(AX(5)/AX(6))/CN04
  RVRX( 4, 7) = 2.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 8) =     RV4RCM
  RVRX( 4, 9) = 4.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 10) = 2.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 11) = 4.000*RV4RCM
  RVRX( 4, 12) =     RV4RCM
  RVRX( 4, 13) =     RV4RCM
```

C.. K = 5 ...

```

  RVRX( 5, 3) = AK(5)*AX(6)*AX(13)
  C.. RVRX( 5, 6) = AK(5)*AX(13)*AX(5)
  C.. RVRX( 5, 13) = AK(5)*AX(6)*AX(5)
  IF (C2*AX(13).GE.AX(6)) THEN
    RVRX( 5, 6) = (1-DEXP(-VIA+DLTT))/DLTT
  ELSE
    RVRX( 5, 13) = (1-DEXP(-VIA+DLTT))/DLTT
  END IF
```

C.. K = 6 ...

```

  RV6RCM = 12.500*AK(6)*AX(9)*AX(7)
  RVRX( 6, 1) = 2.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 2) =     RV6RCM
  RVRX( 6, 3) = 4.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 4) = 3.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 5) =     RV6RCM
  RVRX( 6, 7) = AK(6)*AX(9)*(2.16D0 + 12.5D0*CN)
  . + 2.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 8) =     RV6RCM
  RVRX( 6, 9) = AK(6)*AX(7)*(2.16D0 + 12.5D0*CN)
  . + 4.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 10) = 2.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 11) = 4.000*RV6RCM
  RVRX( 6, 12) =     RV6RCM
  RVRX( 6, 13) =     RV6RCM
```

C.. K = 7 ...

```

  RVRX( 7, 3) = AK(7)*AX(9)/AX(5)**4
  RVRX( 7, 5) = -4.000*AK(7)*AX(9)*AX(3)/AX(5)**5
  RVRX( 7, 9) = AK(7)*AX(3)/AX(5)**4
```

C.. K = 8 ...

```

  RVRX( 8, 5) = -1.300*AK(8)*AX(7)*AX(13)/AX(5)**2.300
```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 29
 MODULE : RVKRXJ

```

SEQ $00 ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1681 96 RVRI( 8, 7) = AK(8)=AX(13)/AX(5)**1.300
1682 97 RVRI( 8, 13) = AK(8)=AX(7)/AX(5)**1.300
1683 98 C
1684 99 C.. K = 9 ...
1685 100 RVRI( 9, 7) = AK(9)=AX(11)
1686 101 RVRI( 9, 11) = AK(9)=AX(7)
1687 102 C
1688 103 C.. K = 10 ...
1689 104 RVRI(10, 5) = AK(10)=AX(8)=AX(11)*(-3.200/AX(5)**3 + 1.4200)
1690 105 RVRI(10, 8) = AK(10)=AX(11)*(1.600/AX(5)**2 + 1.4200*AX(5))
1691 106 RVRI(10, 11) = AK(10)=AX(8)*(1.600/AX(5)**2 + 1.4200*AX(5))
1692 107 C
1693 108 C.. K = 11 ...
1694 109 RVRI(11, 5) = -AK(11)=AX(7)*AX(12)/AX(5)**2
1695 110 RVRI(11, 7) = AK(11)=AX(12)/AX(5)
1696 111 RVRI(11, 12) = AK(11)=AX(7)/AX(5)
1697 112 C
1698 113 C.. K = 12 ...
1699 114 RVRI(12, 2) = AK(12)=AX(3)=AX(5)/(AX(5) + 0.05400)
1700 115 RVRI(12, 3) = AK(12)=AX(2)=AX(5)/(AX(5) + 0.05400)
1701 116 RVRI(12, 5) = AK(12)=AX(2)=AX(3)/(AX(5) + 0.05400)**2
1702 117 C
1703 118 C.. K = 13 ...
1704 119 RVRI(13, 2) = AK(13)=AX(4)=AX(5)
1705 120 RVRI(13, 4) = AK(13)=AX(2)=AX(5)
1706 121 RVRI(13, 5) = AK(13)=AX(2)*AX(4)
1707 122 C
1708 123 C.. K = 14 ...
1709 124 RVRI(14, 1) = AK(14)=AX(6)/AX(5)
1710 125 RVRI(14, 5) = -AK(14)=AX(1)*AX(6)/AX(5)**2
1711 126 RVRI(14, 6) = AK(14)=AX(1)/AX(5)
1712 127 C
1713 128 C.. K = 15 ...
1714 129 RVRI(15, 1) = AK(15)=AX(4)
1715 130 RVRI(15, 4) = AK(15)=AX(1)
1716 131 C
1717 132 C.. K = 16 ...
1718 133 RV16RC = 0.400*AK(16)=AX(2)*SQR(AX(6))=(AX(5)/CN)**0.600
1719 134 RVRI(16, 1) = 2.000*RV16RC
1720 135 RVRI(16, 2) = AK(16)*SQR(AX(6))=CN**0.400*AX(5)**0.600
1721 136 +
1722 137 RVRI(16, 3) = 4.000*RV16RC
1723 138 RVRI(16, 4) = 3.000*RV16RC
1724 139 RVRI(16, 5) = 0.600*AK(16)*AX(2)*SQR(AX(6))=CN**0.400
1725 140 +
1726 141 +
1727 142 RVRI(16, 6) = 0.500*AK(16)*AX(2)=CN**0.400*AX(5)**0.600
1728 143 / SQR(AX(6))
1729 144 RVRI(16, 7) = 2.000*RV16RC
1730 145 RVRI(16, 8) = RV16RC
1731 146 RVRI(16, 9) = 4.000*RV16RC
1732 147 RVRI(16, 10) = 2.000*RV16RC
1733 148 RVRI(16, 11) = 4.000*RV16RC
1734 149 RVRI(16, 12) = RV16RC
1735 150 RVRI(16, 13) = RV16RC
1736 151 C
1737 152 C.. K = 17 ...
1738 153 RVRI(17, 5) = 2.000*AK(17)=AX(8)**2*AX(5)
1739 154 RVRI(17, 8) = 2.000*AK(17)=AX(8)=AX(5)**2
1740 155 C
1741 156 C.. K = 18 ...
1742 157 RV18RC = 2.000*AK(18)=AX(5)**1.300*CN=AX(6)=AX(8)/(AX(6)+AX(8))
1743 158 RVRI(18, 1) = 2.000*RV18RC
1744 159 RVRI(18, 2) = RV18RC
1745 160 RVRI(18, 3) = 4.000*RV18RC
1746 161 RVRI(18, 4) = 3.000*RV18RC
1747 162 RVRI(18, 5) = 1.300*AK(18)*AX(5)**0.200*CN**2*AX(8)/(AX(6)+AX(8))
1748 163 +
1749 164 RVRI(18, 6) = AK(18)*AX(5)**1.300*CN=2*AX(8)**2/(AX(6)+AX(8))**2
1750 165 RVRI(18, 7) = 2.000*RV18RC
1751 166 RVRI(18, 8) = AK(18)*AX(5)**1.300*CN=2*AX(6)**2/(AX(6)+AX(8))**2
1752 167 +
1753 168 RVRI(18, 9) = 4.000*RV18RC
1754 169 RVRI(18, 10) = 2.000*RV18RC
1755 170 RVRI(18, 11) = 4.000*RV18RC
1756 171 RVRI(18, 12) = RV18RC
1757 172 RVRI(18, 13) = RV18RC
1758 173 C
1759 174 C.. K = 19 ...
1760 175 RVRI(19, 6) = -5.00-1*AK(19)=AX(8)=AX(9)/AX(6)**1.500
1761 176 RVRI(19, 8) = AK(19)*AX(9)/AX(6)**0.500
1762 177 RVRI(19, 9) = AK(19)*AX(8)/AX(6)**0.500
1763 178 C
1764 179 C.. K = 20 ...
1765 180 RVRI(20, 4) = AK(20)=AX(7)*(2.13D3 + 1.86D2/AX(5))
1766 181 RVRI(20, 7) = AK(20)*AX(4)*(2.13D3 + 1.86D2/AX(5))
1767 182 RVRI(20, 5) = -1.86D2*AK(20)*AX(4)*AX(7)/AX(5)**2D0
1768 183 C
1769 184 C.. K = 21 ...
1770 185 RVRI(21, 4) = AK(21)=AX(8)/AX(5)**1.300
1771 186 RVRI(21, 5) = -1.300*AK(21)*AX(4)*AX(8)/AX(5)**2.300
1772 187 RVRI(21, 8) = AK(21)*AX(4)/AX(5)**1.300
1773 188 C
1774 189 C.. K = 22 ...
1775 190 RVRI(22, 1) = AK(22)=AX(13)/AX(5)

```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 30
 MODULE : RVKRJ

```

SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1776 191 RVRI(22, 5) = -1.000*AK(22)*AI(1)*AI(13)/AI(5)**2.000
1777 192 RVRI(22, 13) = AK(22)*AI(1)/AI(5)
1778 193 C
1779 194 C.. K = 23 ...
1780 195 RV23RC = -5.40-1*AK(23)*AI(3)**2.000/(AI(5)**2.200*CH**1.5400)
1781 196 RVRI(23, 1) = 2.000*RV23RC
1782 197 RVRI(23, 2) = RV23RC
1783 198 RVRI(23, 3) = 2.000*AK(23)*AI(3)/(AI(5)**2.200*CH**0.5400)
1784 199 + 4.000*RV23RC
1785 200 RVRI(23, 4) = 3.000*RV23RC
1786 201 RVRI(23, 5) = -2.200*AK(23)*AI(3)**2.000
1787 202 / (AI(5)**3.200*CH**0.5400)
1788 203 + RV23RC
1789 204 RVRI(23, 7) = 2.000*RV23RC
1790 205 RVRI(23, 8) = RV23RC
1791 206 RVRI(23, 9) = 4.000*RV23RC
1792 207 RVRI(23, 10) = 2.000*RV23RC
1793 208 RVRI(23, 11) = 4.000*RV23RC
1794 209 RVRI(23, 12) = RV23RC
1795 210 RVRI(23, 13) = RV23RC
1796 211 C
1797 212 C.. K = 24 ...
1798 213 RVRI(24, 2) = 2.000*AK(24)*AI(2)*AI(5)
1799 214 RVRI(24, 3) = AK(24)*AI(2)**2.000
1800 215 C
1801 216 C.. K = 25 ...
1802 217 RVRI(25, 5) = AK(25)*AI(6)*AI(12)
1803 218 RVRI(25, 6) = AK(25)*AI(5)*AI(12)
1804 219 RVRI(25, 12) = AK(25)*AI(5)*AI(6)
1805 220 C
1806 221 C.. K = 26 ...
1807 222 RVRI(26, 1) = AK(26)*AI(12)/AI(5)
1808 223 RVRI(26, 5) = -AK(26)*AI(1)*AI(12)/AI(5)**2
1809 224 RVRI(26, 12) = AK(26)*AI(1)/AI(5)
1810 225 C
1811 226 C.. K = 27 ...
1812 227 RVRI(27, 1) = AK(27)*AI(11)/AI(5)**1.200
1813 228 RVRI(27, 5) = -1.2*AK(27)*AI(1)*AI(11)/AI(5)**2.200
1814 229 RVRI(27, 11) = AK(27)*AI(1)/AI(5)**1.200
1815 230 C
1816 231 C.. K = 28 ...
1817 232 RVRI(28, 2) = AK(28)*AI(12)
1818 233 RVRI(28, 12) = AK(28)*AI(2)
1819 234 CTK.1994.6>
1820 235 C
1821 236 C.. K = 29 ...
1822 237 RVRI(29, 5) = AK(29)*AI(14)
1823 238 RVRI(29, 14) = AK(29)*AI(5)
1824 239 C
1825 240 C.. X = 30 ...
1826 241 RV30RC = AK(30)*AI(14)
1827 242 RVRI(30, 1) = 2*RV30RC
1828 243 RVRI(30, 2) = RV30RC
1829 244 RVRI(30, 3) = 4*RV30RC
1830 245 RVRI(30, 4) = 3*RV30RC
1831 246 RVRI(30, 5) = RV30RC
1832 247 RVRI(30, 7) = 2*RV30RC
1833 248 RVRI(30, 8) = RV30RC
1834 249 RVRI(30, 9) = 4*RV30RC
1835 250 RVRI(30, 10) = 2*RV30RC
1836 251 RVRI(30, 11) = 4*RV30RC
1837 252 RVRI(30, 12) = RV30RC
1838 253 RVRI(30, 13) = RV30RC
1839 254 RVRI(30, 14) = AK(30)*CH
1840 255 C
1841 256 C.. K = 31 ...
1842 257 RV31RC = AK(31)*AI(18)
1843 258 RVRI(31, 1) = 2*RV31RC
1844 259 RVRI(31, 2) = RV31RC
1845 260 RVRI(31, 3) = 4*RV31RC
1846 261 RVRI(31, 4) = 3*RV31RC
1847 262 RVRI(31, 5) = RV31RC
1848 263 RVRI(31, 7) = 2*RV31RC
1849 264 RVRI(31, 8) = RV31RC
1850 265 RVRI(31, 9) = 4*RV31RC
1851 266 RVRI(31, 10) = 2*RV31RC
1852 267 RVRI(31, 11) = 4*RV31RC
1853 268 RVRI(31, 12) = RV31RC
1854 269 RVRI(31, 13) = RV31RC
1855 270 RVRI(31, 16) = AK(31)*CH
1856 271 C
1857 272 C.. K = 32 ...
1858 273 RV32RC = AK(32)*AI(19)
1859 274 RVRI(32, 1) = 2*RV32RC
1860 275 RVRI(32, 2) = RV32RC
1861 276 RVRI(32, 3) = 4*RV32RC
1862 277 RVRI(32, 4) = 3*RV32RC
1863 278 RVRI(32, 5) = RV32RC
1864 279 RVRI(32, 7) = 2*RV32RC
1865 280 RVRI(32, 8) = RV32RC
1866 281 RVRI(32, 9) = 4*RV32RC
1867 282 RVRI(32, 10) = 2*RV32RC
1868 283 RVRI(32, 11) = 4*RV32RC
1869 284 RVRI(32, 12) = RV32RC
1870 285 RVRI(32, 13) = RV32RC

```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 31
 MODULE : RVKRXJ

```

-----  

  SEQ SUB .....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8  

1871 286      RVRK(32, 19) = AK(32)*CH  

1872 287      C  

1873 288      C.. K = 33 ...  

1874 289      RVRK(33, 3) = AK(33)*AX(14)  

1875 290      RVRK(33, 14) = AK(33)*AX(3)  

1876 291      C  

1877 292      C.. K = 34 ...  

1878 293      RVRK(34, 3) = AK(34)*AX(18)  

1879 294      RVRK(34, 18) = AK(34)*AX(3)  

1880 295      C  

1881 296      C.. K = 35 ...  

1882 297      RVRK(35, 1) = AK(35)*AX(14)  

1883 298      RVRK(35, 14) = AK(35)*AX(1)  

1884 299      C  

1885 300      C.. K = 36 ...  

1886 301      RVRK(36, 1) = AK(36)*AX(18)  

1887 302      RVRK(36, 18) = AK(36)*AX(1)  

1888 303      C  

1889 304      C.. K = 37 ...  

1890 305      RVRK(37, 16) = 2.000*AK(37)*AX(16)  

1891 306      C  

1892 307      C.. K = 38 ...  

1893 308      RVRK(38, 5) = AK(38)*AX(6)  

1894 309      RVRK(38, 6) = AK(38)*AX(5)  

1895 310      C  

1896 311      C.. K = 39 ...  

1897 312      RVRK(39, 6) = AK(39)*AX(17)  

1898 313      RVRK(39, 17) = AK(39)*AX(6)  

1899 314      C  

1900 315      C.. K = 40 ...  

1901 316      RVRK(40, 6) = AK(40)*AX(21)  

1902 317      RVRK(40, 21) = AK(40)*AX(6)  

1903 318      C  

1904 319      C.. K = 41 ...  

1905 320      RVRK(41, 11) = AK(41)*AX(6)  

1906 321      RVRK(41, 6) = AK(41)*AX(1)  

1907 322      C  

1908 323      C.. K = 42 ...  

1909 324      RVRK(42, 2) = AK(42)*AX(16)  

1910 325      RVRK(42, 16) = AK(42)*AX(2)  

1911 326      C  

1912 327      C.. K = 43 ...  

1913 328      RVRK(43, 3) = AK(43)*AX(6)  

1914 329      RVRK(43, 6) = AK(43)*AX(3)  

1915 330      C  

1916 331      C.. K = 44 ...  

1917 332      RVRK(44, 4) = AK(44)*AX(16)  

1918 333      RVRK(44, 16) = AK(44)*AX(4)  

1919 334      C  

1920 335      C.. K = 45 ...  

1921 336      RVRK(45, 2) = AK(45)*AX(17)  

1922 337      RVRK(45, 17) = AK(45)*AX(2)  

1923 338      C  

1924 339      C.. K = 46 ...  

1925 340      RVRK(46, 4) = AK(46)*AX(17)  

1926 341      RVRK(46, 17) = AK(46)*AX(4)  

1927 342      C  

1928 343      C.. K = 47 ...  

1929 344      RVRK(47, 3) = AK(47)*AX(17)  

1930 345      RVRK(47, 17) = AK(47)*AX(3)  

1931 346      C  

1932 347      C.. K = 48 ...  

1933 348      RVRK(48, 3) = AK(48)*AX(21)  

1934 349      RVRK(48, 21) = AK(48)*AX(3)  

1935 350      C  

1936 351      C.. K = 49 ...  

1937 352      RVRK(49, 1) = AK(49)*AX(21)  

1938 353      RVRK(49, 21) = AK(49)*AX(1)  

1939 354      C  

1940 355      C.. K = 50 ...  

1941 356      RVRK(50, 14) = 2.000*AK(50)*AX(14)  

1942 357      C  

1943 358      C.. K = 51 ...  

1944 359      RVRK(51, 6) = 4.000*AK(51)*AX(6)**=3.000  

1945 360      C  

1946 361      C.. K = 52 ...  

1947 362      RVRK(52, 3) = AK(52)*AX(19)  

1948 363      RVRK(52, 19) = AK(52)*AX(3)  

1949 364      C  

1950 365      C.. K = 53 ...  

1951 366      RVRK(53, 5) = AK(53)*AX(19)  

1952 367      RVRK(53, 19) = AK(53)*AX(5)  

1953 368      C  

1954 369      C.. K = 54 ...  

1955 370      RVRK(54, 2) = AK(54)*AX(19)  

1956 371      RVRK(54, 19) = AK(54)*AX(2)  

1957 372      C  

1958 373      C.. K = 55 ...  

1959 374      RVRK(55, 4) = AK(55)*AX(19)  

1960 375      RVRK(55, 19) = AK(55)*AX(4)  

1961 376      C  

1962 377      C.. K = 56 ...  

1963 378      RV56RC = 1.500*AK(56)*AX(7)*AX(6)**=2*[N**0.500  

1964 379      , I ((AT(8)*AX(6))=AX(5))  

1965 380      RVRK(56, 1) = 2.000*RV56RC
  
```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-NOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 32
 MODULE : RVKRXJ

```

  SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
1966 381 RVKRXJ(56, 2) = RVS6RC
1967 382 RVKRXJ(56, 3) = 4.000*RV56RC
1968 383 RVKRXJ(56, 4) = 3.000*RV56RC
1969 384 RVKRXJ(56, 5) = -AK(56)*AI(7)*AI(6)**2*CN**1.500
1970 385 . / ((AI(8)+AI(6))*AI(5)**2)
1971 386 . + RVS6RC
1972 387 RVKRXJ(56, 6) = 2.000*AK(56)*AI(7)*AI(6)=CN**1.500*AI(8)
1973 388 . / ((AI(8)+AI(6))*2.000*AI(5))
1974 389 RVKRXJ(56, 7) = AK(56)*AI(6)**2*CN**1.500
1975 390 . / ((AI(8)+AI(6))*AI(5))
1976 391 . + 2.000*RV56RC
1977 392 RVKRXJ(56, 8) = -AK(56)*AI(7)*AI(6)**3*CN**1.500
1978 393 . / ((AI(8)+AI(6))*2.000*AI(5))
1979 394 . + RVS6RC
1980 395 RVKRXJ(56, 9) = 4.000*RV56RC
1981 396 RVKRXJ(56, 10) = 2.000*RV56RC
1982 397 RVKRXJ(56, 11) = 4.000*RV56RC
1983 398 RVKRXJ(56, 12) = RVS6RC
1984 399 RVKRXJ(56, 13) = RVS6RC
1985 400 ELSE
1986 401 C..... U-PU-MP-TC-ZR .....
1987 402 C.. K = 57 ...
1988 403 RVKRXJ(57, 3) = AK(57)*AI(11)/(AI(5) + 0.0500)**2
1989 404 RVKRXJ(57, 5) = -2.000*AK(57)*AI(3)*AI(11)/(AI(5) + 0.0500)**3
1990 405 RVKRXJ(57, 11) = AK(57)*AI(3)/AI(5) + 0.0500)**2
1991 406 C
1992 407 C.. K = 58 ...
1993 408 RV58RC = -2.000*AK(58)*AI(3)**2*AI(12)**2
1994 409 . / (AI(4)**2*AI(5)**4*(CN + 0.3500)**3 )
1995 410 RVKRXJ(58, 1) = 2.000*RV58RC
1996 411 RVKRXJ(58, 2) = RVS8RC
1997 412 RVKRXJ(58, 3) = 2.000*AK(58)*AI(3)*AI(12)**2
1998 413 . / (AI(4)**2*AI(5)**4*(CN + 0.3500)**2 )
1999 414 . + 4.000*RV58RC
2000 415 RVKRXJ(58, 4) = -2.000*AK(58)*AI(3)**2*AI(12)**2
2001 416 . / (AI(4)**3*AI(5)**4*(CN + 0.3500)**2 )
2002 417 . + 3.000*RV58RC
2003 418 RVKRXJ(58, 5) = -4.000*AK(58)*AI(3)**2*AI(12)**2
2004 419 . / (AI(4)**2*AI(5)**5*(CN + 0.3500)**2 )
2005 420 . + RVS8RC
2006 421 RVKRXJ(58, 7) = 2.000*RV58RC
2007 422 RVKRXJ(58, 8) = RVS8RC
2008 423 RVKRXJ(58, 9) = 4.000*RV58RC
2009 424 RVKRXJ(58, 10) = 2.000*RV58RC
2010 425 RVKRXJ(58, 11) = 4.000*RV58RC
2011 426 RVKRXJ(58, 12) = 2.000*AK(58)*AI(3)**2*AI(12)
2012 427 . / (AI(4)**2*AI(5)**4*(CN + 0.3500)**2 )
2013 428 . + RVS8RC
2014 429 RVKRXJ(58, 13) = RVS8RC
2015 430 C
2016 431 C.. K = 59 ...
2017 432 RVKRXJ(59, 3) = AK(59)*AI(13)/(AI(5) + 0.3500)
2018 433 RVKRXJ(59, 5) = -AK(59)*AI(3)*AI(13)/(AI(5) + 0.3500)**2
2019 434 RVKRXJ(59, 13) = AK(59)*AI(3)/(AI(5) + 0.3500)
2020 435 C
2021 436 C.. K = 60 ...
2022 437 RV60RC = 0.480*AK(60)*AI(4)*SQR(AI(6)*AI(5))/CN**0.600
2023 438 RVKRXJ(60, 1) = 2.000*RV60RC
2024 439 RVKRXJ(60, 2) = RV60RC
2025 440 RVKRXJ(60, 3) = 4.000*RV60RC
2026 441 RVKRXJ(60, 4) = AK(60)*SQR(AI(6)*AI(5))/CN04
2027 442 . + 3.000*RV60RC
2028 443 RVKRXJ(60, 5) = 0.500*AK(60)*AI(4)*SQR(AI(6)/AI(5))/CN04
2029 444 . + RVS6RC
2030 445 RVKRXJ(60, 6) = 0.500*AK(60)*AI(4)*SQR(AI(5)/AI(6))/CN04
2031 446 RVKRXJ(60, 7) = 2.000*RV60RC
2032 447 RVKRXJ(60, 8) = RV60RC
2033 448 RVKRXJ(60, 9) = 4.000*RV60RC
2034 449 RVKRXJ(60, 10) = 2.000*RV60RC
2035 450 RVKRXJ(60, 11) = 4.000*RV60RC
2036 451 RVKRXJ(60, 12) = RV60RC
2037 452 RVKRXJ(60, 13) = RY60RC
2038 453 C
2039 454 C.. K = 61 ...
2040 455 IF ((2*AI(13))>=AI(6)) THEN
2041 456 RVKRXJ(61, 6) = (1-DEXP(-WIA*DLTT))/DLTT
2042 457 ELSE
2043 458 RVKRXJ(61, 13) = (1-DEXP(-WIA*DLTT))/DLTT
2044 459 END IF
2045 460 C
2046 461 C.. K = 62 ...
2047 462 RVKRXJ(62, 1) = 2.000*RV62RC
2048 463 RVKRXJ(62, 2) = RVS62RC
2049 464 RVKRXJ(62, 3) = 4.000*RV62RC
2050 465 RVKRXJ(62, 4) = 3.000*RV62RC
2051 466 RVKRXJ(62, 5) = RVS62RC
2052 467 RVKRXJ(62, 7) = AK(62)*AI(9)*(2.1600 + 12.500*CN)
2053 468 . + 2.000*RV62RC
2054 469 RVKRXJ(62, 8) = RVS62RC
2055 470 RVKRXJ(62, 9) = AK(62)*AI(7)*(2.1600 + 12.500*CN)
2056 471 . + 4.000*RV62RC
2057 472 RVKRXJ(62, 10) = 2.000*RV62RC
2058 473 RVKRXJ(62, 11) = 4.000*RV62RC
2059 474 RVKRXJ(62, 12) = RVS62RC
2060 475

```

....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD MODULE : RVKRJ

DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 33

```

504 508 .....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
505 509
506 510
507 511
508 512 C.. K = 63 ...
509 513   RVRX(62, 13) = RV62RC
510 514
511 515   C.. K = 64 ...
512 516     RVRX(63, 3) = AK(63)=AX(9)/AX(5)**4
513 517     RVRX(63, 5) = -4.000=AK(63)=AX(9)*AX(3)/AX(5)**5
514 518     RVRX(63, 9) = AK(63)=AX(3)/AX(5)**4
515 519
516 520 C.. K = 65 ...
517 521   RVRX(65, 7) = AK(65)=AX(11)
518 522     RVRX(65, 11) = AK(65)=AX(7)
519 523
520 524 C.. K = 66 ...
521 525   RVRX(66, 5) = AK(66)=AX(8)=AX(11)=(-3.200/AX(5)**3 + 1.4200)
522 526     RVRX(66, 8) = AK(66)=AX(11)=(1.600/AX(5)**2 + 1.4200*AX(5))
523 527     RVRX(66, 11) = AK(66)=AX(8)=(1.600/AX(5)**2 + 1.4200*AX(5))
524 528
525 529 C.. K = 67 ...
526 530   RVRX(67, 5) = -AK(67)=AX(7)*AX(12)/AX(5)**2
527 531     RVRX(67, 7) = AK(67)=AX(12)/AX(5)
528 532     RVRX(67, 12) = AK(67)=AX(7)/AX(5)
529 533
530 534 C.. K = 68 ...
531 535   RVRX(68, 2) = AK(68)=AX(3)=AX(5)/(AX(5) + 0.05400)
532 536     RVRX(68, 3) = AK(68)=AX(2)*AX(5)/(AX(5) + 0.05400)
533 537     RVRX(68, 5) = AK(68)=AX(2)=AX(3)/(AX(5) + 0.05400)**2
534 538
535 539 C.. K = 69 ...
536 540   RVRX(69, 2) = AK(69)=AX(4)*AX(5)
537 541     RVRX(69, 4) = AK(69)=AX(2)*AX(5)
538 542     RVRX(69, 5) = AK(69)=AX(2)*AX(4)
539 543
540 544 C.. K = 70 ...
541 545   RVRX(70, 1) = AK(70)=AX(6)/AX(5)
542 546     RVRX(70, 5) = -AK(70)*AX(1)*AX(6)/AX(5)**2
543 547     RVRX(70, 6) = AK(70)=AX(1)/AX(5)
544 548
545 549 C.. K = 71 ...
546 550   RVRX(71, 1) = AK(71)=AX(4)
547 551     RVRX(71, 4) = AK(71)=AX(1)
548 552
549 553 C.. K = 72 ...
550 554   RVRX(72) = 0.400=AK(72)=AX(2)*SQR(AX(6))=(AX(5)/CH)**0.600
551 555     RVRX(72, 1) = 2.000=RV72RC
552 556     RVRX(72, 2) = AK(72)=SQR(AX(6))=CH=0.400*AX(5)**0.600
553 557     + RV72RC
554 558     RVRX(72, 3) = 4.000=RV72RC
555 559     RVRX(72, 4) = 3.000=RV72RC
556 560     RVRX(72, 5) = 0.600=AK(72)=AX(2)*SQR(AX(6))=CH**0.400
557 561     / AX(5)**0.400
558 562     + RV72RC
559 563     RVRX(72, 6) = 0.500=AK(72)=AX(2)=CH=0.400*AX(5)**0.600
560 564
561 565     / SQR(AX(6))
562 566     RVRX(72, 7) = 2.000=RV72RC
563 567     RVRX(72, 8) = RV72RC
564 568     RVRX(72, 9) = 4.000=RV72RC
565 569     RVRX(72, 10) = 2.000=RV72RC
566 570     RVRX(72, 11) = 4.000=RV72RC
567 571     RVRX(72, 12) = RV72RC
568 572     RVRX(72, 13) = RV72RC
569 573
570 574 C.. K = 73 ...
571 575
572 576 C.. K = 74 ...
573 577   RVRX(74, 6) = AK(74)
574 578
575 579 C.. K = 75 ...
576 580   RVRX(75, 5) = 2.000=AK(75)=AX(8)**2*AX(5)
577 581     RVRX(75, 8) = 2.000=AK(75)*AX(8)*AX(5)**2
578 582
579 583 C.. K = 76 ...
580 584   RVRX(76) = 2.000=AK(76)=AX(5)**1.300=CH=AX(6)=AX(8)/(AX(6)+AX(8))
581 585     RVRX(76, 1) = 2.000=RV76RC
582 586     RVRX(76, 2) = RV76RC
583 587     RVRX(76, 3) = 4.000=RV76RC
584 588     RVRX(76, 4) = 3.000=RV76RC
585 589     RVRX(76, 5) = 1.300=AK(76)*AX(5)**0.200=CH=2*AX(8)/(AX(6)+AX(8))
586 590     > + RV76RC
587 591     RVRX(76, 6) = AK(76)=AX(5)**1.300=CH=2*AX(8)**2/(AX(6)+AX(8))**2
588 592     RVRX(76, 7) = 2.000=RV76RC
589 593     RVRX(76, 8) = AK(76)=AX(5)**1.300=CH=2*AX(6)**2/(AX(6)+AX(8))**2
590 594     > + RV76RC
591 595     RVRX(76, 9) = 4.000=RV76RC
592 596     RVRX(76, 10) = 2.000=RV76RC
593 597     RVRX(76, 11) = 4.000=RV76RC
594 598     RVRX(76, 12) = RV76RC
595 599     RVRX(76, 13) = RV76RC
596 600
597 601 C.. K = 77 ...
598 602   RVRX(77, 6) = -5.00-1=AK(77)*AX(8)*AX(9)/AX(6)**1.500
599 603     RVRX(77, 8) = AK(77)=AX(9)/AX(6)**0.500
600 604
601 605
602 606
603 607
604 608
605 609
606 610
607 611
608 612
609 613
610 614
611 615
612 616
613 617
614 618
615 619
616 620
617 621
618 622
619 623
620 624
621 625
622 626
623 627
624 628
625 629
626 630
627 631
628 632
629 633
630 634
631 635
632 636
633 637
634 638
635 639
636 640
637 641
638 642
639 643
640 644
641 645
642 646
643 647
644 648
645 649
646 650
647 651
648 652
649 653
650 654
651 655
652 656
653 657
654 658
655 659
656 660
657 661
658 662
659 663
660 664
661 665
662 666
663 667
664 668
665 669
666 670
667 671
668 672
669 673
670 674
671 675
672 676
673 677
674 678
675 679
676 680
677 681
678 682
679 683
680 684
681 685
682 686
683 687
684 688
685 689
686 690
687 691
688 692
689 693
690 694
691 695
692 696
693 697
694 698
695 699
696 700
697 701
698 702
699 703
700 704
701 705
702 706
703 707
704 708
705 709
706 710
707 711
708 712
709 713
710 714
711 715
712 716
713 717
714 718
715 719
716 720
717 721
718 722
719 723
720 724
721 725
722 726
723 727
724 728
725 729
726 730
727 731
728 732
729 733
730 734
731 735
732 736
733 737
734 738
735 739
736 740
737 741
738 742
739 743
740 744
741 745
742 746
743 747
744 748
745 749
746 750
747 751
748 752
749 753
750 754
751 755
752 756
753 757
754 758
755 759
756 760
757 761
758 762
759 763
760 764
761 765
762 766
763 767
764 768
765 769
766 770
767 771
768 772
769 773
770 774
771 775
772 776
773 777
774 778
775 779
776 780
777 781
778 782
779 783
780 784
781 785
782 786
783 787
784 788
785 789
786 790
787 791
788 792
789 793
790 794
791 795
792 796
793 797
794 798
795 799
796 800
797 801
798 802
799 803
800 804
801 805
802 806
803 807
804 808
805 809
806 810
807 811
808 812
809 813
810 814
811 815
812 816
813 817
814 818
815 819
816 820
817 821
818 822
819 823
820 824
821 825
822 826
823 827
824 828
825 829
826 830
827 831
828 832
829 833
830 834
831 835
832 836
833 837
834 838
835 839
836 840
837 841
838 842
839 843
840 844
841 845
842 846
843 847
844 848
845 849
846 850
847 851
848 852
849 853
850 854
851 855
852 856
853 857
854 858
855 859
856 860
857 861
858 862
859 863
860 864
861 865
862 866
863 867
864 868
865 869
866 870
867 871
868 872
869 873
870 874
871 875
872 876
873 877
874 878
875 879
876 880
877 881
878 882
879 883
880 884
881 885
882 886
883 887
884 888
885 889
886 890
887 891
888 892
889 893
890 894
891 895
892 896
893 897
894 898
895 899
896 900
897 901
898 902
899 903
900 904
901 905
902 906
903 907
904 908
905 909
906 910
907 911
908 912
909 913
910 914
911 915
912 916
913 917
914 918
915 919
916 920
917 921
918 922
919 923
920 924
921 925
922 926
923 927
924 928
925 929
926 930
927 931
928 932
929 933
930 934
931 935
932 936
933 937
934 938
935 939
936 940
937 941
938 942
939 943
940 944
941 945
942 946
943 947
944 948
945 949
946 950
947 951
948 952
949 953
950 954
951 955
952 956
953 957
954 958
955 959
956 960
957 961
958 962
959 963
960 964
961 965
962 966
963 967
964 968
965 969
966 970
967 971
968 972
969 973
970 974
971 975
972 976
973 977
974 978
975 979
976 980
977 981
978 982
979 983
980 984
981 985
982 986
983 987
984 988
985 989
986 990
987 991
988 992
989 993
990 994
991 995
992 996
993 997
994 998
995 999
996 1000

```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 34
 MODULE : RVKRXJ

```

  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
2156 571     RVRX(77,  9) = AK(77)*AX(8)/AX(6)==0.500
2157 572   C
2158 573   C.. K = 78 ...
2159 574     RVRX(78,  4) = AK(78)*AX(7)*(2.13B3 + 1.86D2/AX(5))
2160 575     RVRX(78,  7) = AK(78)*AX(4)*(2.13B3 + 1.86D2/AX(5))
2161 576     RVRX(78,  5) = -1.86D2*AK(78)*AX(4)*AX(7)/AX(5)==200
2162 577   C
2163 578   C.. K = 79 ...
2164 579     RVRX(79,  4) = AK(79)*AX(8)/AX(5)==1.300
2165 580     RVRX(79,  5) = -1.300*AK(79)*AX(4)*AX(8)/AX(5)==2.300
2166 581     RVRX(79,  8) = AK(79)*AX(4)/AX(5)==1.300
2167 582   C
2168 583   C.. K = 80 ...
2169 584     RVRX(80,  1) = AK(80)*AX(13)/AX(5)
2170 585     RVRX(80,  5) = -1.000*AK(80)*AX(1)*AX(13)/AX(5)==2.000
2171 586     RVRX(80, 13) = AK(80)*AX(1)/AX(5)
2172 587   C
2173 588   C.. K = 81 ...
2174 589     RVRX(81,  1) = -5.4D-1*AK(81)*AX(3)==2.000/(AX(5)==2.200*CN==1.5400)
2175 590     RVRX(81,  1) = 2.000*RV81RC
2176 591     RVRX(81,  2) =      RV81RC
2177 592     RVRX(81,  3) = 2.000*AK(81)*AX(3)/(AX(5)==2.200*CN==0.5400)
2178 593     .           + 4.000*RV81RC
2179 594     RVRX(81,  4) = 3.000*RV81RC
2180 595     RVRX(81,  5) = -2.200*AK(81)*AX(3)==2.000
2181 596     .           / (AX(5)==3.200*CN==0.5400)
2182 597     .           *      RV81RC
2183 598     RVRX(81,  7) = 2.000*RV81RC
2184 599     RVRX(81,  8) =      RV81RC
2185 600     RVRX(81,  9) = 4.000*RV81RC
2186 601     RVRX(81, 10) = 2.000*RV81RC
2187 602     RVRX(81, 11) = 4.000*RV81RC
2188 603     RVRX(81, 12) =      RV81RC
2189 604     RVRX(81, 13) =      RV81RC
2190 605   C
2191 606   C.. K = 82 ...
2192 607     RVRX(82,  2) = 2.000*AK(82)*AX(2)==AX(5)
2193 608     RVRX(82,  5) = AK(82)*AX(2)==2.000
2194 609   C
2195 610   C.. K = 83 ...
2196 611     RVRX(83,  5) = AK(83)*AX(6)*AX(12)
2197 612     RVRX(83,  6) = AK(83)*AX(5)*AX(12)
2198 613     RVRX(83, 12) = AK(83)*AX(5)*AX(6)
2199 614   C
2200 615   C.. K = 84 ...
2201 616     RVRX(84,  1) = AK(84)*AX(12)/AX(5)
2202 617     RVRX(84,  5) = -AK(84)*AX(1)*AX(12)/AX(5)==2
2203 618     RVRX(84, 12) = AK(84)*AX(1)/AX(5)
2204 619   C
2205 620   C.. K = 85 ...
2206 621     RVRX(85,  1) = AK(85)*AX(11)/AX(5)==1.200
2207 622     RVRX(85,  5) = -1.2A(K85)*AX(1)*AX(11)/AX(5)==2.200
2208 623     RVRX(85, 11) = AK(85)*AX(1)/AX(5)==1.200
2209 624   C
2210 625   C.. K = 86 ...
2211 626     RVRX(86,  2) = AK(86)*AX(12)
2212 627     RVRX(86, 12) = AK(86)*AX(2)
2213 628   C
2214 629   C.. K = 87 ...
2215 630     RVRX(87,  1) = 1.500*AK(87)*AX(7)*AX(6)==2*CN==0.500
2216 631     .           / ((AX(8)+AX(6))*AX(5))
2217 632     RVRX(87,  1) = 2.000*RV87RC
2218 633     RVRX(87,  2) =      RV87RC
2219 634     RVRX(87,  3) = 4.000*RV87RC
2220 635     RVRX(87,  4) = 3.000*RV87RC
2221 636     RVRX(87,  5) = -AK(87)*AX(7)*AX(6)==2*CN==1.500
2222 637     .           / ((AX(8)+ AX(6))*AX(5)==2)
2223 638     .           +      RV87RC
2224 639     RVRX(87,  6) = 2.000*AK(87)*AX(7)*AX(6)*CN==1.500*AX(8)
2225 640     .           / ((AX(8)+ AX(6))==2.000*AX(5))
2226 641     RVRX(87,  7) = AK(87)*AX(6)==2*CN==1.500
2227 642     .           / ((AX(8)+ AX(6))*AX(5))
2228 643     .           + 2.000*RV87RC
2229 644     RVRX(87,  8) = -AK(87)*AX(7)*AX(6)==3*CN==1.500
2230 645     .           / ((AX(8)+ AX(6))==2.000*AX(5))
2231 646     .           +      RV87RC
2232 647     RVRX(87,  9) = 4.000*RV87RC
2233 648     RVRX(87, 10) = 2.000*RV87RC
2234 649     RVRX(87, 11) = 4.000*RV87RC
2235 650     RVRX(87, 12) =      RV87RC
2236 651     RVRX(87, 13) =      RV87RC
2237 652   C
2238 653   C.. K = 88 ...
2239 654     RVRX(88, 23) = AK(88)
2240 655   C
2241 656   C.. K = 89 ...
2242 657     RVRX(89, 24) = AK(89)
2243 658   C
2244 659   C.. K = 90 ...
2245 660     RVRX(90, 25) = AK(90)
2246 661   C
2247 662   C.. K = 91 ...
2248 663     RVRX(91, 26) = AK(91)
2249 664   C
2250 665   C.. K = 92 ...
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 35
MODULE : RVXR3J

```
      .....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
2251 666      RVRI(92, 25) = AK(92)
2252 667      C
2253 668      C.. K = 93 ...
2254 669      RVRI(93, 24) = AK(93)
2255 670      C
2256 671      C.. K = 94 ...
2257 672      RVRI(94, 26) = AK(94)
2258 673      C
2259 674      C.. K = 95 ...
2260 675      RVRI(95, 4) = AK(95)*AI(23)*AX(5)**4
2261 676      RVRI(95, 5) = 4.000*AK(95)*AI(23)*AI(5)**3*AI(4)
2262 677      RVRI(95, 23) = AK(95)*AI(5)**4*AI(4)
2263 678      C
2264 679      C.. K = 96 ...
2265 680      RVRI(96, 5) = 2.000*AK(96)*AI(23)*AI(5)*AX(11)
2266 681      RVRI(96, 11) = AK(96)*AI(23)*AI(5)**2
2267 682      RVRI(96, 23) = 'AK(96)*AI(5)**2*AI(11)
2268 683      C
2269 684      C.. K = 97 ...
2270 685      C
2271 686      END IF
2272 687      C
2273 688      RETURN
2274 689      END
```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD          DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 36
      MODULE : SOLJAC
      -----
2275  1  Cxxxxxxxxxxxx
2276  2  C** SOLJAC ***
2277  3  Cxxxxxxxxxxxx
2278  4      SUBROUTINE SOLJAC
2279  5  C
2280  6  C** SOLVE BY JACOBIAN METHOD ***
2281  7  #INCLUDE COMMON
2282  8  C
2283  9      DIMENSION VV(NELM), IP(NELM), IF(NELM), XJ(NELM, NELM)
2284 10      DIMENSION AX(NELM)
2285 11  C
2286 12  C.. IOPT = 0 IS PORSING, + 1 IS M-PORSING ...
2287 13  C.. DTT = 0 FOR VARIABLE DT ...
2288 14      PRM = 0.500
2289 15  C
2290 16  C## TIME LOOP ***
2291 17  *VOCL LOOP,SCALAR
2292 18      DO 4500 IDTS = NUDTS,NOTS
2293 19  C.... EPS FOR VARIABLE DT ...
2294 20      IF (DTT(IDTS) .GT. 0.000) THEN
2295 21          EPS = 0.000
2296 22          EPS2 = 0.000
2297 23      ELSE
2298 24          IF (TPRM1(IDTS) .LE. 0.000) THEN
2299 25              EPS = 1.000
2300 26          ELSE
2301 27              EPS = TPRM1(IDTS)
2302 28          END IF
2303 29          IF (TPRM2(IDTS) .LE. 0.000) THEN
2304 30              EPS2 = 1.000
2305 31          ELSE
2306 32              EPS2 = TPRM2(IDTS)
2307 33          END IF
2308 34      END IF
2309 35  C
2310 36      CALL TIMSET ( TIME, TEND(IDTS), TLST(IDTS), DTT(IDTS),
2311 37                  TL, DT, NCYC1, NCYC2 )
2312 38  C
2313 39  C.... DT LOOP ...
2314 40      DO 4300 L = NCYC1, NCYC2
2315 41  C
2316 42      CALL VCAUC ( AX )
2317 43      CALL RVKRXJ
2318 44      CALL JCALC
2319 45      CALL FCALC
2320 46      IF (EPS .GT. 0.000) THEN
2321 47          CALL DEFDT ( EPS, EPS2 )
2322 48      END IF
2323 49      DT = MIN(TEND(IDTS) - TIME, DT)
2324 50  C
2325 51  C***** MATRIX OPERATION ( I - DT*AJ ) OR ( I - DT*AJ/2 ) ***
2326 52      1000  CONTINUE
2327 53  *VOCL LOOP,VECTOR
2328 54      DO 4100 J = 1, NELM
2329 55      DO 4000 I = 1, NELM
2330 56          IJ(I, J) = DT*AJ(I, J)*PRM
2331 57      4000  CONTINUE
2332 58          IJ(J, J) = XJ(J, J) + 1.000
2333 59          XF(J) = AF(J)
2334 60      4100  CONTINUE
2335 61  C
2336 62  C** SOLVE SIMULTANEOUS EQUATIONS USING SSL2 ***
2337 63  C.. "A"="X" = "B",
2338 64  C.. "A" = ( I - DT*AJ ) OR ( I - DT*AJ/2 ) <=> "XJ"
2339 65  C.. "X" = ( X(N + 1) - X(N) )/DT    <=> "XF"
2340 66  C.. "B" = FX(J)    <=> "XF"
2341 67      CALL DLAX ( XJ, NELM, NELM, XF, 0.000, 1, IS, VV, IP,
2342 68                  ICON )
2343 69      IF (ICON .NE. 0) THEN
2344 70          WRITE(6, *)  *** ERROR IN LAX, ICON = ', ICON
2345 71          STOP 999
2346 72      END IF
2347 73  C
2348 74  C.. NEW CONC. MINUS CHECK (IF VARIABLE DT) ...
2349 75      IF (EPS .GT. 0.000) THEN
2350 76          DO 4200 I = 1, NELM
2351 77              IF (AX(I) + DT*XF(I) .LT. 0.000) THEN
2352 78                  DT = DT/2.000
2353 79                  GO TO 1000
2354 80          END IF
2355 81      4200  CONTINUE
2356 82      END IF
2357 83  C
2358 84  C** NEW CONCENTRATION ***
2359 85  *VOCL LOOP,VECTOR
2360 86      IF(IFG.LE.1) THEN
2361 87      C.. U-PU-MP (R) ...
2362 88          DO 4250 I = 1, NELM
2363 89              AX(I) = AX(I) + DT*XF(I)
2364 90      4250  CONTINUE
2365 91      ELSE
2366 92      C.. U-PU-MP-TC-ZR ...
2367 93          DO 4251 I = 1, NELM
2368 94              AXC(I) = AX(I) + DT*XF(I)
2369 95      4251  CONTINUE

```

.....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 37
 MODULE : SOLJAC

```

  SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
2370 96      DO 4260 I = 1, KELM
2371 97      CK(I) = AX(I)
2372 98      4260  CONTINUE
2373 99      LOOP98 = 0
2374 100     CALL EQUATM(ICON)
2375 101     IF (ICON .NE. 0) THEN
2376 102     WRITE(6, 9000) TIME, ICON
2377 103     STOP 999
2378 104     END IF
2379 105     DO 9010 I = 1, KELM
2380 106     AX(I) = AX(I) +
2381 107     8       ( CK(I) - AX(I) ) +
2382 108     8       ( AX(I) - AX(I) )
2383 109     9010  CONTINUE
2384 110     END IF
2385 111 C
2386 112     ICYC = ICYC + 1.
2387 113     TIME = TIME + DT
2388 114     IF (TL - TIME .LE. 1.0D-8) THEN
2389 115     CALL OUTLST
2390 116     TL = TL + TLST(IDTS)*1.00000001D0
2391 117     TL = TL - MOD(TL, TLST(IDTS))
2392 118     END IF
2393 119     CALL OUTFIL
2394 120 C
2395 121     IF ((CETIME(IDTS) - TIME .LE. 1.0D-10)
2396 122           .AND. (IRFG.EQ.1)) GO TO 3100
2397 123     IF (TEND(IDTS) - TIME .LE. 1.0D-10) GO TO 3100
2398 124     IF (DT .GT. DTMAX) THEN
2399 125     DTMAX = DT
2400 126     IDTMX = ICYC
2401 127     END IF
2402 128     IF (DT .LT. DTMIN) THEN
2403 129     DTMIN = DT
2404 130     IDTMN = ICYC
2405 131     END IF
2406 132 C
2407 133     DT = DT*(IDTS)
2408 134     4300  CONTINUE
2409 135     3100  CONTINUE
2410 136     4500 CONTINUE
2411 137 C
2412 138     WRITE(6, 6000) CPGM, DTMAX, IDTMX, DTMIN, IDTMN
2413 139     RETURN
2414 140 C
2415 141     6000 FORMAT(1HO,'*** ',A,' *** CALCULATION ENDED BY (N->)PORSING'
2416 142     .    /1HO,' MAXIMUM DT IS',1PD12.3,' AT CYCLE NO.',17
2417 143     .    /1H,' MINIMUM DT IS', D12.3,' AT CYCLE NO.',17)
2418 144 C
2419 145     7000 FORMAT(1HO,'** ERROR IN SOLADM, ICON =',1I
2420 146     .    /1H,' TIME ',1PD13.4
2421 147     .    /1H,' EPSA ', D13.4
2422 148     .    /1H,' EPSR ', D13.4)
2423 149     9000 FORMAT(1HO,'** ERROR IN EQUAT AT TIME :,1PD13.4,
2424 150     .    /1H,' ICON =',1I)
2425 151     ENO
  ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 38
 MODULE : SOLVE

 SEQ SUB+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
 2426 1 C*****
 2427 2 C** SOLVE ***
 2428 3 C*****
 2429 4 SUBROUTINE SOLVE
 2430 5 C
 2431 6 C** SOLVE DIFFERENCE EQUATIONS ***
 2432 7 #INCLUDE COMMON
 2433 8 C
 2434 9 CALL SOLJAC
 2435 10 C
 2436 11 C.. EPS CHECK OUTPUT ...
 2437 12 #VOLC LOOP_SCALAR
 2438 13 DO 4000 I = 1, NELM
 2439 14 IF (NEPSC(I) .GT. 0) THEN
 2440 15 WRITE(6, 6000) (CELM(I1), I1=1,13), (NEPSC(I2), I2=1,13),
 2441 16 (CELM(I1), I1=14,26), (NEPSC(I2), I2=14,26)
 2442 17 CALL ELMOUT (TEPSC)
 2443 18 GO TO 9999
 2444 19 END IF
 2445 20 4000 CONTINUE
 2446 21 C
 2447 22 9999 CONTINUE
 2448 23 RETURN
 2449 24 C
 2450 25 6000 FORMAT(1HO,'*** ERROR SUMMARY OF EPS CHECK ***'
 2451 26 '1HO,' ,13(3X,A5)
 2452 27 '1H ,COUNTS --',13(1X,17)
 2453 28 '1HO,' ,13(3X,A5)
 2454 29 '1H ,COUNTS --',13(1X,17)
 2455 30 END
+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

SOURCE FILE REACT-MOD DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 39
 MODULE : TIMSET

 SEQ SUB+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
 2456 1 C*****
 2457 2 C** TIMSET ***
 2458 3 C*****
 2459 4 SUBROUTINE TIMSET (XTIM, XEND, XLST, DTX, TL, XOT, NC1, NC2)
 2460 5 C
 2461 6 #INCLUDE COMMON
 2462 7 C
 2463 8 IF (XLST .LE. 0.000) THEN
 2464 9 TL = XEND*2.000
 2465 10 ELSE
 2466 11 NL1 = XTIM/XLST + 1.000000100
 2467 12 TL = NL1*XLST
 2468 13 END IF
 2469 14 IF (DTX .GT. 0.000) THEN
 2470 15 NC1 = XTIM/DTX + 1.0000000100
 2471 16 NC2 = XEND/DTX + 1.00-8
 2472 17 XOT = NC1*DTX - XTIM
 2473 18 ELSE
 2474 19 NC1 = 1
 2475 20 NC2 = 99999999
 2476 21 XOT = 0.000
 2477 22 END IF
 2478 23 C
 2479 24 RETURN
 2480 25 END
+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

SOURCE FILE REACT-HDR          DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 40
      MODULE : VCALC
      -----
SEQ SUB ...+...1...+...2...+...3...+...4...+...5...+...6...+...7...+...8
2481 1 C*****VCALC ****
2482 2 C** VCALC ***
2483 3 C*****
2484 4   SUBROUTINE VCALC ( VX )
2485 5   C
2486 6   C** CALCULATE REACTION VELOCITY "V" ***
2487 7   INCLUDE COMMON
2488 8   C
2489 9   DIMENSION VX(NELM)
2490 10  C
2491 11  C.. CONCENTRATION MINIMUM CHECK ...
2492 12  CALL EPSCNK ( VX )
2493 13  C
2494 14  CH = VX(5) + VX(6) + VX(2) + 3*VX(4) + VX(12) + VX(13)
2495 15  . + 2*(VX(10) + VX(1) + VX(7)) + 4*(VX(11) + VX(3) + VX(9))
2496 16  CH04 = CH=0.400 .
2497 17  C
2498 18  C..... U-PU-NP (R) .....
2499 19  IF((FG.EQ.0) THEN
2500 20  AV(1) = AK(1)*VX(3)*VX(11)/(VX(5) + 0.0500)**2
2501 21  AV(2) = AK(2)*VX(1)**2*VX(12)**2
2502 22  / ( VX(4)**2*VX(5)**2*(CH + 0.3500)**2 )
2503 23  AV(3) = AK(3)*VX(3)*VX(13)/(VX(5) + 0.3500)
2504 24  AV(4) = AK(4)*VX(4)*SQR(VX(6)*VX(5))=CH04
2505 25  C.....AV(5) = AK(5)*VX(6)*VX(13)*VX(3)
2506 26  VIA = VX*DLOG(10.000)/DLTT
2507 27  IF ((2*VX(13)).GE.VX(6)) THEN
2508 28  VXK = 0.5*VX(6)
2509 29  ELSE
2510 30  VXK =VX(13)
2511 31  END IF
2512 32  AV(5) = VXK*(1-DEXP(-VIA*DLTT))/DLTT
2513 33  AV(6) = AK(6)*VX(9)*VX(7)*(2.1600 + 12.500*CH)
2514 34  AV(7) = AK(7)*VX(9)*VX(3)/VX(5)**4
2515 35  AV(8) = AK(8)*VX(7)*VX(13)/VX(5)**1.300
2516 36  AV(9) = AK(9)*VX(7)*VX(11)
2517 37  AV(10) = AK(10)*VX(8)=VX(11)*(1.600/VX(5)**2 + 1.4200*VX(5))
2518 38  AV(11) = AK(11)*VX(7)=VX(12)/VX(5)
2519 39  AV(12) = AK(12)*VX(2)*VX(3)*VX(5)/(VX(5) + 0.05400)
2520 40  AV(13) = AK(13)*VX(2)*VX(4)*VX(5)
2521 41  AV(14) = AK(14)*VX(1)*VX(6)/VX(5)
2522 42  AV(15) = AK(15)*VX(1)*VX(4)
2523 43  AV(16) = AK(16)*VX(2)*SQR(VX(6))=CH04*VX(5)**0.600
2524 44  AV(17) = AK(17)*VX(8)*2*VX(5)**2
2525 45  AV(18) = AK(18)*VX(5)=1.300*CH**2*VX(6)*VX(8)/(VX(6)*VX(8))
2526 46  AV(19) = AK(19)*VX(8)*VX(9)/VX(6)**0.500
2527 47  AV(20) = AK(20)*VX(4)*VX(7)*(2.1302 + 1.8602/VX(5))
2528 48  AV(21) = AK(21)*VX(4)*VX(8)/VX(5)**1.300
2529 49  AV(22) = AK(22)*VX(1)*VX(13)/VX(5)
2530 50  AV(23) = AK(23)*VX(3)=2.000/(VX(5)**2.200=CH=0.5400)
2531 51  AV(24) = AK(24)*VX(2)=2.000*VX(5)
2532 52  AV(25) = AK(25)*VX(5)*VX(6)*VX(12)
2533 53  AV(26) = AK(26)*VX(1)*VX(12)/VX(5)
2534 54  AV(27) = AK(27)*VX(1)*VX(11)/VX(5)**1.200
2535 55  AV(28) = AK(28)*VX(2)*VX(12)
2536 56  AV(29) = AK(29)*VX(14)*VX(5)
2537 57  AV(30) = AK(30)*CH*VX(14)
2538 58  AV(31) = AK(31)*CH*VX(18)
2539 59  AV(32) = AK(32)*CH*VX(19)
2540 60  AV(33) = AK(33)*VX(3)*VX(14)
2541 61  AV(34) = AK(34)*VX(3)*VX(18)
2542 62  AV(35) = AK(35)*VX(1)*VX(14)
2543 63  AV(36) = AK(36)*VX(1)*VX(18)
2544 64  AV(37) = AK(37)*VX(16)**2.000
2545 65  AV(38) = AK(38)*VX(6)*VX(5)
2546 66  AV(39) = AK(39)*VX(6)*VX(17)
2547 67  AV(40) = AK(40)*VX(6)*VX(21)
2548 68  AV(41) = AK(41)*VX(1)*VX(6)
2549 69  AV(42) = AK(42)*VX(2)*VX(16)
2550 70  AV(43) = AK(43)*VX(3)*VX(6)
2551 71  AV(44) = AK(44)*VX(4)*VX(16)
2552 72  AV(45) = AK(45)*VX(2)*VX(17)
2553 73  AV(46) = AK(46)*VX(4)*VX(17)
2554 74  AV(47) = AK(47)*VX(3)*VX(17)
2555 75  AV(48) = AK(48)*VX(3)*VX(21)
2556 76  AV(49) = AK(49)*VX(1)*VX(21)
2557 77  AV(50) = AK(50)*VX(22)**2.000
2558 78  AV(51) = AK(51)*VX(6)**4.000
2559 79  AV(52) = AK(52)*VX(3)*VX(19)
2560 80  AV(53) = AK(53)*VX(5)*VX(19)
2561 81  AV(54) = AK(54)*VX(2)*VX(19)
2562 82  AV(55) = AK(55)*VX(4)*VX(19)
2563 83  AV(56) = AK(56)*VX(7)*VX(6)**2.000=CH=1.500
2564 84  . / ((VX(8)*VX(6))*VX(5))
2565 85  C
2566 86  ELSE
2567 87  C..... U-PU-NP-TC-ZR .....
2568 88  AV(57) = AK(57)*VX(3)*VX(11)/(VX(5) + 0.0500)**2
2569 89  AV(58) = AK(58)*VX(3)**2*VX(12)**2
2570 90  . / ( VX(4)**2*VX(5)**2*(CH + 0.3500)**2 )
2571 91  AV(59) = AK(59)*VX(3)*VX(13)/(VX(5) + 0.3500)
2572 92  AV(60) = AK(60)*VX(4)*SQR(VX(6)*VX(5))=CH04
2573 93  C.....AV(61)
2574 94  VIA = VX*DLOG(10.000)/DLTT
2575 95  IF ((2*VX(13)).GE.VX(6)) THEN
      ...+...1...+...2...+...3...+...4...+...5...+...6...+...7...+...8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD          DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 41
MODULE : VCALC
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
      SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
2576  96      VXX = 0.5*WX(6)
2577  97      ELSE
2578  98      VXX = V1(13)
2579  99      END IF
2580 100      AV(61) = VXX*(1-DEXP(-VXA*DLTT))/DLTT
2581 101      AV(62) = AK(62)*V1(9)*V1(7)*(2.160 + 12.500*CN)
2582 102      AV(63) = AK(63)*V1(9)*V1(3)/V1(5)**4
2583 103      AV(64) = AK(64)*V1(7)*V1(3)/V1(5)**4
2584 104      AV(65) = AK(65)*V1(7)*V1(11)
2585 105      AV(66) = AK(66)*V1(8)*V1(11)*(1.6D0/V1(5)**2 + 1.4200*WX(5))
2586 106      AV(67) = AK(67)*V1(7)*V1(12)/V1(5)
2587 107      AV(68) = AK(68)*V1(2)*V1(3)*V1(5)/(WX(5) + 0.05400)
2588 108      AV(69) = AK(69)*V1(2)*V1(4)*V1(5)
2589 109      AV(70) = AK(70)*V1(1)*V1(6)/V1(5)
2590 110      AV(71) = AK(71)*V1(1)*V1(4)
2591 111      AV(72) = AK(72)*V1(2)*SQR(VX(6))*END4*V1(5)**0.600
2592 112      AV(73) = AK(73)
2593 113      AV(74) = AK(74)*V1(6)
2594 114      AV(75) = AK(75)*V1(8)**2*V1(5)**2
2595 115      AV(76) = AK(76)*V1(5)**1.300*CN**2*V1(6)*WX(8)/(V1(6)+WX(8))
2596 116      AV(77) = AK(77)*V1(8)*V1(9)/V1(6)**0.500
2597 117      AV(78) = AK(78)*V1(4)*V1(7)*(2.13D3 + 1.86D2/V1(5))
2598 118      AV(79) = AK(79)*V1(4)*V1(8)/V1(5)**1.300
2599 119      AV(80) = AK(80)*V1(1)*V1(13)/V1(5)
2600 120      AV(81) = AK(81)*V1(3)**2.000/(V1(5)**2.200*CN**0.5400)
2601 121      AV(82) = AK(82)*V1(2)**2.000*V1(5)
2602 122      AV(83) = AK(83)*V1(5)*V1(6)*V1(12)
2603 123      AV(84) = AK(84)*V1(1)*V1(2)/V1(5)
2604 124      AV(85) = AK(85)*V1(1)*V1(11)/V1(5)**1.200
2605 125      AV(86) = AK(86)*V1(2)*V1(12)
2606 126      AV(87) = AK(87)*V1(7)*V1(6)**2.000*CN**1.500
2607 127      /* (V1(6)+V1(6))*V1(5) */
2608 128      AV(88) = AK(88)*V1(23)
2609 129      AV(89) = AK(89)*V1(24)
2610 130      AV(90) = AK(90)*V1(25)
2611 131      AV(91) = AK(91)*V1(26)
2612 132      AV(92) = AK(92)*V1(25)
2613 133      AV(93) = AK(93)*V1(24)
2614 134      AV(94) = AK(94)*V1(26)
2615 135      AV(95) = AK(95)*V1(23)*V1(5)**4*V1(4)
2616 136      AV(96) = AK(96)*V1(23)*V1(5)**2*V1(11)
2617 137      AV(97) = AK(97)
2618 138      END IF
2619 139      C
2620 140      RETURN
2621 141      END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```

```

SOURCE FILE REACT-MOD          DATE 96-06-19 TIME 17:20 PAGE 42
MODULE : VELOUT
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
      SEQ SUB ....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8
2622  1      C*****
2623  2      C** VELOUT ***
2624  3      C*****
2625  4      SUBROUTINE VELOUT
2626  5      C
2627  6      /* LIST OUTPUT OF CHEMICAL REACTION VELOCITY ***/
2628  7      #INCLUDE COMMON
2629  8      C
2630  9      PARAMETER ( NLL = 10 )
2631 10      PARAMETER ( NNN = (NREF - 1)/NLL + 1 )
2632 11      C
2633 12      WRITE(6, 6000)
2634 13      IE = 0
2635 14      #VOCL LOOP,SCALAR
2636 15      DO 4000 I = 1, NNN
2637 16      IS = IE + 1
2638 17      IE = MIN(NREF, IE + NLL)
2639 18      WRITE(6, 6100) (J, J = IS, IE)
2640 19      WRITE(6, 6200) (AV(J), J = IS, IE)
2641 20      4000 CONTINUE
2642 21      C
2643 22      C
2644 23      RETURN
2645 24      C
2646 25      6000 FORMAT(1HO,3X,'*** REACTION VELOCITY, V(I,T) ***')
2647 26      6100 FORMAT(1HO,9I,10('Y',12.2,i,7))
2648 27      6200 FORMAT(1H ,7I,1P10D11.3)
2649 28      END
....+....1....+....2....+....3....+....4....+....5....+....6....+....7....+....8

```