

JAERI - M
84-017

TRUMP3-JR：有限差分法による
非線形熱伝導計算プログラム

1984年2月

幾島 毅

JAERI-M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。
入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしてください。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。

JAERI-M reports are issued irregularly.

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

©Japan Atomic Energy Research Institute, 1984

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 いばらき印刷(株)

JAERI-M 84-017

TRUMP3-JR : 有限差分法による非線形熱伝導計算プログラム

日本原子力研究所東海研究所安全解析部

幾 島 毅

(1984年1月23日受理)

有限差分法による多次元非線形計算プログラムTRUMP3の改良版TRUMP3-JRが作成された。TRUMP3-JRには、TRUMP3の入力データ作成のためのプリプロセッサおよび計算結果の図形表示のポストプロセッサが付けられている。本報告には、計算式、計算プログラムの内容およびユーザのための入力出力形式が記述されている。さらに、計算例が計算プログラムの使用を説明するために記述されている。

TRUMP3-JR : A Finite Difference Computer Program for Nonlinear
Heat Conduction Problems

Takeshi IKUSHIMA
Department of Nuclear Safety Evaluation,
Tokai Research Establishment, JAERI
(Received January 23, 1984)

Computer program TRUMP3-JR is a revised version of TRUMP3 which is a finite difference computer program used for the solution of multi-dimensional nonlinear heat conduction problems. Pre- and post-processings for input data generation and graphical representations of calculation results of TRUMP3 are available in TRUMP3-JR. The calculation equations, program descriptions and user's instruction are presented. A sample problem is described to demonstrate the use of the program.

KEYWORD: Heat Conduction, Computer Program, Nonlinear Thermal Analysis,
Finite Difference Method, User's Manual, T-code

目 次

1. 緒 言	1
2. 計算式	2
2.1 基本式	2
2.2 計算モデル	4
2.2.1 単位系	5
2.2.2 物質, 反応物質およびノード番号	5
2.2.3 幾何学的対称およびスケール	6
2.2.4 物 質	6
2.2.5 化学反応物質	7
2.2.6 ノード	7
2.2.7 内部熱生成	12
2.2.8 初期条件および系の定数	12
2.2.9 内部熱伝達	13
2.2.10 表面熱伝達	16
2.2.11 温度の関数	17
2.2.12 位置の温度に依存する属性	19
3. 計算プログラムの説明	21
3.1 計算プログラムの構成	21
3.2 TRUMP 3 の構成	21
3.3 PRE-TRUMP の構成	27
3.4 POST-TRUMP の構成	27
4. TRUMP 3 の入力・出力形式	31
4.1 TRUMP 3 の入力形式	31
4.2 TRUMP 3 の出力形式	55
4.2.1 出力データ	55
4.2.2 計算結果の評価	58
4.2.3 問題の終了条件	59
4.2.4 計算法のコントロール	60
4.2.5 精度のコントロール	61
4.3 TRUMP 3 の入出力例	65
5. PRE-TRUMP の入力・出力形式	73
5.1 PRE-TRUMP の入力形式	73
5.2 PRE-TRUMP の出力形式	74
5.3 PRE-TRUMP の入出力例	74

6. POST-TRUMP の入力・出力形式	86
6.1 POST-TRUMP の入力形式	86
6.2 POST-TRUMP の出力形式	87
6.3 POST-TRUMP の入出力例	87
7. ジョブ制御文	97
参考文献	99
付 録	100
付録A. 計算の一般的シーケンス	100
A. 1 入力データと初期値	100
A. 2 各時間ステップの計算	100
付録B. 物性値, 熱収支データ, 物質収支データの計算	101
B. 1 関数値の計算	101
B. 2 ノード熱収支および物質収支	101
B.2.1 熱物性値	101
B.2.2 熱収支データ	102
B.2.3 物質の熱収支	102
B.2.4 系の熱収支	103
付録C. 相変化	104
付録D. 化学反応	105
付録E. 内部熱発生	105
付録F. 内部熱伝達および反応の伝達	106
F. 1 内部熱接触	106
F. 2 質量流れの接続	107
F.2.1 熱伝達	107
F.2.2 反応の伝播	109
付録G. 外部熱伝達	110
付録H. 陰差分方程式	111
H. 1 温度変化の方程式	111
H. 2 反復の手順	112
H. 3 収束条件	114
H. 4 ノードの最終の補正	114
付録I. 次の時間ステップの準備	115
I. 1 ノードの再分類	115
I. 2 時間ステップのコントロール	115
I. 3 時間微分の推定	117
I. 4 補正係数の推定	118

Contents

1. Introduction	1
2. Calculation equation	2
2.1 Fundamental equations	2
2.2 Calculation model	4
2.2.1 Unit systems	5
2.2.2 Numbering systems for materials, reactants and nodes ...	5
2.2.3 Geometrical symmetry and scale	6
2.2.4 Materials	6
2.2.5 Chemical reactants	7
2.2.6 Nodes	7
2.2.7 Internal heat generation	12
2.2.8 Initial conditions and system constants	12
2.2.9 Internal heat transport	13
2.2.10 Surface heat transport	16
2.2.11 Special functions of system temperatures	17
2.2.12 Properties dependent on remote temperatures	19
3. Description of computer programs	21
3.1 Program structure of TRUMP3-JR	21
3.2 Program structure of TRUMP3	21
3.3 Program structure of PRE-TRUMP3	27
3.4 Program structure of POST-TRUMP3	27
4. Input and output format of TRUMP3	31
4.1 Input format of TRUMP3	31
4.2 Output format of TRUMP3	55
4.2.1 Output data	55
4.2.2 Evaluation of calculation results	58
4.2.3 Criteria for ending the problem	59
4.2.4 Control method of calculation	60
4.2.5 Control of accuracy	61
4.3 Example of TRUMP3	65
5. Input and output format of PRE-TRUMP3	73
5.1 Input format of PRE-TRUMP3	73
5.2 Output format of PRE-TRUMP3	74
5.3 Example of PRE-TRUMP3	74
6. Input and output format of POST-TRUMP3	86
6.1 Input format of POST-TRUMP3	86
6.2 Output format of POST-TRUMP3	87
6.3 Example of POST-TRUMP3	87
7. Job control	97
References	99
Appendices	100
Appendix A. General sequence of calculations	100
A.1 Data input and initialization	100
A.2 Calculations made at each time step	100

Appendix B. Calculation of properties, heat and mass balance data	101
B.1 Evaluation of tabulated properties	101
B.2 Node heat and mass balance	101
B.2.1 Thermal properties	101
B.2.2 Heat balance data	102
B.2.3 Material heat balance	102
B.2.4 System heat balance	103
Appendix C. Phase change	104
Appendix D. Chemical reaction	105
Appendix E. Internal heat generation	105
Appendix F. Internal heat and reactant transport	106
F.1 Internal thermal connections	106
F.2 Mass flow connections	107
F.2.1 Heat transport	107
F.2.2 Reactant transport	109
Appendix G. Surface heat transfer	110
Appendix H. Iterative solution of implicit equations	111
H.1 Overall temperature change equations	111
H.2 Iterative procedure	112
H.3 Convergence criterion	114
H.4 Final corrections for regular nodes	114
Appendix I. Preparation for next time step	115
I.1 Reclassification of nodes	115
I.2 Control of time step	115
I.3 Estimation of time derivatives	117
I.4 Estimation of interpolation factor	118

1. 緒 言

我が国の軽水型原子炉による総発電量は全発電量の約20%の規模にもなり、これに伴い使用済燃料の輸送の機会が増加している。使用済燃料輸送の安全性確認の一環として、輸送中に想定される事故、すなわち、衝突やその後の火災などに対して、輸送容器が規定の条件を満足していることを試験および解析によって明らかにする必要がある。

火災などによって輸送容器が規定の条件を満足していることを確認するための試験が国内外において精力的に実施されているが、より一般的には計算手法の確立と計算プログラムの整備開発がなされ、計算によって熱計算が容易に実施できることが望まれる。この目的のために、オークリッジ国立研究所において、標準計算プログラムとしてTRUMP-Rev. 3⁽¹⁾とHEATING-5⁽²⁾が整備された。

日本原子力研究所においても、軽水型原子炉施設の安全性研究の一環として、使用済輸送容器の熱解析プログラムの整備を昭和56年度から実施することになり、TRUMP-Rev. 3を整備した。

TRUMPは、温度場における熱の流れを記述する一般の非線形放物型の微分方程式を解くプログラムである。また、物質が一般のArrhenius温度依存の反応の式で表現される場合、反応熱を求めることもできる。

一次元、二次元、あるいは三次元について定常、非定常のいずれの計算もすることができ、直交、円筒、あるいは極の座標系の任意の形状や構造に対して解くことができる。初期条件を空間の位置によって変化させることもできる。物性、上流側と下流側の流量、境界条件、およびその他の問題のパラメータを、空間の位置、時間、あるいは温度によって変化させることもできる。また、境界条件を設定するために系に結びつける外部の熱源（吸収源あるいは放出源）を時間によって変化させることもできる。ある位置におけるパラメータとして、他の位置の温度から求められたパラメータを用いることも可能である。

インプットデータは、できるだけ簡潔になるように効率的に編成されている。アウトプットには、通常のプリントの他に、プロッターによるグラフの作図やパンチアウトが含まれ、その内容や回数をコントロールできるようにもなっている。

TRUMP 3-JRはTRUMP-Rev. 3の改良版であり、次の点が追加され、使用が容易になっている。

- (1) 入力データ作成のプリプロセッサの追加。
- (2) 計算結果の図形表示および応力解析のためのポストプロセッサの追加。

本報告は、TRUMP 3-JRの解析手法、計算プログラムの内容、入力形式と出力形式について述べたものである。

2. 計 算 式

2.1 基本式

TRUMPは、空間の座標と時間の4個の独立変数、および温度と2個の反応物の濃度という一次従属変数を持つ連立偏微分移動方程式を解く。他に従属変数として、相変化のある場合の相の濃度、およびいくつかの時間、温度、空間座標の関数となる方程式中のいくつかの係数がある。

内部発生熱や反応熱を含んだ、熱伝導および流れに対する三次元の一般の方程式は、通常のベクトル演算子表示を用いると、次のように表わされる。

$$\rho c \frac{DT}{Dt} = \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla T \right) = \nabla \cdot k \nabla T + G - \rho Q_a \frac{\partial a}{\partial t} - \rho Q_b \frac{\partial b}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\frac{Da}{Dt} = \frac{\partial a}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla a = -a^{p_a} \exp \left(Z_a - \frac{E_a}{RT} \right) \quad (2.2)$$

$$\frac{Db}{Dt} = \frac{\partial b}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla b = -b^{p_b} \exp \left(Z_b - \frac{E_b}{RT} \right) \quad (2.3)$$

ここで

T ; 絶対温度	t ; 時間
ρ ; 密度	c ; 比熱
k ; 熱伝導率	\underline{v} ; 流速ベクトル
G ; 単位体積当りの熱生成の割合	a, b ; 反応物の濃度
p_a, p_b ; 反応次数	Q_a, Q_b ; 反応熱
Z_a, Z_b ; 対数衝突頻度	E_a, E_b ; 活性化エネルギー
R ; 気体定数	

同様の方程式が、いろいろな形式の初期値問題や境界値問題、および移動問題を記述するのに用いられている。

座標軸 r に垂直な相の界面を持った相変化の熱の効果は、次式のように表現することができる。

$$\rho \Delta H_m \left(\frac{\partial r_m}{\partial t} \right) = k_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial r} \right)_{r_m} - k_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial r} \right)_{r_m} \quad (2.4)$$

$$T_1(r_m) = T_2(r_m) = T_m \quad (2.5)$$

ここで

ΔH_m ; 相1から相2に相変化する時の潜熱

r_m ; 相1と相2の間に界面の(座標軸 r 上の)位置

T_m ; 相変化する時の温度

物質1と2の間の座標軸 r に垂直な界面における熱収支は次のように表わすことができる。

$$k_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial r} \right)_i = h_i (T_{2,i} - T_{1,i}) = k_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial r} \right)_i \quad (2.6)$$

$$h_i = h_{i,\theta} + h_{i,c} \left\{ (T_{2,i} - T_{1,i})^2 \right\}^{1/2} + \sigma \mathcal{F}_i (T_{1,i} + T_{2,i}) (T_{1,i}^2 + T_{2,i}^2) \quad (2.7)$$

界面のコンダクタンス h_i の表現は、接触コンダクタンス、自然及び強制対流、およびふく射の効果を含んだ一般形である。(2.7)式において σ は Stefan-Boltzmann 定数、 \mathcal{F} は総括ふく射伝熱形態係数である。

座標軸 r に垂直な外表面における熱収支は次式のように表わされる。

$$k \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_s = U_{s,b} (T_b - T_s) \quad (2.8)$$

ここで T_b は外部温度、 T_s は表面の温度であり、界面のコンダクタンス $U_{s,b}$ は(2.7)式と同様に次式によって計算される。

$$U_{s,b} = h_{s,o} + h_{s,c} \left\{ (T_b - T_s)^2 \right\}^{1/2} + \sigma \mathcal{F}_b (T_s + T_b) (T_s^2 + T_b^2) \quad (2.9)$$

以上の方程式を一般の多次元 Euler 空間に拡張して、微小の要素 (Element)、すなわちノード (Node) に分割すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_n}{\partial t} = & \frac{1}{\rho_n c_n V_n} \left\{ \sum_k U_{n,k} (T_k - T_n) + \sum_k F_{n,k} (w_{n,k} - w_n) + \sum_b U_{n,b} (T_b - T_n) \right\} \\ & + \frac{G_n}{\rho_n c_n} - \left(\frac{Q_{a,n}}{c_n} \right) \frac{\partial a_n}{\partial t} - \left(\frac{Q_{b,n}}{c_n} \right) \frac{\partial b_n}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = -a_n^{p_a} \exp \left[Z_{a,n} - \frac{E_{a,n}}{RT_n} \right] - \frac{1}{\rho_n V_n} \sum_k F_{n,k} (a_{n,k} - a_n) \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial b_n}{\partial t} = -b_n^{p_b} \exp \left[Z_{b,n} - \frac{E_{b,n}}{RT_n} \right] - \frac{1}{\rho_n V_n} \sum_k F_{n,k} (b_{n,k} - b_n) \quad (2.12)$$

ここで

$$U_{n,k} = \frac{A_{n,k}}{\frac{\Delta r_n}{k_n} + \frac{1}{h_{n,k}} + \frac{\Delta r_k}{k_k}} \quad (2.13)$$

また

\sum_k ; ノード n が関係している内部熱接触と流れの接触のすべてについての総和

\sum_b ; ノード n が関係している外表面との接触のすべてについての総和

V_n ; ノード n の体積

$U_{n,k}$; 伝熱面積 $A_{n,k}$, 熱流路の距離 $\Delta r_n, \Delta r_k$, 及び界面のコンダクタンス $h_{n,k}$ をもって
ノード n と k が接触している時の接触の熱コンダクタンス

$F_{n,k}$; ノード n と k の間を流れる流量の割合

$w_{n,k}$; 流れている物質の界面におけるエンタルピー

物質収支は、ノード n の密度 ρ_n が変化しないという仮定のもとに成立っている。

ノードが相変化している時は $T_n = T_{m,n}$ (相変化の温度) である。その場合は (2.10) 式の左辺は次のように置換えられる。

$$- \left(\frac{\Delta H_{m,n}}{c_n} \right) \left(\frac{\partial a_n}{\partial t} \right)$$

ここで a_n は低温相の濃度そのものとなる。相変化の起きているノード内では濃度 b を含む化学反応だけが起これる。

TRUMP で解かれる実際の方程式は、上述の方程式において時間微分項 $\partial u / \partial t$ を $(u' - u) / \Delta t$ で置換えることにより得られる微小時間ステップに対する方程式である (ここで u 及び u' は時間ステップ Δt の始まりと終りにおける値である)。また、方程式中の他の変化量はすべて時間ステップについての初期値、あるいは平均値を用いている。

次のインプットで与えるパラメータは空間の位置によって変化させることができる。

$$\rho, c, k, v, G, Q_a, Q_b, Z_a, Z_b, E_a, E_b, T_m, \Delta H_{m,n}, h_{i,o}, h_{i,c}, p_i, \mathcal{F}_i, h_{s,o}, h_{s,c}, p_s, \mathcal{F}_{s,b}, T_b$$

また、空間の各位置において、次のようなパラメータを、時間、その位置における温度、あるいは他の指定された位置における温度によって変化させることができる。

$$c, k, v, G, Q_a, Q_b, Z_a, Z_b, E_a, E_b, h_{s,o}, h_{s,c}$$

また T_b を空間の各位置において時間によって変化させることもできる。温度および時間に依存する各パラメータは一般に表で与えるが、空間の各位置において、 G を時間によって指数的に変化するように与えたり、 T_b を時間によって周期曲線で変化するように与えたりすることができる。

2.2 計算モデル

仕様が決定した後で、適当な計算モデルを作成しなければならない。複雑な形状を含む問題においては、注目する領域に熱的に弱く接触している面積を除いたり、対称性を利用したりすることにより、計算を可能な限り小さな領域に抑えるのが望ましい。対称平面は断熱面として表現され得る。さらにまた、複雑な形状を等価な体積と熱流に対する抵抗を持つ単純な形状に置換えることにより、考えられるだけ単純にすることもできる。また同じ系に対して、いくつかのモデルを試行してその効果をみることも考えられる。

このように選択された系は、それぞれがある物性を持ち、また化学反応物質が指定されている

こともある。いろいろな物質から成る領域に分割されなければならない。ある領域の中で、密度、熱伝導率、あるいは熱容量が、空間位置によって連続的に変化する場合は、これらの物性の変化が必要な精度内になるようにさらに細かく分割することも考えられる。物性値が不確定である場合は、それが計算結果に及ぼす影響をみるためにその値の範囲について計算を行うべきである。

それぞれの領域は、異なった初期温度や化学反応物質の初期重量分率、一定値あるいは表の形の熱生成割合、および他のノードと関係する伝熱形態を持つノード、すなわち体積要素に分割される。断熱でない面についてのノードが異なる境界条件を持つこともある。ノードは、何らかの内外部の伝熱の接続を持ったある大きさや形状をしている。各々のノードは、その中の任意の位置か、ノードの表面上にあるノードの代表となる節点を含んでいなければならない。非定常問題においては、ノードの形状と節点を、接触面が隣接するノード間の節点を結ぶ線を垂直二等分するように選ぶと最もよい精度が得られる。定常問題においては、解が各ノードに関係している熱容量とは無関係であるので、節点の位置は精度を失わない範囲内で任意であってよい。

それぞれの物質の領域をノードに分割する時の必要な大きさは、物性、初期及び境界条件、熱生成割合、流量割合、及び計算された温度分布が、空間の位置によってどの程度変化するのか、またどの位の精度で計算値が合うかによっている。一般には、極端に細かく分割して計算するよりも、粗い分割から始めて、計算結果に大きな差がなくなるまで、逐次細かく分割していく方が、労力や計算時間を少なくすることができるであろう。

小さなノードを低いコンダクタンスで系に接触させることにより、界面や表面の温度を得たり、解に影響を与えることなしに、温度の和や差、加重平均、内挿あるいは外挿した値、あるいは時間による微分や積分を人為的に意味づけることもできる。

2.2.1 単位系

一般には、インプットデータで統一してあれば単位は任意でよいが、時間の単位は、計算に必要な時間ステップがすべて、(常に 10^{-12} にセットされている最初の時間ステップを除いて) $10^{-12} \sim 10^{12}$ の範囲内に入る様に選ばなければならない。ふく射伝熱や化学反応を伴う問題に対しては温度の単位を、BLOCK 1 の K_T (KT) に値を割当てることにより、固定しなければならない。 K_T は $^{\circ}\text{C}$, $^{\circ}\text{K}$, $^{\circ}\text{F}$, $^{\circ}\text{R}$ に対してそれぞれ 1, 2, 3, 4 である。

ふく射伝熱の Stefan - Boltzmann 定数 σ (SIGMA) は、 K_T が 1, あるいは 2 の時は 1.355×10^{-12} cal/sec \cdot cm 2 \cdot $^{\circ}\text{K}^4$, K_T が 3, あるいは 4 の時は 1.73×10^{-9} Btu/Hr \cdot ft 2 \cdot $^{\circ}\text{R}^4$ であり、 K_T が 5 であると 1.0 となる。もし他の単位系を用いる場合は、インプットデータの BLOCK 5 及び 6 で指定するふく射の形態係数 $\mathcal{F}_{i,j}$ (RINT) あるいは $\mathcal{F}_{s,b}$ (RSURE) に σ に対する適当な換算係数を含ませなければならない。

気体定数 R は 1.987 cal/g \cdot mole \cdot $^{\circ}\text{K}$ か、1.987 Btu/lb \cdot mole \cdot $^{\circ}\text{R}$ である。もし他の単位系を用いる場合は、インプットデータの BLOCK 3 で指定する化学反応物の活性化エネルギー E_r (ET) に、適当な換算係数を含ませなければならない。

アウトプットされる値は、インプットデータと同じ単位系で表示される。

2.2.2 物質、反応物質およびノード番号

物質、化学反応物質、ノードおよび境界ノードには、インプットデータの異なるブロック内で相互に参照するために、0でない整数の番号を付けなければならない。それぞれのグループに関する番号付けは他のグループとは無関係でよい。グループ内での番号はそれぞれユニークな番号でなければならない。番号の範囲はインプットデータの5カラム内に入る番号、すなわち、0を除いた-9999から99999の間である。番号は連続番号である必要はなく、また、番号の付け方による計算実行時間の影響はない。

複雑な幾何形状においては、系内の別々の軸内の座標や区域を別々のグループで番号付けをして表現すれば都合のよいこともある。

ノード、あるいは接触のグループが同一の記述をしているか、あるいは K_d が2, 3である時に一定の増分で半径 d_r (DRAD)が増加しているのであればインプットデータカード枚数を少なくすることができる。もし用いられるノードに算術的な連番で番号付けをしていけば、 d_r が増加するような時は1枚か、2枚だけで指定することもできる。 d_r が一定である時は、初めの項に番号を付け、次に追加する数、及びその増分を指定する。 d_r が増加する時は、初めの項にふつうに番号をつけ、次のカードには、次の項の番号を記述し、 d_r (DRAD)に負符号を付けて、追加の数とノード番号の増分を指定する。この手順は、BLOCK 4, 5, 6, 8, 9, 10および12のインプットデータ作成時に適用できる。

さらにまた、物質と化学反応物質に、最大5文字までの名前をつけることができる。この名前はインプットデータやプリントアウトデータの中のその物質や化学反応物質を簡単に見つけ出すようにするためにだけ、プログラム内で用いられる。

2.2.3 幾何学的対称およびスケール

BLOCK 1の対称のオプション K_d (KD)を指定して、BLOCK 4, 5, 6のインプットデータからノードの体積や伝熱面積を計算する方法をコントロールする。 K_d は、非対称系、軸対称系、点対称系に対してそれぞれ1, 2, 3とする。これらのタイプの簡単な例が、それぞれ直交、円筒、極の座標系で表わされた面で囲まれたノードから成る系の場合である。

スケールファクター S_d (SCALE)をBLOCK 1で指定することができる。BLOCK 4, 5, 6及び10のインプットデータで指定する長さに、面積であれば S_d^2 倍、体積であれば S_d^3 倍というように、 S_d が乗じられる。

インプットデータをいくつかに分けて、 K_d あるいは S_d を別々に与えることにより、系の別々の部分を分割して表現することもできる。分割したインプットデータのセクションは、それぞれ K_d と S_d を指定しているBLOCK 1の後に続くタイプAのインプットデータブロックとなる。

2.2.4 物質

各物質には物質番号 N_m (MAT)と名称 (AMAT)を指定しなければならない。また密度 ρ_m (DENS, 単位はたとえば g/cm^3)、比熱 c_m (CAT, 単位はたとえば $\text{cal}/\text{g}\cdot^\circ\text{C}$)、熱伝導率 k_m (CONT, 単位はたとえば $\text{cal}/\text{sec}\cdot\text{cm}\cdot^\circ\text{C}$)を指定しなければならない。 c_m と k_m は時間あるいは温度 (TVARC, TVARK)の表の形で与えることもできる。

表の形式で与える値 (CAPT, CONT, QT, ZT, ET, GT, FLOWT, TEMPB, HSURT)

は、全て時間あるいは温度の昇順になっていなければならない。ただし、時間あるいは温度の連続した値は同一であってもよい。

潜熱効果の記述には二つの方法がある。温度 T_m (TMELT) と潜熱 ΔH_m (HMELT, 単位たとえば cal/g) で指定する場合と、比熱対温度の表の中の狭い区間の面積を潜熱として指定する場合とで、いずれの方法も、物質が2点以上の温度における潜熱効果を持つ場合に用いられる。

物質が1成分あるいは2成分の化学反応物から成る場合は、その化学反応物の物質番号も指定しなければならない。化学反応物についてはBLOCK 3で指定する、HMELTを指定している場合は、化学反応物質は1成分のみの指定とする。

2.2.5 化学反応物質

化学反応物質とは、溶解により熱を放出あるいは吸収する物質の成分のことである。速度定数は修正 Arrhenius 温度依存を持つ次式で表わす。



$$K_a = \exp(Z_a - E_a/RT) \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -K_a \cdot a^{p_a} \quad (2.16)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_{\text{reaction}} = -\frac{Q_a}{c_v} \left(\frac{\partial a}{\partial t}\right) \quad (2.17)$$

ここで

R ; 気体定数 (= 1.987 cal/g · mole · °K)

p_a (CORD) ; 反応次数

T ; 絶対温度

化学反応物質には、反応物質番号 N_r (KEM) と名称 (AKEM) を与えなければならない。また、反応熱 Q_r (QT, 単位はたとえば cal/g), 対数衝突頻度 Z_r (ZT, 単位はたとえば log(sec⁻¹)), および活性化エネルギー E_r (ET, 単位はたとえば cal/g · mole · °K) を与える必要がある。 Q_r , Z_r , E_r はそれぞれ時間あるいは温度の表 (QT対TVARQ, ZT対TVARZ, ET対TVA RE) の形で与えることもできる。反応次数 p_a (CORD) が1.0でない場合は、その値を与えなければならない。化学反応物質を含んでいる物質のノードには、BLOCK 1と9のいずれか、あるいはその両方で、反応物質の初期重量分率が与えられなければならない。

化学反応の唯一の効果が熱の放出、あるいは吸収であって、温度変化の結果としての間接的な変化を除いて、他の属性が変化するようなことは起こらないということに注意しなければならない。

2.2.6 ノード

(1) ノード

ノードには、いろいろなインプットデータブロック内でそのノードを参照するのに用いるノード番号を割当てなければならない。また、そのノードが含まれている物質の物質番号 (NODMAT) も指定しなければならない。K_s (KS) に 0 以外の値を与えることによりそのノードを“特別な”ノードとして扱うこともできる。

有限の体積を持つノードに対して BLOCK 4 の中で 3 個の寸法ファクター d_ℓ (DLONG), d_w (DWIDE), 及び d_r (DRAD) を与えなければならない。ノード体積は次のように計算される。

$$V_n = \alpha \cdot d_\ell \cdot d_w \cdot d_r^\beta \cdot S_d^3 \quad (2.18)$$

ここで、 α , β は K_d (KD) の値により、それぞれ次の値を持つ

K _d	α	β
1	1	1
2	2π	1
3	4π	1

S_d はスケールファクターである。

d_ℓ , d_w , d_r はいずれも、ノードの体積が (1-18) 式によって正しく求められるのであればどのように与えてもよいが、 d_r (DRAD) は、KD が 2, あるいは 3 の時にグラフを作成する場合、ノードの位置を表わすのに用いられるので注意を要する。作図の時に KD が 1 の場合は、ノード番号 N_m (NODE) によってノード位置が決められる。

体積を求める方法として次に示すようないくつかの方法がある。

(2) 直交座標系

軸 x , y , z を持つ直交座標系で表わされた面で囲まれているノードの体積は次のように求められる (第 2.1 図参照)

$$V_n = (x_2 - x_1)(y_2 - y_1)(z_2 - z_1) \quad (2.19)$$

(2.19) 式は 3 個の直交軸についての座標を、それぞれの面についての平均値で与えるのであれば、不規則な面、あるいは曲面を持つノードに対しても用いることができる。KD が 1 で熱流が二次元か、一次元である場合は、BLOCK 4 の d_ℓ , d_w , d_r のいずれか 2 個、あるいは 1 個に 1.0 のような任意の値を与えればよい。

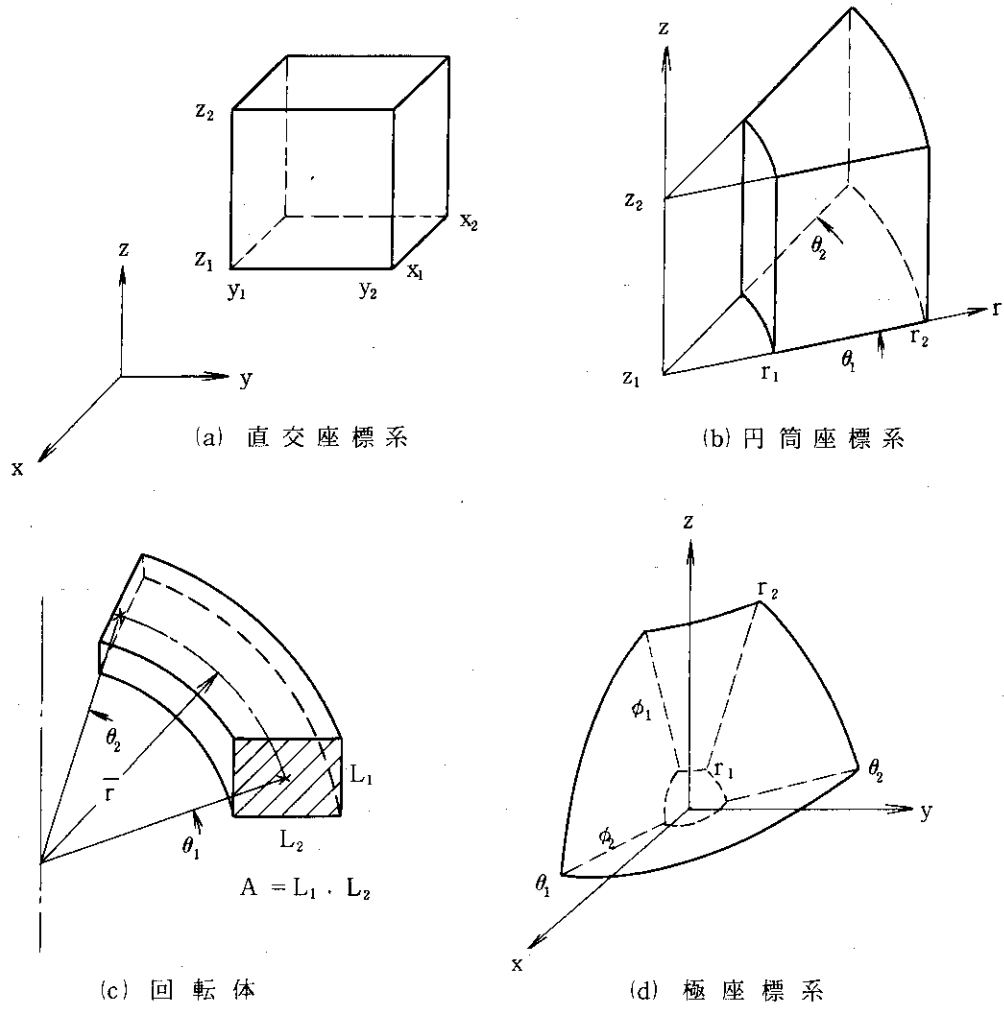
(3) 円筒座標系

座標 r , z , θ を持つ円筒座標系で表わされた面で囲まれた種々の体積要素の体積は次のように表現される。

$$\Delta V = r \cdot \Delta r \cdot \Delta z \cdot \Delta \theta \quad (2.20)$$

有限体積要素、あるいはノードに関しては、

$$V_n = \frac{1}{2} (r_2^2 - r_1^2)(z_2 - z_1)(\theta_2 - \theta_1) \quad (2.21)$$



第2.1図 座標系

すなわち

$$V_n = 2\pi \bar{r} (r_2 - r_1) (z_2 - z_1) \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \quad (2.22)$$

ここで

$$\bar{r} = (r_2 + r_1) / 2 \quad (2.23)$$

KDが2の場合は、BLOCK 4の寸法ファクターは次のように与えるとよい。

$$\left. \begin{aligned} d_r &= \bar{r} = (r_2 + r_1) / 2 \\ d_w &= (r_2 - r_1) \\ d_\ell &= (z_2 - z_1) \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

ここで

$$\frac{1}{2\pi} = 0.15915494$$

θ が0から 2π まであれば($\theta_2 - \theta_1 = 2\pi$)、 $d_\ell = (z_2 - z_1)$ となる。一次元の半径方向の熱流の場合は、 $(z_2 - z_1)$ は任意に1.0、すなわち $d_\ell = 1.0$ とすればよい。

(4) 回転体

回転軸のまわりで角 $\Delta\theta$ だけ回転する面積 ΔA で形成される種々の体積要素の体積は次のように表わされる。

$$\Delta V = r \Delta A \Delta \theta \quad (2.25)$$

ここで r は回転軸からの面積 ΔA の半径である。有限体積要素、すなわちノード n については、

$$V_n = 2\pi \bar{r} A \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \quad (2.26)$$

となる。 \bar{r} は軸からの面積 A の図心の半径である。面積 A が2個のファクター L_1 、 L_2 の積で表現できて、KDが2であれば、BLOCK 4の寸法ファクターを次のようにするとよい。

$$\left. \begin{aligned} d_r &= r \\ d_w &= L_1 \\ d_\ell &= L_2 \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.27)$$

ここで

$$\frac{1}{2\pi} = 0.15915494$$

もし、完全な回転体、すなわち θ が0から 2π までであるならば($\theta_2 - \theta_1 = 2\pi$)、 $d_\ell = L_2$

となる。

(5) 極座標系

原点からの距離 r , $x-y$ 平面内での角度 θ , 正方向の z 軸からの角度 ϕ を持つ球座標系で表わされた面で囲まれた種々の体積要素の体積は次のように表わされる。

$$\Delta V = r^2 \cdot \sin \phi \cdot \Delta r \cdot \Delta \theta \cdot \Delta \phi \quad (2.28)$$

有限体積要素, すなわちノード n に対しては, 次のようになる。

$$V_n = \frac{1}{3} (r_2^3 - r_1^3) (\cos \phi_1 - \cos \phi_2) (\theta_2 - \theta_1) \quad (2.29)$$

すなわち

$$V_n = 4\pi (\bar{r})^2 (r_2 - r_1) \left(\frac{\sin \bar{\phi}}{2} \right) (\phi_2 - \phi_1) \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \quad (2.30)$$

ここで

$$r = r_{av} \left[1 + \frac{1}{12} \left(\frac{r_2 - r_1}{r_{av}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.31)$$

$$r_{av} = \frac{r_2 + r_1}{2} \quad (2.32)$$

$$\sin \bar{\phi} = \sin (\phi_{av}) \left[\frac{\sin \{ (\phi_2 - \phi_1) / 2 \}}{(\phi_2 - \phi_1) / 2} \right] \quad (2.33)$$

$$\phi_{av} = \frac{\phi_2 + \phi_1}{2} \quad (2.34)$$

$(r_2 - r_1) < (r_{av} / 6)$ の時は $r_{av} = r$ と置換えてもよい (0.1%位の誤差)。また $(\phi_2 - \phi_1) < 0.15 \text{ rad.}$ ($= 8.6^\circ$) の時は, $\phi_{av} = \bar{\phi}$ と置換えてもよい (0.1%位の誤差) 内半径が 0 で, 外半径が r_2 である球面体に対しては, \bar{r} は $(r_{av} / \sqrt{3})$ あるいは $0.57735 r_{av}$ となる。

KD が 3 の場合は, BLOCK 4 の寸法ファクターを次のようにするとよい。

$$d_r = \begin{cases} \bar{r} & \dots\dots\dots (r_2 - r_1) > (r_{av} / 6) \text{ の時} \\ r_{av} & \dots\dots\dots (r_2 - r_1) < (r_{av} / 6) \text{ の時} \end{cases} \quad (2.35)$$

$$d_w = (r_2 - r_1) \quad (2.36)$$

$$d_\ell = \left(\frac{\cos \phi_1 - \cos \phi_2}{2} \right) \cdot \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \quad (2.37)$$

あるいは

$$d_L = \left(\frac{\sin(\bar{\phi})}{2} \right) (\phi_2 - \phi_1) \left(\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \right) \quad (2.38)$$

θ が 0 から 2π ($\theta_2 - \theta_1 = 2\pi$) であるか、あるいは ϕ が 0 から π ($\phi_2 - \phi_1 = \pi$) である時は d_L はさらに簡単になる。ノードが完全な球殻であれば $d_L = 1$ である。

2.2.7 内部熱生成

系内のノードに対して、単位体積当りの熱生成の割合 g_n (GONE, GG, あるいは GT, 単位はたとえば $\text{cal}/\text{sec} \cdot \text{cm}^3$) を持たせることができる。この割合は、BLOCK 1 あるいは 9 で一定として与えたり、あるいは BLOCK 8 で時間あるいは温度の表 (GT 対 TVARG) の形か、初期値 $g_{0,n}$ (GT) から半減期 $t_{g,n}$ (TVARG) でもって、指数関数的に減衰する形で与えることができる。各時間ステップ Δt の計算には、熱生成割合の平均 \bar{g}_n は次のように表わされる。

$$\bar{g}_n = g_{0,n} e^{-\gamma t} \left\{ \frac{(1 - e^{-\gamma \Delta t})}{\gamma \Delta t} \right\} \quad (2.39)$$

ここで $\gamma = \ln 2 / t_{g,n}$ である。

$\gamma \Delta t$ が小さな値 ($< 10^{-5}$) の場合は、次式が用いられる。

$$g_n = g_{0,n} e^{-\gamma t} \left(1 - \frac{\gamma \Delta t}{2} \right) \quad (2.40)$$

温度に依存する比熱を持つ物質の中の熱生成による温度変化の計算値は、比熱の変化を小さな割合に抑える位に十分に小さい時間ステップが用いられる場合にのみ正確となるであろう。そのためには、BLOCK 1 で SMALL を指定することが必要である。

2.2.8 初期条件および系の定数

(1) 初期条件

温度および化学反応物の重量分布率の初期値、および一定の熱生成割合の与え方には、二つの方法がある。初期温度 T_0 (TONE), 化学反応物の重量分布 a_0 (ALONE) および b_0 (BONE), および熱生成割合 g_0 (TONE) の一定値を BLOCK 1 で与えると、BLOCK 9 で個々のノードに対して他の値を後で与えない限り、BLOCK 4 で後に記述するノードのすべてにこれらの値が割当てられる。BLOCK 9 のインプットデータ欄がブランクであれば、それに相当する BLOCK 1 の中の値が代わりに置換えられる。BLOCK 1 を、インプットデータの中で一度以上用いることにより、その後のデータブロックに対して別々の定数を与えることができる。

(2) 系の定数

BLOCK 1 の後から読み込まれる他のデータブロック内のブランクのデータと置換えるために、いくつかの定数を BLOCK 1 で与えることができる。一定の流量の割合 w_0 (FONE), 外部熱伝達率 h_0 (HONE), 外部ふく射形態係数 F_0 (RONE), 外部自然対流指数 P_0 (PONE) がその定数である。これらはそれぞれ FLOWN, HSURE, RSURE, POWER がブランクでインプッ

トされた時に、置換わる定数である。BLOCK 1を、インプットデータの中で一度以上用いることにより、その後のデータブロックに対して別々の定数を与えることができる。

2.2.9 内部熱伝達

(1) 内部熱接触

i) 熱接触

ノード間の内部熱接触に対しては、BLOCK 5で、接触するノードのノード番号 N_i (NOD1) と N_j (NOD2), 接触距離 d_i (DEL 1) と d_j (DEL 2), および境界面 (接触面) の寸法ファクター d_ℓ (DLONG) と d_r (DRAD) を与えなければならない。境界面のコンダクタンス $h_{i,j}$ (HiNT) を与えて、境膜を通した伝導の効果や、接続する面間の空間を通過する伝導と対流を表現することもできる。またふく射形態係数 $\mathcal{F}_{i,j}$ (RINT) を与えて、接続している面間のふく射伝熱に関する表面ふく射率の効果も表現することもできる。 $h_{i,j}$, $\mathcal{F}_{i,j}$ のいずれも与えなかった場合は、そのノード間は完全な熱接触をしているものとして、プログラム内では $h_{i,j} = 10^{12}$ としている。

熱接触のコンダクタンス $U_{i,j}$ (TRAN; 単位はたとえば $\text{cal}/\text{sec} \cdot ^\circ\text{C}$) は次のように計算される。

$$U_{i,j} = A_{i,j} \left[\frac{1}{(d_i/\bar{k}_i) + (d_j/\bar{k}_j) + (1/\bar{H}_{i,j})} \right] \quad (2.41)$$

ここで

$$A_{i,j} = \alpha \cdot d_\ell \cdot d_r^\beta \cdot S_d \quad (2.42)$$

$$\bar{H}_{i,j} = h_{i,j} + \sigma \mathcal{F}_{i,j} (\bar{T}_i + \bar{T}_j)(\bar{T}_i^2 + \bar{T}_j^2)$$

あるいは

$$\bar{H}_{i,j} = h_{i,j} \left| \bar{T}_i - \bar{T}_j \right|^{\mathcal{F}_{i,j}} \quad (2.44)$$

\bar{k}_i, \bar{k}_j ; 時間ステップ当りのノード N_i と N_j の平均熱伝導率

(平均温度 T_i, T_j における推算値)

$$\alpha = \begin{cases} 1 \\ 2\pi \\ 4\pi \end{cases} \quad \beta = \begin{cases} 1 & \dots\dots\dots K_d \text{ (KD)} = 1 \text{ の時} \\ 1 & \dots\dots\dots K_d \text{ (KD)} = 2 \text{ の時} \\ 2 & \dots\dots\dots K_d \text{ (KD)} = 3 \text{ の時} \end{cases}$$

S_d (SCALE); スケールファクター

(2.44) 式は $\mathcal{F}_{i,j}$ の値が負で与えられた時に、(2.43) 式の代わりに用いられ、 $\mathcal{F}_{i,j}$ の絶対値 (>0) が温度差に対する指数として用いられる。(2.44) 式のようなコンダクタンスの形は、自由対流熱伝達に対して用いられる形である。

いくつかのノードの組同志で数個の接触を指定することもある。もし、境界面のコンダクタンスが、上述のようにモデル化できない温度あるいは時間の依存があるなら、非常に薄いノー

ドを、そのようなノード間におけばよい。そしてその薄いノードに対しては、望みのコンダクタンスが得られるように、温度あるいは時間の表の形をした熱伝導率を持った物質を指定する。

(2.41) 式によって、正しい接触コンダクタンスが求められるならば、接触長さや面積ファクターを任意に与えてよい。その値は、ノードに対して与える。BLOCK 4 の寸法ファクターとは無関係である。このようにすれば、任意形状の系、および任意のタイプの内部熱接触を記述することができる。

ii) 接触長さと接触面積

接触長さは、それぞれのノード内の代表点（すなわち節点）の位置に依存する。節点の位置は任意に選ぶことができるが、非定常の計算の場合に、最も正確にするためにはノードの図心とした方がよい。例外として、熱流束がそのノードの表面の温度に依存している場合は、節点をそのノードの表面に選ぶことが必要である。たとえば、特定の熱流束を除いた任意のタイプの表面の熱流束を持つノード、およびふく射伝熱を含んだ内部接続や(2.44)式で表わされる自然対流のオプションを用いている内部接続を持つノードなどである。ノード N_i と N_j を含んだ他の内部接触の熱コンダクタンスと比較して非常に大きな $U_{i,j}$ (TRAN) となるような熱接触は避けるように注意しなければならない。このような場合は、熱収支をとる時に数値的な桁落ちなどが起こる。このような接続に対しては、2個のノードを単一のノードにしてしまうか、あるいは節点をさらに別の位置に移すなどして、誤差が小さくなるような処置をすべきである。

通常、異なる熱伝導率を持つノード同志の熱接触は、接触面積 \bar{A}_i と \bar{A}_j を持つ。非定常の問題の場合は、等温面の位置が時間によって変化し、同時に熱流路も変化する。平均長さおよび平均面積は熱流の方向に沿って、あるいは熱流に垂直な境界面に沿って、あるいは節点同志を結ぶ直線か曲線に沿ってなどの仮定に基づいて計算される必要がある。ノード同志が同一の熱伝導率を持つのであれば、接触の熱コンダクタンスに関して、境界面の位置が単に熱流路の総括の距離と平均面積に依存するだけで、影響を及ぼすことはない。上述のような平均面積と距離に従って、一般の接触の熱コンダクタンスは次のように表わされる。

$$U_{i,j} = \frac{1}{\frac{\bar{d}_i}{k_i \bar{A}_i} + \frac{\bar{d}_j}{k_j \bar{A}_j} + \frac{1}{H_{i,j} \bar{A}_{i,j}}} \quad (2.45)$$

ここで、特有の接触面積 $A_{i,j}$ を与えるために、それに相当する接触長さを次のように与える。

$$d_i = \bar{d}_i (A_{i,j} / \bar{A}_i) \quad (2.46)$$

$$d_j = \bar{d}_j (A_{i,j} / \bar{A}_j) \quad (2.47)$$

円筒や球の中の単純な半径方向流れの場合には、平均面積 \bar{A}_i 、 \bar{A}_j はそれぞれ、節点における面積と境界面における面積の間の対数平均値か幾何平均値のいずれかにすべきである。両方のノードの熱伝導率が同じである場合は、 $A_{i,j}$ は節点の位置間の適当な平均面積、 d_i 、 d_j は節点からある任意の境界面の位置までの実際の半径方向の距離であればよい。

一次元の系においては、ノードの境界面のすべてが熱流の方向に直角で、適当な平均面積を用いるのであれば、熱コンダクタンスは正確に表現されるであろう。二次元、あるいは三次元

の系においては、熱コンダクタンスが正確に表現されるのは、ノード境界面が節点同志を結んだ線に直角で、適当な平均位置（直交座標系での算術平均、円筒の半径の対数平均、球の半径の幾何平均）における線と交差する場合だけである。このようにするのは難しいことではあるが、このような方法で実際と適合させるのが理想であろう。

iii) 各座標系における接触長さおよび接触面積

直交座標系においては、 x, y, z 方向の熱接触に対する接触長さおよび接触面積は、それぞれ次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} d_i &= \Delta x_i, & d_j &= \Delta x_j, & A_{i,j} &= \Delta y \cdot \Delta z \\ d_i &= \Delta y_i, & d_j &= \Delta y_j, & A_{i,j} &= \Delta z \cdot \Delta x \\ d_i &= \Delta z_i, & d_j &= \Delta z_j, & A_{i,j} &= \Delta x \cdot \Delta y \end{aligned} \right\} \quad (2.48)$$

円筒座標系においては、 r, θ, z 方向の熱接触に対する接触長さおよび接触面積は、それぞれ次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} d_i &= \Delta r_i, & d_j &= \Delta r_j, & A_{i,j} &= r \Delta z \Delta \theta \\ d_i &= \bar{r}_i \Delta \theta_i, & d_j &= \bar{r}_j \Delta \theta_j, & A_{i,j} &= \Delta r \Delta z \\ d_i &= \Delta z_i, & d_j &= \Delta z_j, & A_{i,j} &= \bar{r} \Delta r \end{aligned} \right\} \quad (2.49)$$

\bar{r} は算術平均値である。

極座系においては、 r, θ, ϕ 方向の熱接触に対する接触長さおよび接触面積は、それぞれ次のように表わされる。

$$\left. \begin{aligned} d_i &= \Delta r_i, & d_j &= \Delta r_j, & A_{i,j} &= r^2 \sin \bar{\phi} \Delta \phi \Delta \theta \\ d_i &= r_i \sin \phi_i \Delta \theta_i, & d_j &= r_j \sin \phi_j \Delta \theta_j, & A_{i,j} &= r_{av} \Delta r \Delta \theta \\ d_i &= r_i \Delta \phi_i, & d_j &= r_j \Delta \phi_j, & A_{i,j} &= r_{av} \Delta r \sin \phi \Delta \theta \end{aligned} \right\} \quad (2.50)$$

ここで r_{av} と $\bar{\phi}$ は (2.32) ~ (2.34) 式で求められる値である。

寸法ファクター d_ℓ と d_r は、(2.42) 式によって正しい接触面積が求まるように、それぞれ任意の値を与える。

(2) 流れの接続

熱は同じ物質のノードをつないでいる流路を通る質量流れを通して伝わる。上流側ノード N_i (NODF 1) と下流側ノード N_j (NODF 2) の間の流れの接続に対しては、一定値 (FLOWN, 単位はたとえば g/sec)、あるいは時間あるいは温度の表 (FLOWT 対 TVARFL) の形で与えることのできる流量割合 $F_{i,j}$ を指定しなければならない。さらに、節点からその接続面までの相対的な距離 d_i (DELF 1) と d_j (DELF 2) を指定しなければならない。 d_i と d_j は、接続面を通して流れる流体の熱量を線形補間によって計算するために用いられる。これらのデータは BLOCK 10 で指定する。

系内に流体が流れ込む場所では、体積が 0 のノードを上流側ノードとして用いるとよい。一定

の入口温度は、体積が0の上流側ノードに望みの初期温度を与えることにより得られる。時間に依存する入口温度の場合は、体積が0のノードに対して、時間によって変化する望みの温度を持つ境界ノードとの外部接触を与えることにより得られる。

下流側のノードは体積が0であってはならない。系外に流体が流出する場所では、接続を指定する必要はない。使用する方程式の形は、流れの接続をしている面を通してノードに流入、あるいはノードから流出する流体流れが、そのノードの中で一定流量を保ちながら、ノードの温度によって同じ流れあるいは逆の流れを伴っているという仮定に相当するものである。このように、流体は流路の上流のノードの温度で系に入り、下流のノードの温度で系から出る。

それぞれの接続を横切る流れは、流体や系内に含まれている化学反応物の総括の顕熱、潜熱を伴って流れる。相変化が生じている時に、低温相の濃度に及ぼす影響は、各々のノードのまわりの熱収支量だけに依存する。そのため、このような濃度は直接の物質移動効果として計算されるのではなく、反応濃度として計算される。

2.2.10 表面熱伝達

(1) 外部温度

系とその周囲の間の熱伝達を含めた境界条件を表現するのに、便宜上外部温度を定義する。このような外部温度に対しては、(物質、反応物質、ノードなどに付けた番号とは無関係な)境界ノード番号を割当て、一定値あるいは時間に依存する温度 T_b を与えなければならない。 T_b は時間に対する表 (TEMPB 対 TIMEB) の形か、あるいは、平均値 $T_{b,0}$ (TEMPB(1))、振幅 ΔT_b (TEMPB(2))、周期 t_b (TIMEB(1))、および位相差 Δt_b (TIMEB(2)) を与えて、次式のような時間に関する周期曲線的な変化として与えることもできる。

$$T_b(t) = T_{b,0} + \Delta T_b \cdot \sin \left(2\pi \left(\frac{t + \Delta t_b}{t_b} \right) \right) \quad (2.51)$$

便宜上、外部温度を参照するのに、境界ノード という表現を用いるものとする。上述のデータは BLOCK 7 で指定する。

外部温度として用いる温度を記述する別の方法として、非常に大きな熱容量を持つノードを用いることにより、その温度が、ノードと系との間の熱流によって変化しないようにする方法もある。この場合のノードに対しては、一定値を維持する初期温度を与えたり、時間に対する表の形で与えることのできる熱生成割合 g_n (GT) を与えたり、あるいは時間に関して指数関数的に増加あるいは減少する熱生成割合を与えたりすることができる。境界条件として熱流束を与える場合は、非常に小さな熱容量を持つノードに一定あるいは変動する熱生成割合を与えて実際の表面のノードと熱接触させるとよい。

(2) 外部熱接触

系とその周囲の間の熱流は外部熱接触を通して流れる。表面のノード N_s (NODS) と境界ノード N_b (NODSB) との熱接触に対しては、寸法ファクター d_ℓ (DLONG) と d_r (DRAD) を与えなければならない。表面の接触面積 $A_{s,b}$ (AREAS) は、 d_ℓ と d_r を用いて次のように計算される。

$$A_{s,b} = \alpha d_\ell d_r^\beta S_d^2 \quad (2.52)$$

ここで α , β , S_d は(2.18)式において定義しているものである。 d_ℓ と d_r はノードや内部接触面積に対して指定した d_ℓ , d_r とは全く無関係に指定することができる。

外部との熱接触に対する総括表面コンダクタンスあるいは総括熱伝達係数には、自然あるいは強制対流とふく射が含まれる。熱伝達率 $h_{s,b}$ は一定値(HSURE)か、あるいは時間か温度に関する表(HSURT対TVRH)の形で与える。また自然対流の指数 $P_{s,b}$ (POWER)を与えることもできる。ふく射の形態数 $\mathcal{F}_{s,b}$ (RSURE)もまた与えることができる。これらのデータはBLOCK 6で指定する。総括表面コンダクタンスは次のように計算される。

$$U_{s,b} = A_{s,b} \left\{ \bar{h}_{s,b} \left| \bar{T}_s - \bar{T}_b \right|^{P_{s,b}} + \sigma \mathcal{F}_{s,b} (\bar{T}_s + \bar{T}_b) (\bar{T}_s^2 + \bar{T}_b^2) \right\} \quad (2.53)$$

ここで $\bar{h}_{s,b}$; その時間ステップに関する平均値

(温度 $(\bar{T}_s + \bar{T}_b) / 2$ において求められる値)

\bar{T}_s, \bar{T}_b ; その時間ステップに関する表面のノード、境界ノードのそれぞれの平均温度

表面温度を時間によって変動させたい場合は、望みの温度変動を持つ境界ノードに、非常に大きな熱伝達率 $h_{s,b}$ を介して表面のノードを接触させるとよい。表面の温度が一定であるか、あるいは時間に関して直線的、あるいは指数関数的に変化する場合には、表面ノードを、大きな内部接触コンダクタンス $h_{i,j}$ (HINT)を介して、大きな熱容量を持ち、一定温度、あるいは直線的あるいは指数関数的に変化する熱生成をしているふつうのノードと接触させることもできる。

表面の熱流束を時間によって変動させたい場合は、その表面と非常に高い温度 T_b を持つ境界ノードを非常に小さな伝熱係数 $h_{s,b}$ を介して接触させ、積 $h_{s,b} T_b$ が単位面積当りの望みの表面熱流束と等しくなるように $h_{s,b}$ 対時間の表で与えるとよい。別の方法として、表面における望みの熱入力を与えるために、内部熱生成の割合を与えた薄い表面ノードを用いることもできる。

絶対的に正しくするために、表面のノードを体積が0のノードか、非常に薄いノードのいずれかにするか、その節点を外表面に持つノードにすべきである。このことは、自然対流伝熱やふく射伝熱の場合に特に重要であるが、表面熱流束を与える場合はそれ程重要ではない。

多数の表面ノードが同一の外部温度と接触していて、伝熱係数 $h_{s,b}$ (HSURE)が表の形でない場合は、非常に大きな熱伝達率を介して、境界ノードと接している体積0のノードとその様な表面のノードを接触させることにより、外部熱接触の数を少なくすることができる。

2.2.11 温度の関数

(1) 温度の関数

系そのものを変動させることなしに、系にその温度が系内の他の温度の関数であるノードを組込むことが有効であったり必要であったりすることがある。この方法を情報のみを得るために受動的に行ったり、得られた温度を系内のいろいろな場所における温度依存の変数の値をコントロールするのに用いることもある。温度は、系内の他の温度との、加重平均、和、差などのいくつかの線形結合と等しいものとして得られる。温度の時間微分や時間積分を得ることもできる。このような温度によってコントロールされる変数は、温度に関して表の形で与えられていてもよい。

境界ノードの温度の曲線的な変化し、熱生成割合の指数関数的な変化を組合せて使用することにより、多種類の関数とコントロールの方法を用いることができる。

求めようとするノードと他の系のノードとの間の必要ないくつかの熱接触のコンダクタンスは、それによって生じる熱流量が無視できる程十分に小さくすべきである。求めようとしているノードの熱容量を、それらの時間定数、あるいは系の温度の変化に反応した時間遅れが非常に小さな時間から非常に大きな時間の範囲内に入るように調整することができる。求めようとするノードは系内にある物質のノードであっても、計算を簡単にするために、その密度及び熱容量の値を1.0にした物質のノードであってもよい。接触面積を1.0として、HINTあるいはHSUREを用いて、ある望みの総括コンダクタンスを得ることもできる。

(2) 温度の線形結合

温度の一般的な線形結合は次のように表現される。

$$T_s = \sum_{n=1}^N a_n T_n + a_c T_c \quad (2.54)$$

ここで T_s は求めるノードの温度、 T_n はノードの温度、 T_c はある一定の温度、 a_c は1か0のいずれか、 a_1 は a_n の値の最大値である。小さい特別なノードか、あるいは体積が0のノードである求めるノードは、1からNまでのノードと総括コンダクタンス

$$h_n = h_1 a_n / a_1 \quad (2.55)$$

を介して接続され、もし $a_c = 1.0$ であれば、温度 T_c の境界ノードと総括コンダクタンス

$$h_c = h_1 / a_1 \quad (2.56)$$

を介して接続される。また $h_0 \approx 0$ の時はゼロ温度の境界ノードと総括コンダクタンス

$$h_0 = h_1 (1 - a_c - \sum_{n=1}^N a_n) / a_1 \quad (2.57)$$

を介して接続される。求めるノードの時間定数は次式で与えられる。

$$t_s = C_s a_1 / h_1 \quad (2.58)$$

ここで C_s は求めるノードの総熱容量である。 h_1 と C_s の値は系から求めようとするノードに流入する熱流が小さく、 t_s が測定に対する時間遅れの許容内になるように合わせられる。

一次の算術平均に関しては、 $a_1 = a_2 = 1/2$, $a_c = 0$, $h_1 = h_2$, $h_c = h_0 = 0$ である。一次の温度差に関しては、 $a_1 = 1/2$, $a_2 = -1/2$, $a_c = 0$, $h_2 = -h_1$, $h_c = 0$, $h_0 = h_1$ である。また温度に一定値を加える時は、 $a_1 = 1$, $a_c = 1$, $h_c = h_1$, $h_0 = -h_1$ である。

(3) 温度変化の割合

他のノードにおける温度変化の割合に比例する温度を求めるためのノードを用いることもできる。

$$T_s \cong b \left(\frac{dT_1}{dt} \right) \quad (2.59)$$

これは、熱容量 C_n のノードnをノード1とコンダクタンス h_n を介して接続させることにより

行われる。もし $t_n = C_n/h_n$ が十分に小さければ、両方のノードとも次のように、およそ同じ割合をもって変化するであろう。

$$\frac{dT_n}{dt} = \frac{h_n}{C_n} (T_1 - T_n) \cong \frac{dT_1}{dt} \quad (2.60)$$

従って

$$(T_1 - T_n) \cong \frac{C_n}{h_n} \left(\frac{dT_1}{dt} \right) \quad (2.61)$$

この温度差に比例する温度が、ノード 1, ノード n, および b の項で述べたようなゼロ温度を持つ境界ノードと接続する体積 0 のノードを用いることによって得られる。

$$T_s = a (T_1 - T_n) = \frac{a C_n}{h_n} \left(\frac{dT_1}{dt} \right) = b \left(\frac{dT_1}{dt} \right) \quad (2.62)$$

ここで $a = b \cdot h_n / C_n$ である。前と同様に、 h_n はノード n との他の接触のコンダクタンスに比べて小さく、また体積 0 のノードとノード n との間のコンダクタンスは h_n に比べて小さい。温度 T_s は、時間の周期がなめらかで、時間遅れの誤差を持って近似的に t_n に等しい T_1 の時間微分に近似的に比例する。この測定の方法は、速度測定のアナログの機機や電気機器でも起こるような不安定さを持ち、加えて次の時間ステップの誤差が不連続な時間ステップの使用の結果として出る。

(4) 温度の時間積分

温度の関数の時間積分を得る最も簡単な方法は、その系に単位体積、密度および比熱を持つノードを加え、温度に対する内部熱生成の割合 $G(T)$ の表を与えて、求めようとするノードの温度でコントロールさせることである。

$$T_s = T_{s,0} + \int_0^t G(T_1) dt \quad (2.63)$$

ここで $T_{s,0}$ は求めるノードの初期温度、 $G(T_1)$ は $a T_1$, $a(T - T_0)$ などのような形で表現されるものである。温度 T_s は系内の他のある温度依存の表関数の値をコントロールするのに順番に用いられ、積分のコントロールが得られる。

2.2.12 位置の温度に依存する属性

温度の表関数であるいくつかの属性を、適用するノードとは別のノードの温度で計算することができる。熱容量、熱伝導率、反応熱、対数衝突頻度、活性化エネルギー、熱生成の割合、流量の割合、熱伝達率がそのような属性である。その属性を適用するノードのノード番号 N_1 (NODP 1) と、その属性の値をコントロールする温度を持つノードのノード番号 N_2 (NODP 2)、及び属性番号 N_p (NPROP, 上述の属性に対して 1 から 8 までの値を持つ) を BLOCK 12 で、他の位置に依存する属性のそれぞれについて指定する。数式で記述すると次のようになる。

$$P_{N_p}(T_{N_1}) = P_{N_p}(T(T_{N_2})) \quad (2.64)$$

ここで \underline{x}_{N_i} はノードの一般化された空間の座標である。

コントロールするノード N_2 を、系内の他の温度の加重平均、差、微分、あるいは積分と等しい温度を持つような方法で接続させることができるということに注意すべきである。このことは、フィードバックや自動制御、属性の必要な値の計算などを含んだ問題を解くなどの広い多様性を与える。

3. 計算プログラムの説明

3.1 計算プログラムの構成

TRUMP 3 - JR は第 3.1 図に示すように 3 つの部分から構成されている。

- (1) プリプロセッサ PRE-TRUMP
- (2) 温度計算 TRUMP 3
- (3) ポストプロセッサ POST-TRUMP

プリプロセッサ PRE-TRUMP は、TRUMP の入力データを有限要素データと通常の TRUMP データから作成するものであり、ポストプロセッサ POST-TRUMP は TRUMP の計算結果から、温度変化図および温度分布図を描くとともに、応力計算用のデータを編集するものである。

3.2 TRUMP 3 の構成

TRUMP 3 の計算の流れは第 3.2 図に示すとおりであり、プログラムの構成は第 3.3 図に示すサブプログラム群から成る。これらのサブプログラムの機能について以下に示す。

MAIN : 入力データをサブルーチン ECHO によって読み込む。

TRMAIN : Dimension の配分をする。

HEART : TRUMP 3 プログラムの主要な制御プログラムである。

TALLY : 問題の名称、BLOCK 1 および BLOCK 9 のデータの読み込み、および時間ステップの制御プログラムである。

THERM : BLOCK 2, BLOCK 4 および BLOCK 12 のデータの読み込み、各時間ステップにおいて、ノード熱伝導、質量、熱容量、熱量、全物質量、平均温度の計算をする。THERM にはエントリー THERM 1 と THERM 2 があり、これらはそれぞれ潜熱の計算とその後の温度計算をする。

GEN : BLOCK 8 のデータの読み込み、熱発生量の計算をする。

CHEM : BLOCK 3 のデータの読み込み、化学反応と熱収支の計算をする。

FLINK : BLOCK 5 のデータの読み込み、接合部の熱移動の計算をする。

FLOW : BLOCK 10 のデータの読み込み、流体との熱移動の計算をする。

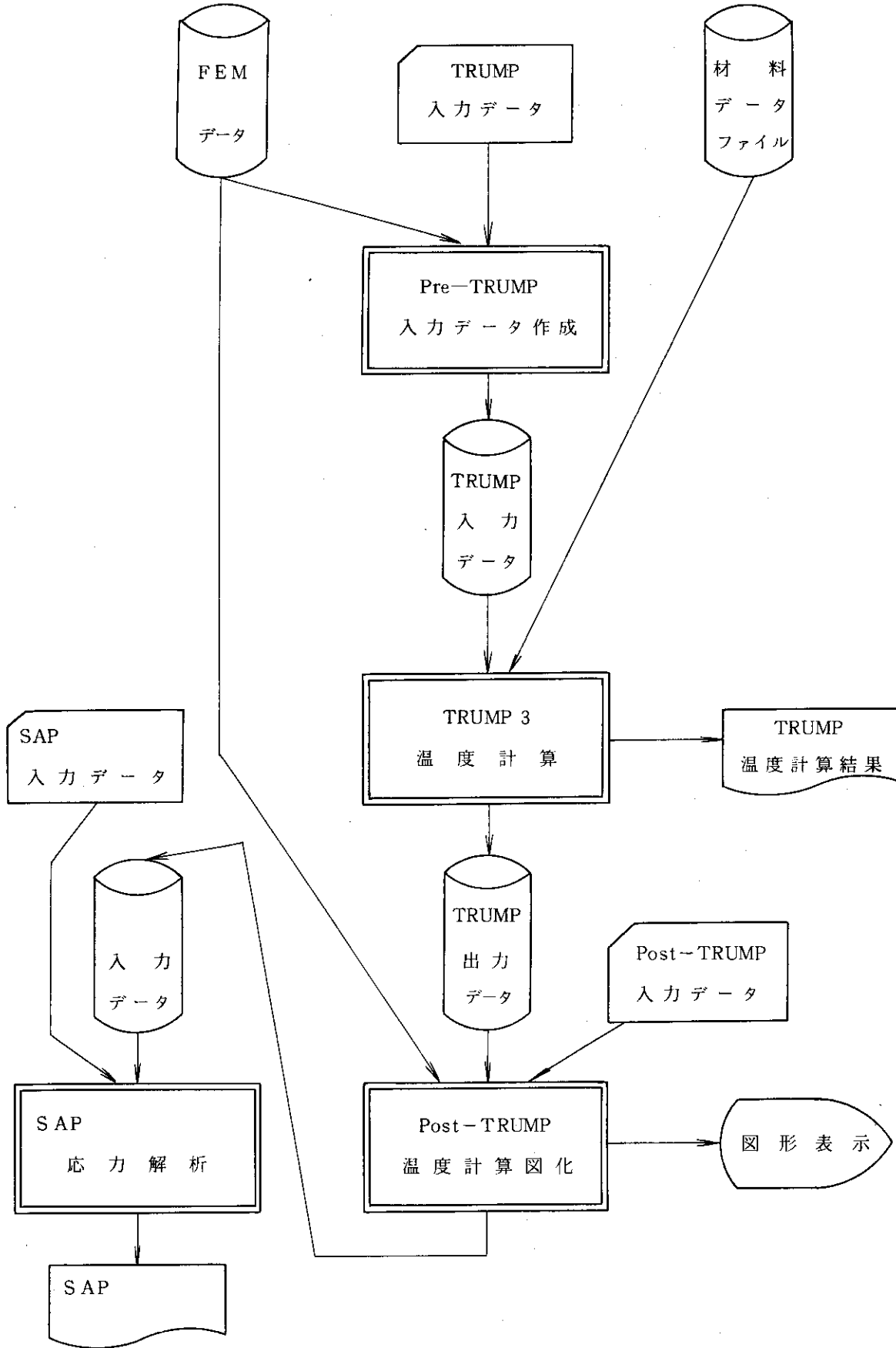
SURE : BLOCK 6 と BLOCK 7 のデータの読み込み、境界面からの熱移動の計算をする。

SPECK : 熱移動の最終の計算をする。

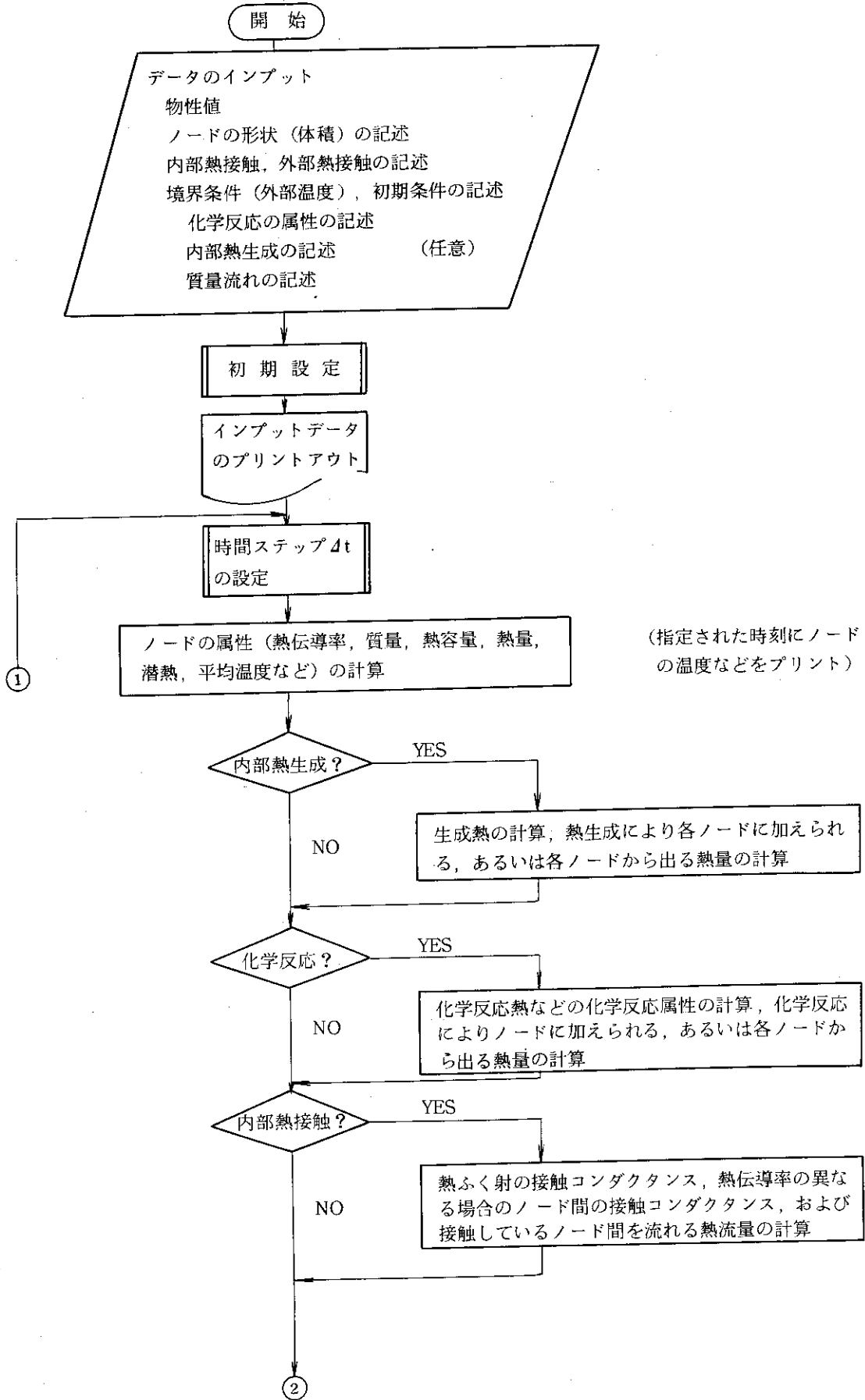
PRIME : 材料データファイルから BLOCK 2 のデータを整理して作る。

PATCH : 入力データの受渡しをする。

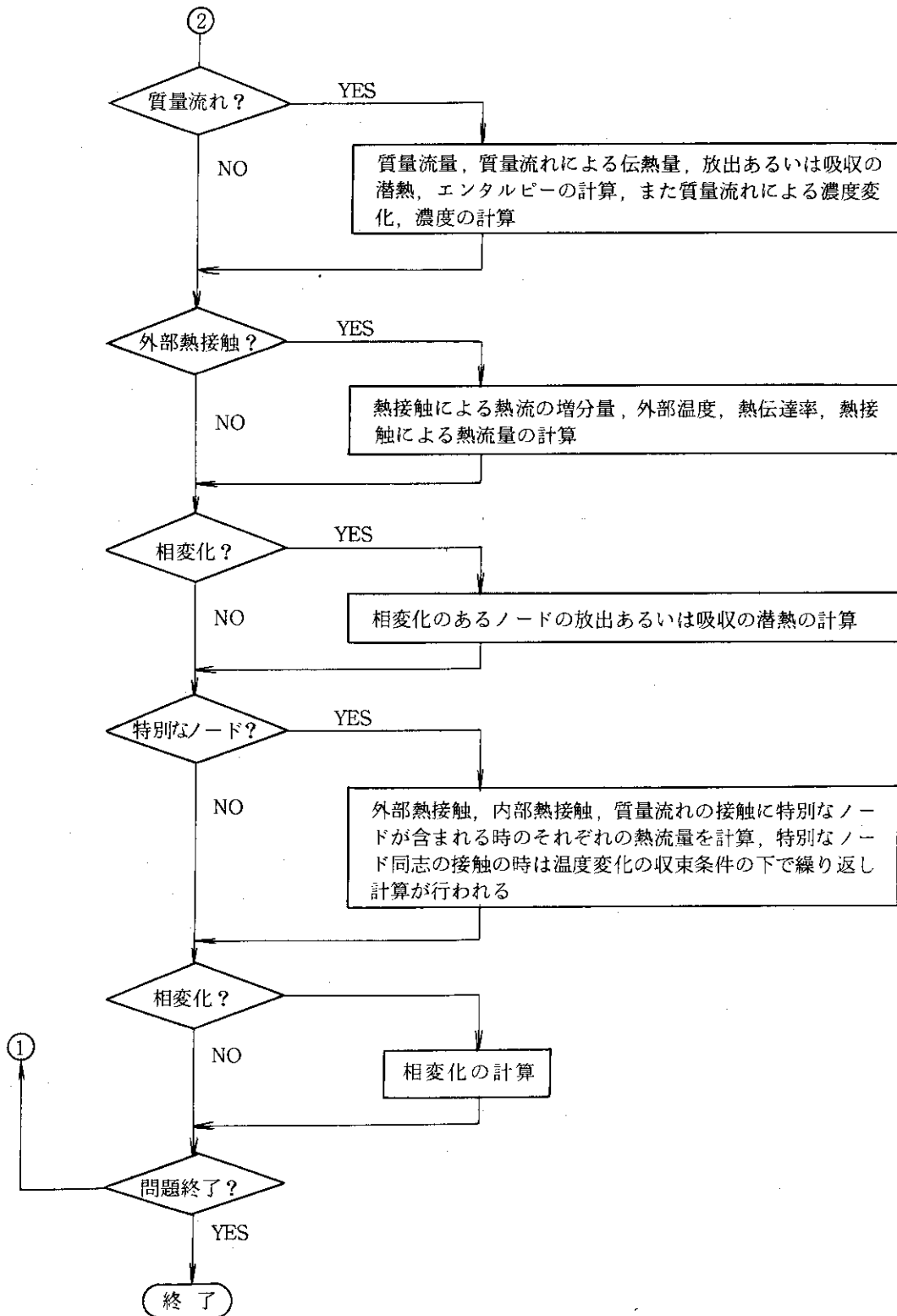
MOVEC : 入力データの整理をする。



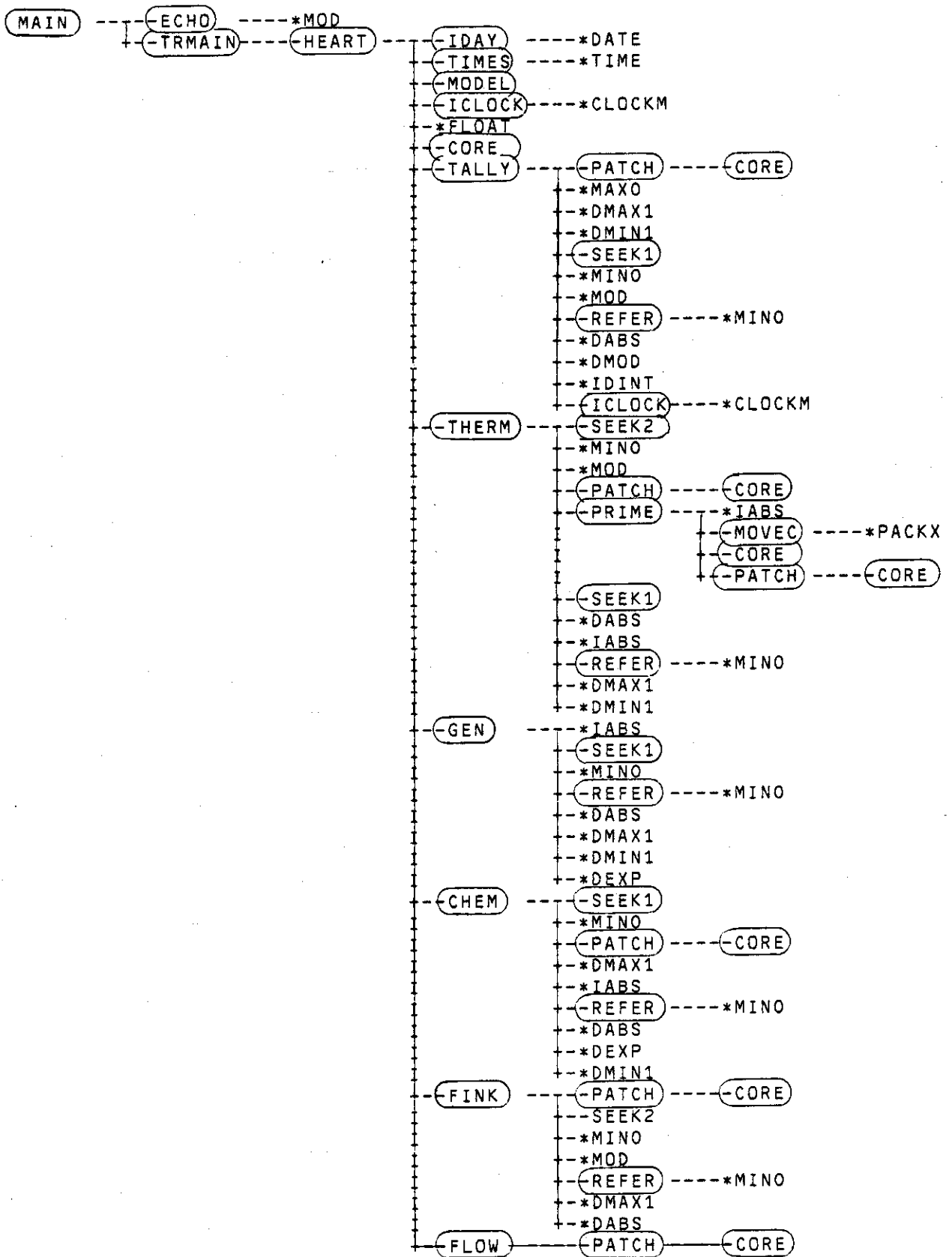
第 3.1 図 TRUMP 3-JR フローシート



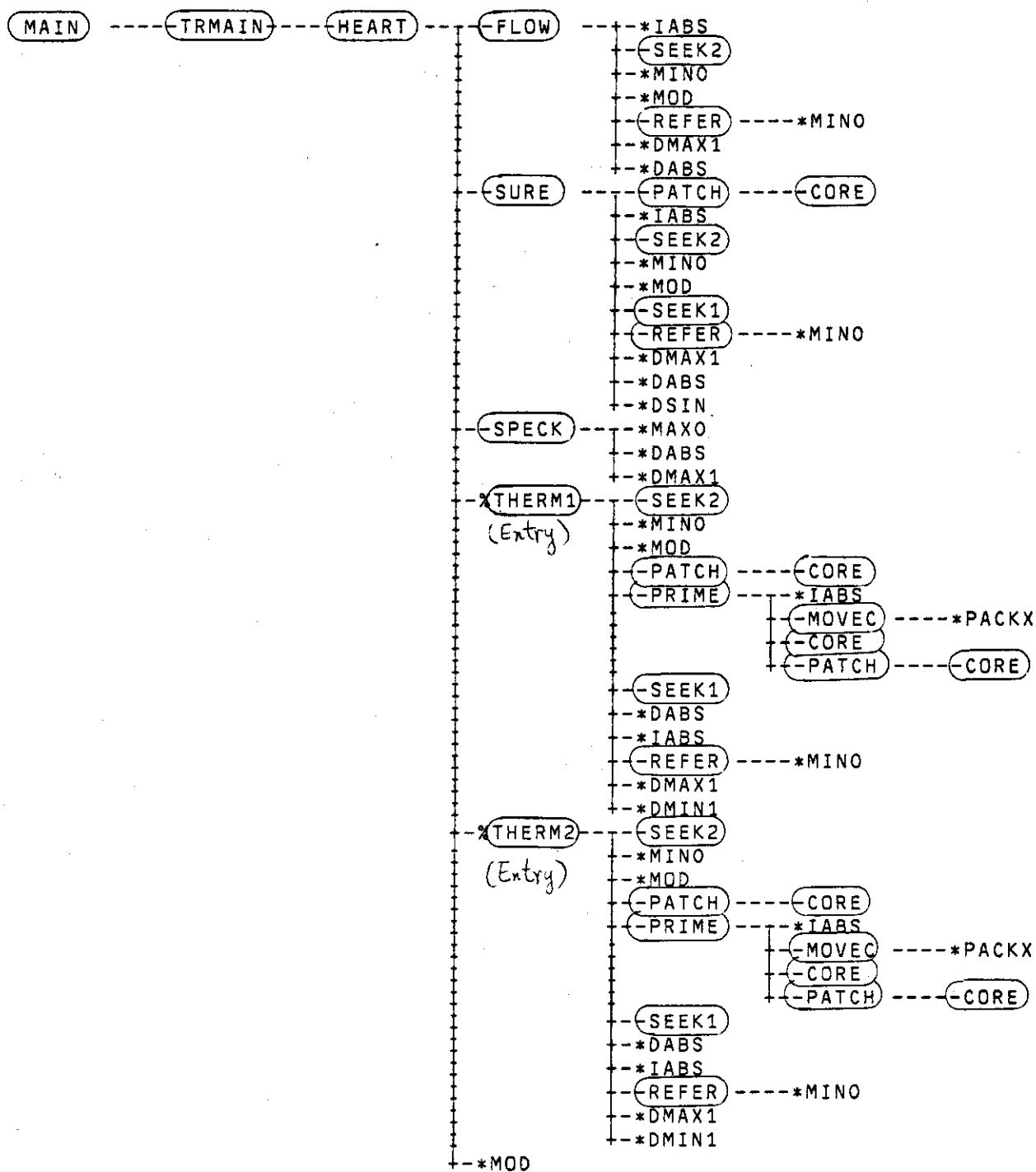
第 3.2 図 TRUMP 3 の計算の流れ (1)



第 3.2 図 TRUMP の計算の流れ (2)



第 3.3 図 TRUMP3 の構造 (1)



第3.3図 TRUMP3の構造 (2)

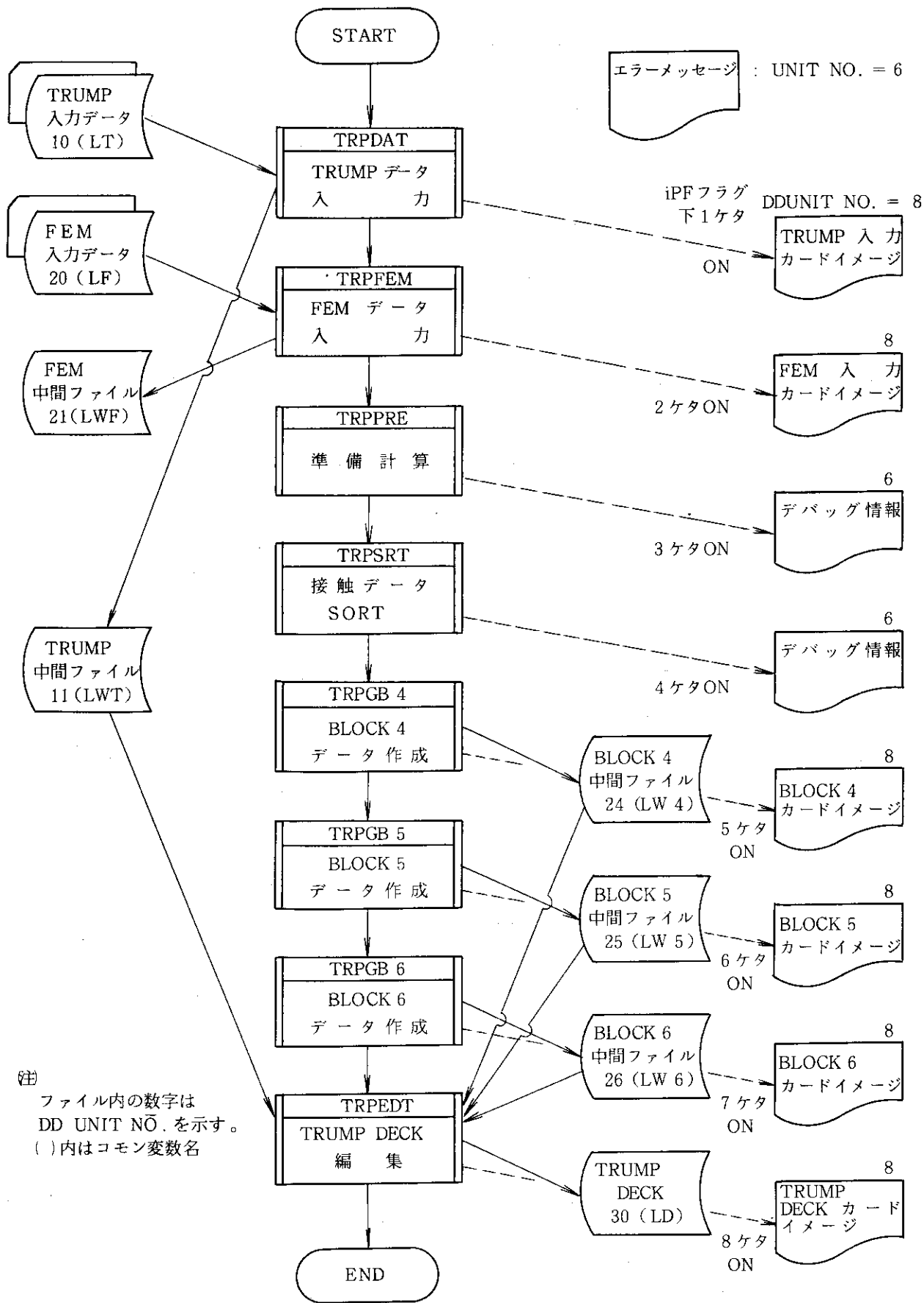
CORE : ファイル47のリワインドをする。
SEEK 1 : BLOCK 2, 3, 4, 7, 9のBタイプのデータの読み込みをする。
SEEK 2 : BLOCK 5, 6, 10, 12のBタイプのデータの読み込みをする。
REFER : 入力データのエラーチェックをする。
BLOCKDATA : 各BLOCKデータの制限値の定義をする。
IDAY : 年月日を求める。
TIMES : 時刻を求める。
ICLOCK : 計算時間を求める。
MODEL : 計算の進行状態のオプション。

3.3 PRE-TRUMPの構成

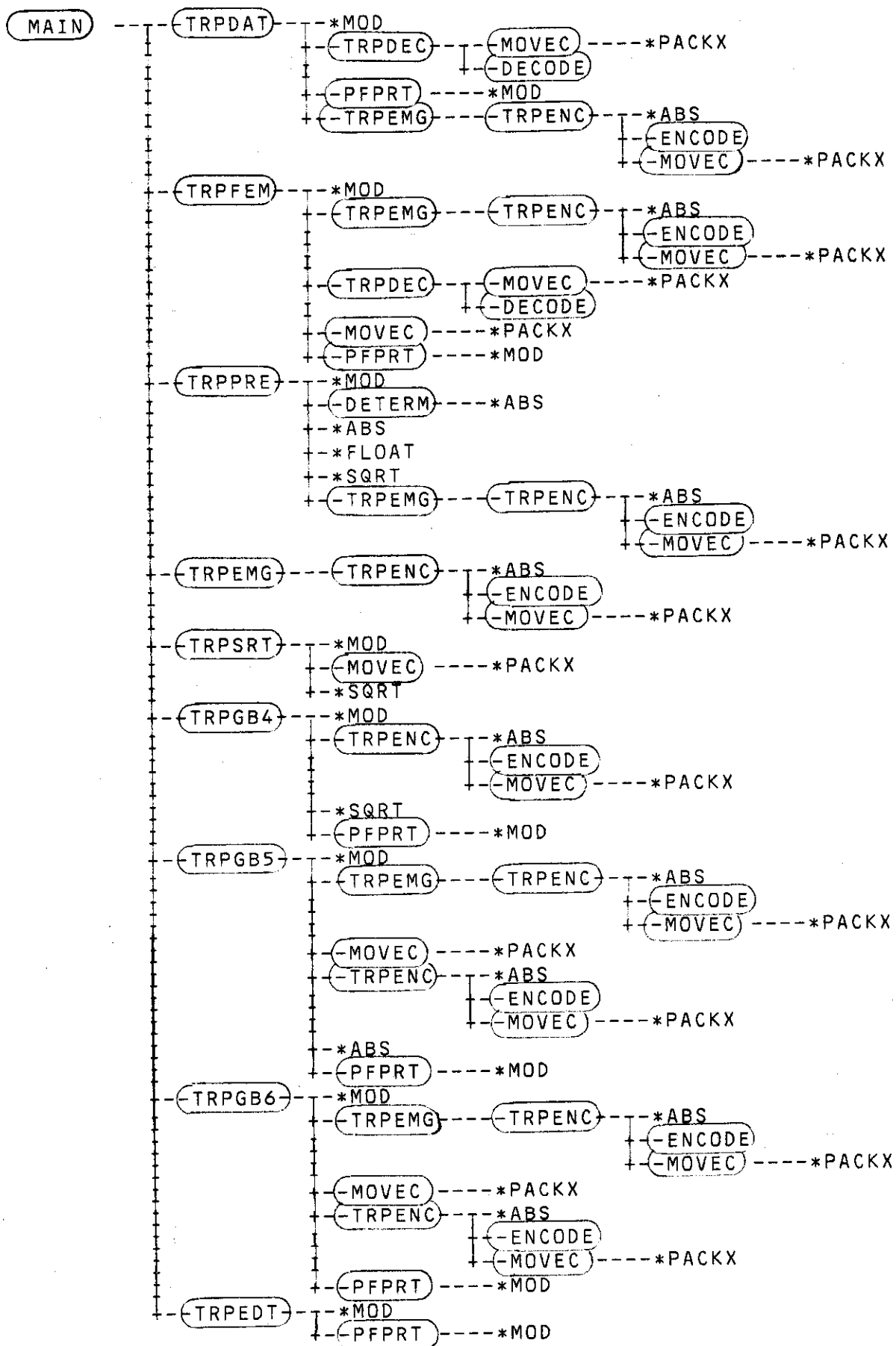
PRE-TRUMPは有限要素データとTRUMPデータを用いてTRUMP 3の全データを作成するものであり、プログラムの流れは第3.4図に示すとおりである。主要なサブルーチンの機能は第3.4図に示している。PRE-TRUMPの構造は第3.5図に示す。

3.4 POST-TRUMPの構成

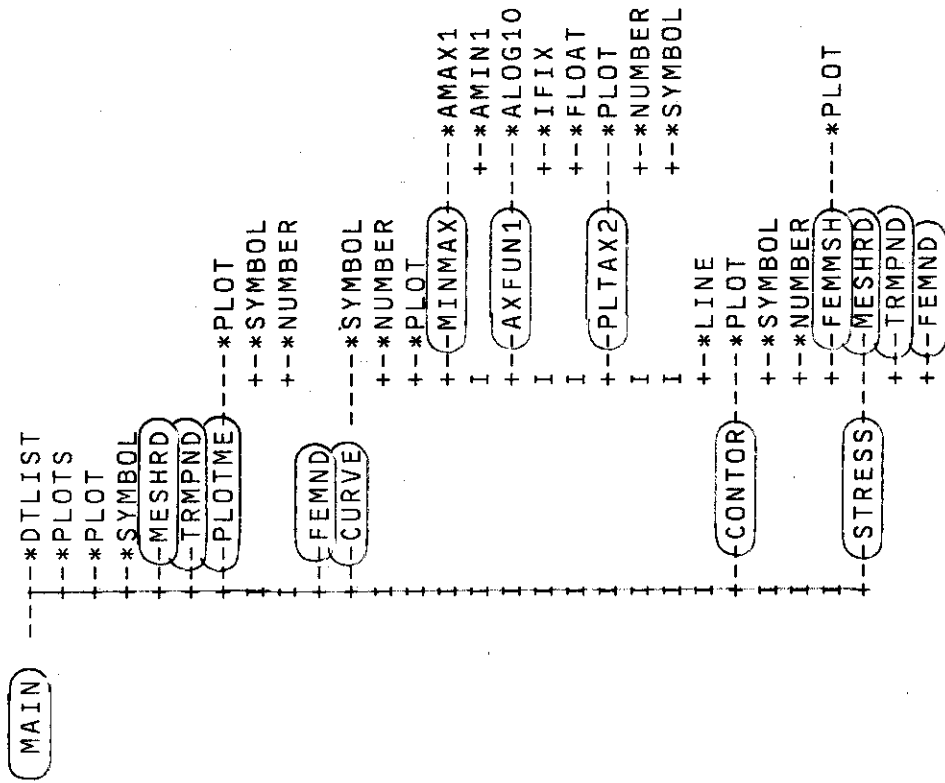
POST-TRUMPはTRUMP 3の計算結果から温度変化図と温度分布図ならびに応力解析用のデータを作成するものであり、プログラムの流れと主要なサブルーチンの機能は第3.6図に示すとおりである。またPOST-TRUMPの構造は第3.7図に示す。



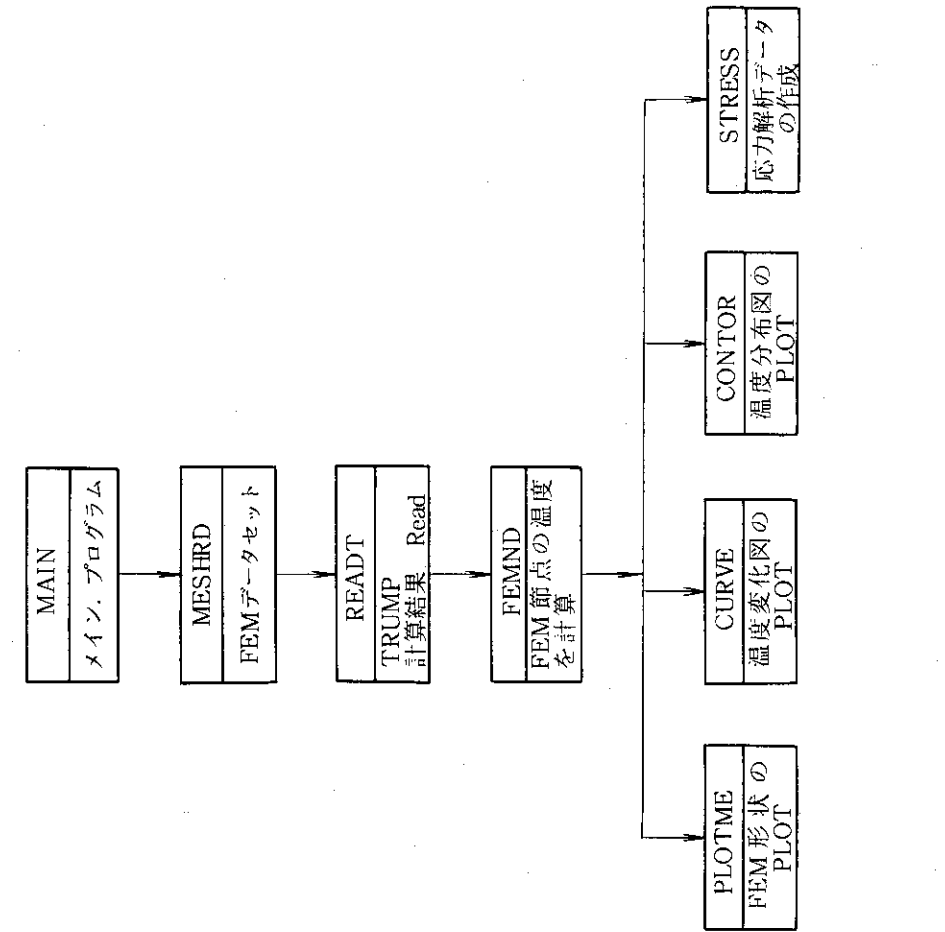
第 3.4 図 PRE-TRUMP フローシート



第3.5図 PRE-TRUMP の構造



第3.6図 POST-TRUMPのフローシート



第3.7図 POST-TRUMPの構造

4. TRUMP3の入力・出力形式

4.1 TRUMP3の入力形式

入力データは、各ケース毎に、Problem Name カード、Block Number カード、およびData Endカードから成る。複数の問題を扱う時に、Problem Name カードのデータの繰返しのコントロールや、Block Number カードのBlockの変更コントロールを用いることにより、同一のデータを何度も記述することがないようにすることもできる。

(1) 問題の名称カード

入力データの中の各ケースの最初はProblem Name カードでなければならない。第1カラムは必ず“*”とし、2～71カラムの間、および73～80カラムの間にその問題のタイトルやコメントなどを記入する。72カラムはデータの繰返しのコントロール(K)のためのカラムである。

データの繰返しのコントロールKが2, 3, あるいは4のいずれかであれば、その問題のすべてのデータが保存され、データを変更したり、新たに追加したりする必要のあるデータブロックだけが、その中に追加、修正して組込まれる。

初期温度、および初期反応濃度が、新しくBLOCK 9 A, あるいはBLOCK 9 B で修正されていなければ、その前の問題の初期値(K=2の時)、あるいは最終値(K=3, あるいは4の時)が、その問題の初期値として設定される。

初期時間がBLOCK 1で修正されていなければ、その前の問題の初期時間(K=2, あるいは3の時)、あるいは最終時間(K=4の時)が、その問題の初期時間として用いられる。

最小許容時間ステップSMALLを、データを追加、修正する前の(オリジナルの)BLOCK 1で指定していなければ、K=3, あるいは4と指定している問題の中で指定すべきである。

Problem Name カードの内容のすべて(NAME)が、すべてのアウトプットの始めに、問題の連続番号、および実行開始の時間と日付とともに表示される。第1カラムが“*”でないコメントなどを含んだカードを、Problem Name カードの前におけば、その内容がプリントアウトされる。

第4.1表にK=2, 3, 4のそれぞれの場合の、初期温度、初期反応濃度、初期時間の設定の方法を示す。(いずれも新しく初期値を修正していない場合である)。

(2) ブロックデータ

第4.2表および第4.3表、第4.4表にそれぞれのインプットデータブロックの内容を示す。各ブロックは必ずBlock Number カードで始まり、BLOCK 1とBLOCK 11を除いて、必ずブランクカードで終わらなければならない。

Block Number カードには、1カラム～5カラムに“BLOCK”, および6カラム～7カラムにブロック番号(1～12のいずれかの値を右づめで)を記入する。

8カラムには、ブロックのタイプ(MOD)を記入する。MODがA, Bのいずれでもなければ、そのブロックに読込まれたデータが、その前に読込まれている同じブロックのデータの代わりに置き換えられる。MODがAであれば、そのブロックに読込まれたデータが、その前に読込まれて

いる同じブロックのデータに追加される。MODがBであれば、そのブロックに読込まれたデータが、その前に読込まれている同じブロックの中の同じ参照番号を持つデータを修正するか、あるいは同じ参照番号がなければ追加される。ただし、このようなオプションはBLOCK 1とBLOCK 11には適用できない。

そのブロックについてのコメントがあれば、Block Number カードの9カラム～80カラムの間に記入すれば、その内容がプリントアウトされる。また、そのブロックについてさらにコメントがある場合は、Block Numberカードの後に、コメントを含んだカード(ただし、6カラム～7カラムは必ずブランクとする)を続ければ、その内容がプリントアウトされる。

BLOCK 1は、BLOCK 1の中のデータが以前の問題から繰返されているのでなければ、Problem Nameカードの後に続けなければならない。BLOCK 1は、その後のデータブロックの中のデータの初期設定に用いられるパラメータ(SCALE, KD, TONE, ALONE, BONE, GONE, FONE, HONE, RONE, 及びPONEなど)を変更するために、同一問題内で一度以上用いることもできる。このようにデータブロックは、上述のパラメータのひとつ、あるいはそれ以上の値を種々変化させるために、セクションに分割して、それぞれのセクションより前の新しいBLOCK 1を持つデータデッキの中に入れることができる。

第4.1表 データの繰返しのコントロールと初期値の設定法

データの繰返しのコントロールK	初期温度	初期反応濃度	初期時間
2	前の問題の初期値	前の問題の初期値	前の問題の初期値
3	前の問題の最終値	前の問題の最終値	"
4	"	"	前の問題の最終値

第4.2表 入力データブロック

BLOCK	内 容
1	問題のコントロール, 制限, 定数 (注 a, b)
2	物質の属性 (注 a)
3	反応物質の属性
4	ノードの記述 (ノードの体積の記述)(注 a)
5	内部熱接触 (伝熱面積, 接触抵抗等の記述)(注 a)
6	表面の熱接触 (外部温度との接触の伝熱面積, 接触抵抗等の記述)
7	外部温度 (境界ノードの記述)(注 c)
8	内部熱生成 (熱生成をしているノードの記述)
9	初期値 (温度, 反応濃度, 内部熱生成)
10	流れの接触 (流出側と吸込側のノードの記述)
11	作図のコントロール, 作図するノード
12	温度依存の特性を持つノード

(注 a) すべての問題に必要なデータブロック

(注 b) 他のデータブロックより先に読込まなければならない(問題の最初のデータブロックでなければならない)

(注 c) BLOCK 6があれば、必ず必要である。

第4.3表 TRUMP3 入力データ

1. Problem Name Card (必須)

コメント欄		71 72 73	80
-------	--	----------	----

2. Problem Name Card (必須) (区切)

K	コメント欄		71 72 73	80
---	-------	--	----------	----

3. Block 1 問題のコントロール, 制限定数 (必須)

BLOCK 1		コメント欄		79 9	80								
1	IPRINT	NUM	KDATA	KSPEC	MCYC	MSEC	NPUNCH	NDOT	IRITE	ITAPE	TIMEP	SCALE	
	5 6	10 11	15 16	20 21	25 26	30 31	35 36	40 41	45 46	50 51	60 61	70 71	
2	KD	KT	DELTQ	SMALL	TVARY	TAU	TMAX	TMIN	TMAX				
	5 6	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71					
3	TONE	ALONE	BONE	GONE	FONE	HONE	RONE	PONE					
	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71						

第4.3表 (つづき)

4. Block 2 物質の属性 (必須)

コメント欄											
MOD											
BLOCK 2											
7 8 9											
1	AMNT	MAT	KA	KB	LTABC	LTABK	DENS	CAPT	TMELT	HMELT	
	5 6	10 11	15 16	20 21	25 26	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80
2	CAPT(1)	IIVAKC(1) IIVAKC(2) -----									
	2	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80		
3	CONT(1)	IIVAKK(1) CONT(2) -----									
	2	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80		

(Blockの終りはブランクカードでなければなりません)

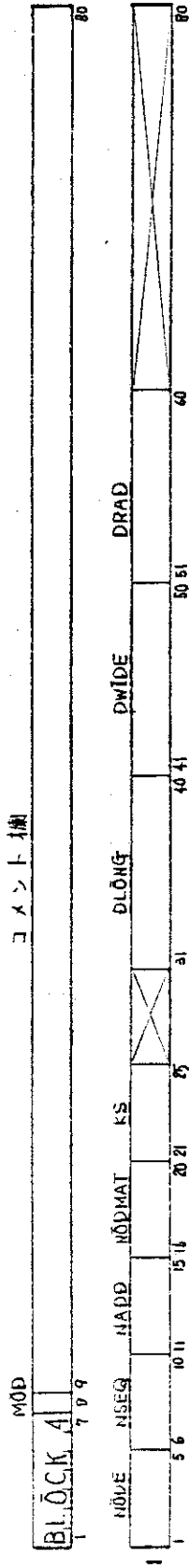
5. Block 3 反応物質の属性 (選択)

コメント欄											
MOD											
BLOCK 3											
7 8 9											
1	ANEM	ELEM	LTABZ	LTABE	QI	ZI	EI	CORD			
	5 6	10 11	15 16	20 21	25 26	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80
2	QI(1)	IIVAKQ(1) QI(2) IIVAKQ(2) -----									
	1	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80		
3	EI(1)	IIVAKZ(1) ZI(2) IIVAKZ(2) -----									
	1	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80		
4	EI(1)	IIVAKE(1) EI(2) IIVAKE(2) -----									
	1	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80		

(Blockの終りはブランクカードでなければなりません)

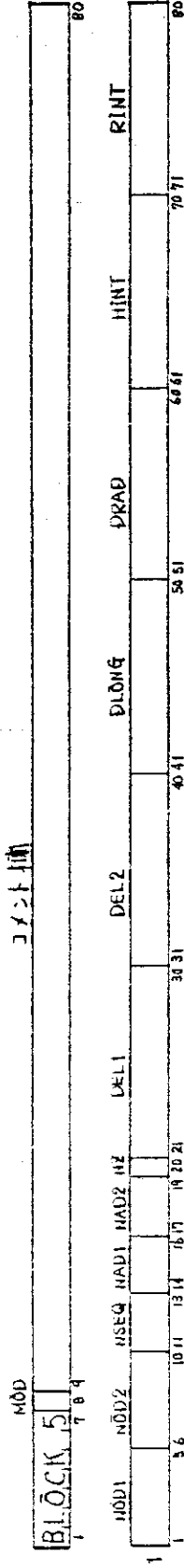
第4.3表 (つづき)

6. Block 4 ノードの記述 (必復)



(Block の終りはアランカードでなければならぬ)

7. Block 5 内部熱接触 (選択)



(Block の終りはアランカードでなければならぬ)

第4.3表 (つづき)

8. Block 6 外部熱接触 (選択)

MOD											コメント欄											
BLOCK 6																						
1	1	5	6	10	11	15	16	20	21	25	26	30	31	40	41	50	51	60	61	70	71	80
2	1	10	11	20	21	30	31	40	41	50	51	60	61	70	71	80						

(Blockの終りはブランクカードでなければならぬ)

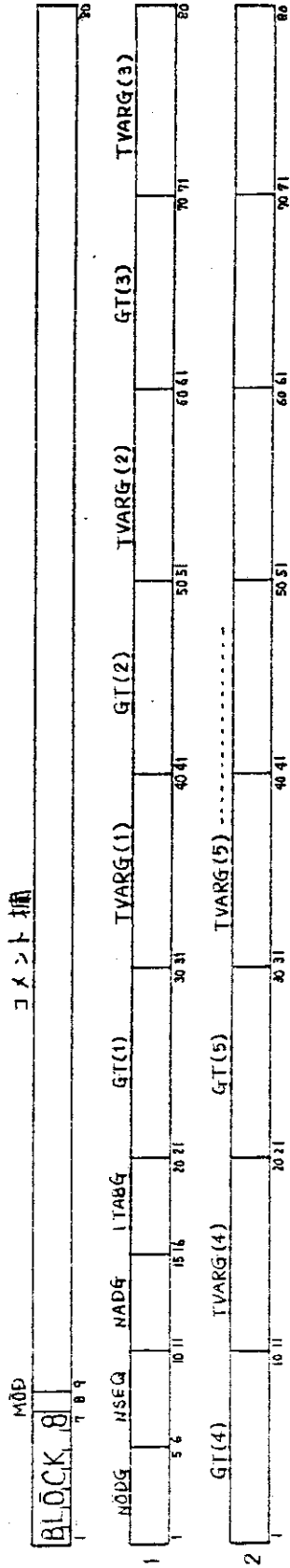
9. Block 7 外部温度 (選択, ただしBlock 6がある時は必須)

MOD											コメント欄											
BLOCK 7																						
1	1	5	6	10	11	20	21	30	31	40	41	50	51	60	61	70	71	80				
2	1	10	11	20	21	30	31	40	41	50	51	60	61	70	71	80						

(Blockの終りはブランクカードでなければならぬ)

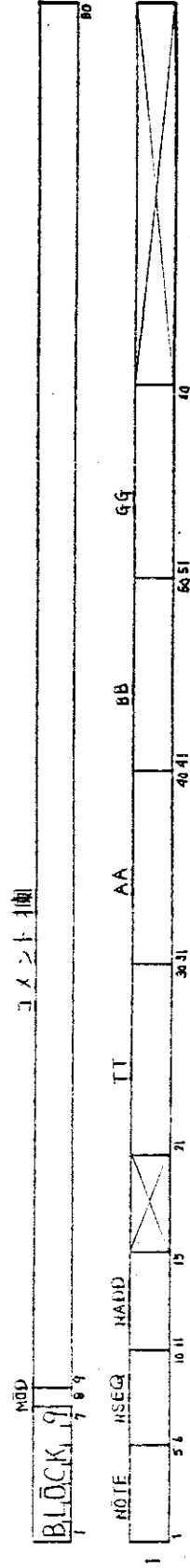
第 4.3 表 (つづき)

10. Block 8 内部熱生成 (選択)



(Block の終りはフラクカードでなければならぬ)

11. Block 9 初期値: 温度, 濃度, 内部熱生成 (選択)



(Block の終りはフラクカードでなければならぬ)

第4.3表 (つづき)

12. Block 10 流束の接続 (選択)

コメント欄											
BLOCK10											
7 8 9											
1	NODF1	NODF2	NSEQ	NADEF1	NADEF2	LIABFL	FLOWH	DELF1	DELF2		
	5 6	10 11	15 16	20 21	25 26	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80
2	FLOWT(1)	TVAREL(1)	FLOWT(2)	TVAREL(2)	-----						
	10 11	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80			

(Blockの終りはブランクカードでなければならぬ)

13. Block 11 作図のコントロール (選択)

コメント欄																
BLOCK11																
7 8 9																
1	JPIC	LOGR	LOGTEM	LOGTIM	FRAD1	FRAD2	FTEMP1	FTEMP2	FTIME1	FTIME2						
	5 6	10 11	15 16	20 21	30 31	40 41	50 51	60 61	70 71	80						
2	NODEP(1)	NODEP(2)	NODEP(3)	-----												
	5 6	10 11	15 16	20 21	25 26	30 31	35 36	40 41	45 46	50 51	55 56	60 61	65 66	70 71	75 76	80

第4.3表 (つづき)

14. Block 12 他のノードの温度に依存する物性を持つノード (選択)

コメント欄									
BLOCK12									
80									
MOD									
1 7 8 9									
HODP1 HODP2 HPRPP HSEQ NADP1 NADP2 NADPP									
1 5 6 10 11 15 16 20 21 25 26 30 31 35									

(Blockの終りはフラグカードでなければならぬ)

15. Data Endカード (必須)

コメント欄									
ENDED-1									
80									

16. 最終カード (必須)

コメント欄									
*SPLIT									
80									

第4.4表 TRUMPのブロックデータ

(1) BLOCK 1 問題のコントロール, 制限, 定数 (必須)

a. Card 1 FORMAT(10I5, 2F10.0) 全体のコントロール

記号	カラム	内 容
IPRINT	1 ~ 5	プリントの間隔(時間ステップを何回繰返す毎にプリントするかを指定する)。ただし, 1回目, 2回目, および最終回の時間ステップについては必ずプリントアウトされる。また TIMEPにより指定した時間毎にプリントアウトすることもできる。 使用しない場合は負数, 0, あるいはブランクのままとする。
NUM	6 ~ 10	全時間ステップについて, 温度, 温度変化の割合, 相あるいは反応特質の濃度, 熱生成の割合, および時間をプリントアウトするノードのノード番号
KDATA	11 ~ 15	プリントアウトする量のコントロール 0 : ふつうの量 1 : 最大量 -1 : 最小量(1) (1回目, 2回目がふつうのプリント) -9 : 最小量(2) (1回目, 2回目も最小のプリント)
KSPEC	16 ~ 20	ノードの分類, および差分方程式のコントロール。通常は0か, ブランクのままとする。 0であれば, 通常のノードが, 時間ステップ上で安定限界を維持する必要のある時に特別なノードとして再分類され, 熱収支の差分方程式の中の補挿係数が0.57~1.0の範囲で変化する。 負数であれば, ノードの再分類は全く行われず, 問題の終了の条件として, 定常状態の条件は用いられない。 正の数であれば, 最初の時間ステップの前に, すべてのノードが特別なノードとして再分類される。-2と指定すれば, 補挿係数が1.0と固定されて後退差分が用いられ, 3と指定すれば, 補挿係数が0.5と固定されて中央差分が用いられる。 ノードの分類は, BLOCK 4のKSの値によって個々に行なわれる。 BLOCK 6で記入されるノードはすべて特別なノードとして分類される。 KSPEC > 0の場合はDELTOと, SMALLを指定しなければならない。
MCYC	21 ~ 25	時間ステップの最大許容繰返し回数。使用しない場合は0かブランクのままとする。負の数にすると最初の時間ステップの計算だけで終了する。
MSEC	26 ~ 30	使用できない (ブランクのままとする)。
NPUNCH	31 ~ 35	計算が正常に終了した時に, 最終時のT, A, B, およびGをBLOCK 9のインプット形式に従ってパンチアウトする場合, 0以外の値を記入する。パンチアウトされたBLOCK 9のデータを用いることにより, さらに計算を続けることができる。
NDOT	36 ~ 40	0以外の値にすると, 計算の間, すべての時間微分が0に維持される。通常は指定しない(0, あるいはブランクのまま)。

第 4.4 表 (つづき)

(BLOCK 1 Card 1 の続き)

記号	カラム	内 容
IRITE	41~45	ITAPE で指定したファイルにアウトプットする(時間, ノード: ノード温度の表)時の時間ステップの繰返しの間隔, ただし 1 回目, 2 回目, および最終回は必ずアウトプットされる。また TIMEP により指定した時間毎にアウトプットすることもできる。 使用しない場合は, 負数, 0, あるいはブランクのままとする。
ITAPE	46~50	ファイルアウトプットする時のユニット番号 IRITE > 0 である時に, ブランクか 0 であれば, ITAPE には 10 がセットされる。 使用しない場合は 0 か, ブランクのままとする。
TIMEP	51~60	プリントアウトおよびファイルアウトする時間間隔。 使用しない場合は, 負数, 0, あるいはブランクのままとする。1 回目, 2 回目, および最終回の時間ステップについては必ずアウトプットされる。IPRINT と TIMEP の両方を指定するとそれぞれのコントロールに従ってアウトプットされるので, いずれか一方のみを指定すべきである。 TIMEP > 0 の場合, SMALL から DELTO の間で時間ステップを合わせることにより, TIMEP の整数倍の時間毎にアウトプットされる。時間ステップは, 他で使われる時間ステップの $\frac{2}{3}$ ~ $\frac{3}{2}$ の間で合わせられる。
SCALE	61~70	スケールファクター。負数か 0, あるいはブランクである時は 1.0 がセットされる。このデータブロック (BLOCK 1) の後で読込まれる BLOCK 4, 5, 及び 6 のすべての長さについてのインプットデータ, 及び別のスケールファクターを与えている他の BLOCK 1 の前に読込まれる BLOCK 4, 5, 及び 6 のすべての長さについてのインプットデータに対してこのスケールファクターが適用される。 (長さが SCALE 倍, 面積が SCALE ² 倍, 体積が SCALE ³ 倍される)。

b. Card 2. FORMAT (2I5, 7F10.0) 対称, 単位, 制限

記号	カラム	内 容
KD	1 ~ 5	対称のタイプの指定 1 ; 非対称 (直交座標系) 2 ; 軸対称 (円筒座標系) 3 ; 点対称 (極座標系) この後に読込まれる BLOCK 4, 5, 及び 6 の中の DRAD の値が次のように置換えられる。 DRAD \leq DRAD KD = 1 の時 DRAD \leq 2 π \cdot DRAD KD = 2 の時 DRAD \leq 4 π \cdot DRAD ² KD = 3 の時

第 4.4 表 (つづき)

(BLOCK 1 Card 2 の続き)

記号	カラム	内 容
KD (続き) KT	6 ~ 10	指定しなければ(0, あるいはブランクのまま), 1 がセットされる。 温度単位 1 ; °C, 2 ; °K, 3 ; °F, 4 ; °R
DELTO	11 ~ 20	指定しなければ(0, あるいはブランクのまま), 1 がセットされる。 許容最大時間ステップ。時間ステップの制限範囲としてSMALLとともに用いられる。指定しない(0か, あるいはブランクのまま)場合, あるいは $10^{-10} \sim 10^{12}$ の範囲内でない場合は 10^{12} がセットされる。 KSPEC > 0 と指定してある時は, DELTOを指定しなければならない。
SMALL	21 ~ 30	許容最小時間ステップ。時間ステップの制限範囲としてDELTOとともに用いられる。通常は必要としない。もし, 10^{-12} より小さい値であれば 10^{-12} がセットされる。SMALLが指定されていないければ, 少なくとも $\frac{1}{4}$ のノードが通常のノードである時に, 系内の通常のノードの最小の時間定数の1%の $\frac{2}{3}$ 倍した値がSMALLにセットされる。データが修正される。前の(オリジナルの)BLOCK 1の中でSMALLを指定していない場合に, ブロックのタイプKが3か4である連続問題があれば, その問題のBLOCK 1の中でSMALLを指定すべきである。
TVARY	31 ~ 40	各時間ステップにおける(希望する)最大温度変化。0か, あるいはブランクのままであれば5.0がセットされる。SMALL~DELTOの制限範囲内で時間ステップの大きさがコントロールされる。定常状態の場合は, 最大温度変化が連続した二時間ステップに対して, $0.001 \times TVARY$ 以下になるまで計算が続けられる。特別なノードに対する繰返し計算の収束条件は, 接触している特別なノードのすべての加重平均の温度変化が $5 \times 10^{-5} \times TVARY$ 以下であること, および, ある有限の体積を持つ特別なノードの温度変化が $5 \times 10^{-4} \times TVARY$ 以下であることである。
TAU	41 ~ 50	初期時間。指定しなければ0がセットされる。
TIMAX	51 ~ 60	許容最大計算時間。0か, あるいはブランクのままであれば使用されない。負の数にすると, 計算は最初の時間ステップだけで終了する。
TMIN	61 ~ 70	許容最小温度。もしTMAXと等しいか, あるいは大きければ -10^{12} がセットされる。BLOCK 2においてTMELT(N)がTMINよりも小さい物質に対してHMELT(N) = 0.0とセットされる。
TMAX	71 ~ 80	許容最大温度。もしTMINと等しいか, あるいは小さければ 10^{12} がセットされる。BLOCK 2においてTMELT(N)がTMAXよりも大きい物質に対してHMELT(N) = 0.0とセットされる。

第 4.4 表 (つづき)

c. Card 3 FORMAT(8F10.0) 系の定数

(BLOCK 1 の後で読込まれるデータブロック内のデータに対してのみ適用される)

記号	カラム	内 容
TONE	1 ~ 10	BLOCK 9 で TT を指定していないすべてのノードの初期温度
ALONE	11 ~ 20	BLOCK 9 で AA を指定していないすべてのノードの中の第 1 化学反応成分の初期重量分率
BONE	21 ~ 30	BLOCK 9 で BB を指定していないすべてのノードの中の第 2 化学反応成分の初期重量分率
GONE	31 ~ 40	BLOCK 9 で GG を指定していないか, あるいは BLOCK 8 で GT 対 TVARG の表を与えていないすべてのノードの熱生成の割合(一定値)(たとえば cal/sec · cm ³)
FONE	41 ~ 50	BLOCK 10 で FLOWN を指定していない流れの接続のノードのすべてについての流量の割合(一定値)
HONE	51 ~ 60	BLOCK 6 で HSURE, あるいは HSURT 対 TVARH の表を指定していない外部との熱接触のすべてについての熱伝達率
RONE	61 ~ 70	BLOCK 6 で RSURE を指定していない外部との熱接触のすべてについてのふく射の形態係数
PONE	71 ~ 80	BLOCK 6 で POWER を指定していない外部との熱接触のすべてについての自然対流の指数

(2) BLOCK 2 物質の属性 (必須)

a. Card 1 FORMAT(A5, 5I5, 5F10.0) 物質の定義

記号	カラム	内 容
AMAT	1 ~ 5	物質の名称 1 カラム目はblankであってはならない。
MAT	6 ~ 10	物質番号
KA	11 ~ 15	物質に含まれる化学反応物の番号。HMELT(N)に0以外の値を指定していれば, KAは使用されない。反応の初期濃度はBLOCK 1(ALONE BONE)か, あるいはBLOCK 9(AA, BB)で指定しなければならない。
KB	16 ~ 20	
LTABC	21 ~ 25	熱容量を表で与える時のそのポイントの数。一定値(1点だけ)を与える時は0か, あるいはblankのままとする。 正の数であれば, 対温度の表, 負の数であれば, 対時間の表であることを示す。
LTABK	26 ~ 30	熱伝導率を表で与える時のポイント数。一定値(1点だけ)を与える時は0か, あるいはblankのままとする。 正の数であれば, 対温度の表, 負の数であれば, 対時間の表であることを示す。
DENS	31 ~ 40	密度(たとえば g/cm ³)
CAPT	41 ~ 50	熱容量(一定(LTABC = 0)の場合)(たとえば cal/g °C)

第 4.4 表 (つづき)

(BLOCK 2 Card1の続き)

記号	カラム	内 容
CONT	51~60	熱伝導率(一定(LTABK = 0)の場合)(たとえば cal/sec·cm·°C)
TMELT	61~70	潜熱 HMELTが吸収,あるいは放出される時の温度
HMELT	71~80	温度 TMELTにおける潜熱の効果(TMELTにおける高温相と低温相の熱量差)(たとえば cal/g) TMELTが TMIN~TMAXの範囲内になれば HMELTには 0. がセットされる。

b. Card 2 A, etc. FORMAT (8 F10.0) 熱容量の表

(一定値を用いる場合(LTABC = 0の時)は不要)

記号	カラム	内 容
CAPT(1)	1~10	熱容量。1カラム目は必ずブランクでなければならない。
TVARC(1)	11~20	CAPT(1)を与える時の温度(LTABC > 0の時),あるいは時間(LTABC < 0の時)
.....	LTABC の数だけ CAPT(N), TVARC(N)の組で記入していく(N = 1~ LTABC)(1枚のカードに4点まで記入できる)。

c. Card 3 A, etc. FORMAT (8 F10.0) 熱伝導率の表

(一定値を用いる場合(LTABK = 0の時)は不要)

記号	カラム	内 容
CONT(1)	1~10	熱伝導率。1カラム目は必ずブランクでなければならない。
TVARK(1)	11~20	CONT(1)を与える時の温度(LTABK > 0の時),あるいは時間(LTABK < 0の時)。
.....	LTABK の数だけ CONT(N), TVARK(N)の組で記入していく。(N = 1~ LTABK)(1枚のカードに4点まで記入できる)。

(3) BLOCK 3 化学反応物質の属性

a. Card 1. FORMAT (A5, 4I5, 5X, 4F10.0) 化学反応物質の記述

記号	カラム	内 容
AKEM	1~5	化学反応物質の名称
KEM	1~10	化学反応物質番号
LTABQ	11~15	反応熱の表のポイントの数。一定値とする場合は0,あるいはブランクのままとする。LTABQ > 0であれば対温度の表, LTABQ < 0であれば対時間の表であることを示す。
LTABZ	16~20	対数衝突頻度の表のポイント数。一定値とする場合は0,あるいはブランクのままとする。LTABZ > 0であれば対温度の表, LTABZ < 0であれば対時間の表であることを示す。

第 4.4 表 (つづき)

(BLOK 3 Card 1 の続き)

記号	カラム	内 容
LTABE	21 ~ 25	活性化エネルギーの表のポイントの数。一定値とする場合は 0, あるいはブランクのままとする。LTABE > 0 であれば対温度の表, LTABZ < 0 であれば対時間の表であることを示す。
QT	31 ~ 40	反応熱(一定値の場合)(たとえば cal/g)
ZT	41 ~ 50	対数衝突頻度(一定値の場合)(たとえば loge (sec ⁻¹))
ET	51 ~ 60	活性化エネルギー(一定値の場合)単位は次のいずれかでなければならない cal/g mole · °C, Btu/lb mole · °F
CORD	61 ~ 70	反応次数。ブランクであれば 1.0 がセットされる。0 次の場合は 0.0 と記入しなければならない。

b. Card 2 A, etc. FORMAT(8F10.0) 反応熱の表

(反応熱が一定(LTABQ = 0)である場合は不要)

記号	カラム	内 容
QT(1)	1 ~ 10	反応熱
TVARQ(1)	11 ~ 20	QT(1)を与える時の温度(LTABQ > 0の時), あるいは時間(LTABQ < 0の時)
.....	LTABQ の数だけ QT(N), TVARQ(N)の組で記入する。(N = 1 ~ LTABQ)(1枚のカードに4点まで記入できる)。

c. Card 3 A, etc. FORMAT(8F10.0) 対数衝突頻度の表

(対数衝突頻度が一定(LTABZ = 0)である場合は不要)

記号	カラム	内 容
ZT(1)	1 ~ 10	対数衝突頻度
TVARZ(1)	11 ~ 20	ZT(1)を与える時の温度(LTABZ > 0の時), あるいは時間(LTABZ < 0の時)
.....	LTABZ の数だけ ZT(N), TVARZ(N)の組で入力する。(N = 1 ~ LTABZ)(1枚のカードに4点まで記入できる)。

d. Card 4 A, etc. FORMAT(8F10.0) 活性化エネルギーの表

(活性化エネルギーが一定(LTABE = 0)である場合は不要)

記号	カラム	内 容
ET(1)	1 ~ 10	活性化エネルギー
TVARE(1)	11 ~ 20	ET(1)を与える時の温度(LTABE > 0の時), あるいは時間(LTABE < 0の時)
.....	LTABE の数だけ ET(N), TVARE(N)の組で入力する。(N = 1 ~ LTABE)(1枚のカードに4点まで記入できる)。

第 4.4 表 (つづき)

(4) BLOCK 4 ノードの記述

a. Card 1. FORMAT(5I5, 5X, 3F10.0)

記号	カラム	内 容
NODE	1 ~ 5	ノード番号
NSEQ	5 ~ 10	追加するノードの数((NSEQ+1)個のノードが作成される)あるいは、DRADが負である時に、このノードのDRADとその前のノードのDRADとの差だけ増加したDRADを持つノードの追加されるノードの数
NADD	11 ~ 15	NSEQを用いて(NSEQ+1)個のノードを作成する時のノード番号 NODEに逐次加えられていく増分
NODMAT	16 ~ 20	そのノードが含まれている物質の物質番号
KS	21 ~ 25	ノードのタイプ。KSが0でない場合は特別なノードとなる。ただし、BLOCK 1のKSPECが負の時にのみ使用する。(体積が0のノードや表面のノードである必要はない。
DLONG	31 ~ 40	ノードの体積計算に用いられるパラメータ KD=1であれば、DLONG×DWIDE×DRAD×SCALE ³ がノードの体積となる。KD=2か、あるいは3の場合には体積の計算の前に、インプットしたDRADの値が、それぞれ、 $2\pi \times \text{DRAD}$ 、 $4\pi \times \text{DRAD}^2$ に置換えられる。 計算された体積が0の場合は、そのノードの体積として 10^{-24} がセットされる。
DWIDE	41 ~ 50	
DRAD	51 ~ 60	

(5) BLOCK 5 内部熱接触

a. Card 1. FORMAT(2I5, 3I3, I1, 6F10.0)

記号	カラム	内 容
NOD 1	1 ~ 5	接触するノードのそれぞれのノード番号
NOD 2	6 ~ 10	
NSEQ	11 ~ 13	追加する接触の数((NSEQ+1)個の接触が作成される)あるいは、DRADが負である時に、この接触のDRADとその前のDRADとの差だけ増加したDRADを持つ接触の追加の数。
NAD 1	14 ~ 16	NSEQを用いて(NSEQ+1)個の接触を作成する時のノード番号 NOD 1, NOD 2のそれぞれの増分。
NAD 2	17 ~ 19	
NZ	20	接触を追加していく時に、ノード番号の増分 NAD 1, NAD 2が 10^{NZ} 倍されてノード番号 NOD 1, NOD 2に逐次加えられていくことを示す。
DEL 1	21 ~ 30	NOD 1, NOD 2のそれぞれの節点から接触面までの熱伝導の通路の距離。(それぞれSCALE倍される)。HINT, RINTのいずれかを指定しているのであればDEL 1とDEL 2の両方が0であってはならない。
DEL 2	31 ~ 40	
DLONG	41 ~ 50	接触面の面積(伝熱面積)を計算する時に用いられるパラメータ。(面積 = DLONG×DRAD) KD=1であれば、伝熱面積はSCALE ² 倍される。
DRAD	51 ~ 60	

第4.4表 (つづき)

(BLOK 5 Card 1の続き)

記号	カラム	内 容
DRAD(続き)		KD=2,あるいは3の時は,面積計算の前に,DRADのインプットした値が,それぞれ, $2\pi \times \text{DRAD}$, $4\pi \times \text{DRAD}^2$ に置換えられる。
HINT	61~70	表面の膜,ガスのギャップ,あるいは接触抵抗などの効果を含めた,接触面間を横切る伝導,対流に対する熱伝達係数。(たとえば $\text{cal}/\text{sec}\cdot\text{cm}^2\cdot^\circ\text{C}$)。HINTを指定しなかった場合は,RINTが指定されなければ 10^{12} が,RINTが指定されていれば 10^{-24} がセットされる。
RINT	71~80	ノードの接触面についてのふく射の形態係数。 ブランク(71~80カラムの間に“.”がない)の場合はRINTには0がセットされる。負であれば,その絶対値が自然対流の指数として用いられる。

(6) BLOCK 6 表面の熱接触 (外部熱接触)

a. Card 1 FORMAT (6I5, 5F10.0)

記号	カラム	内 容
NODS	1~5	表面のノードのノード番号。NODSは体積が0のノードか,あるいは外表面に節点を持つノードにするべきである。
NODSB	6~10	外部温度(境界ノード)の番号
NSEQ	11~15	追加する接触の数((NSEQ+1)個の接解が作成される)あるいは,DRADが負である場合は,この接触のDRADとその前の接触のDRADとの差だけ増加しながら追加していく接触の追加の数。
NADS	16~20	} NSEQを用いて(NSEQ+1)個の接解を作成する時に,NODS,NODSB } のそれぞれに逐次加えられる番号の増分
NADSB	21~25	
LTABH	26~30	熱伝達率の表のポイントの数。一定値を与える場合は0,あるいはブランクのままとする。LTABH>0であれば対温度の表,LTABH<0であれば対時間の表であることを示す。
DLONG	31~40	} NODSの外表面の面積(外部温度との接触面積)の計算に用いるパラメ } ータ(面積=DLONG×DRAD)。 KD=1であれば計算された面積はSCALE ² 倍される。 KD=2,あるいは3であれば,面積を計算する前に,インプットしたDRADの値が,それぞれ $2\pi \times \text{DRAD}$, $4\pi \times \text{DRAD}^2$ に置換えられる。
DRAD	41~50	
HSURE	51~60	熱伝達率(一定の場合)(たとえば $\text{cal}/\text{sec}\cdot\text{cm}^2\cdot^\circ\text{C}$) 指定しない場合は,BLOCK 1のHONEがセットされる。
RSURE	61~70	ふく射の形態係数。指定しない場合はBLOCK 1のRONEがセットされる。
POWER	71~80	自然対流の指数。ブランクであれば(71~80 “.”がなければ)BLOCK 1のPONEがセットされる。

第 4.4 表 (つづき)

b. Card 2A, etc. FORMAT (8F10.0) 熱伝達率の表

(熱伝達率が一定(LTABH=0)である場合は不要)

記号	カラム	内 容
HSURT(1)	1 ~ 10	熱伝達率
TVARH(1)	11 ~ 20	HSURT(1)を与える時の温度(LTABH > 0の時), あるいは時間(LTABH < 0の時)
.....	LTABH の数だけ HSURT(N), TVARH(N) の組で記入する。(N=1 ~ LTABH) (1枚のカードに4点まで記入できる)。

(7) BLOCK 7 外部温度(境界ノード)

a. Card 1 FORMAT (2I5, 10X, 6F10.0)

記号	カラム	内 容
NODB	1 ~ 5	外部温度(境界ノード)の番号
LTABT	6 ~ 10	外部温度を時間との表で与える時のポイントの数。外部温度を時間に対してある周期でもって曲線的に変化するように与える場合はLTABT=100とする。 一定温度の場合はゼロか、ブランクのままとする。
TEMPB(1)	21 ~ 30	外部温度(LTABT=100の時は曲線的な変化の平均値)
TIMEB(1)	31 ~ 40	TEMPB(1)に対応する時間(LTABT=100の時は、曲線的な変化の周期)
TEMPB(2)	41 ~ 50	外部温度(LTABT=100の時は曲線的な変化の振幅)
TIMEB(2)	51 ~ 60	TEMPB(2)に対応する時間(LTABT=100の時は、曲線的な変化の位相差)
TEMPB(3)	61 ~ 70	外部温度
TIMEB(3)	71 ~ 80	TEMPB(3)に対応する時間

b. Card 2A FORMAT (8F10.0)

LTABT \neq 100でLTABT \geq 4である時に、TEMPB(N), TIMEB(N)の組で順に記入していく(N=4~LTABT)(1枚のカードに4組まで記入できる)。(LTABT=100であるか、あるいはLTABT \leq 3である時は不要である)。

(8) BLOCK 8 内部熱生成(熱生成の割合が一定でない場合)

a. Card 1. FORMAT (4I5, 6F10.0)

記号	カラム	内 容
NODG	1 ~ 5	熱生成しているノードのノード番号
NSEQ	6 ~ 10	追加するノードの数((NSEQ+1)個の熱生成しているノードが作成される)。
NADG	11 ~ 15	NSEQを用いて(NSEQ+1)個のノードを作成する時に逐次NODGに加算されていく増分

第 4.4 表 (つづき)

(BLOCK 8 Card 1 の続き)

記号	カラム	内 容
LTABG	16 ~ 20	熱生成の割合の表のポイントの数。LTABG > 0 であれば、対温度の表、LTABG < 0 であれば対時間の表であることを示す。時間に対して熱生成の割合が指数的に減衰していく状態を与えたい場合は LTABG に -1, 0, あるいは 1 を与えて、次の GT(1) と TVARG(1) を与えればよい。
GT (1)	21 ~ 30	単位体積当りの熱生成の割合 ($ LTABG \geq 2$ の時) あるいは、時間 0 (SUMTIM = 0.0) における単位体積当りの熱生成の割合 ($-1 \leq LTABG \leq 1$ の時) (単位はたとえば cal/scc-cm ³)
TVARG (1)	31 ~ 40	計算の始まりにおいて熱の初期振動を引起こすための追加の方法については BLOCK 9 の AA, 及び BB を参照のこと。 GT(1) に相当する温度 (LTABG > 0 の時), あるいは時間 (LTABG < 0 の時) ($ LTABG \geq 2$ の場合) あるいは指数的な減衰の際の半減期 ($-1 \leq LTABG \leq 1$ の場合)
GT (2)	41 ~ 50	単位体積当りの熱生成の割合 } ($ LTABG \geq 2$ の時)
TVARG (2)	51 ~ 60	
GT (3)	61 ~ 70	単位体積当りの熱生成の割合 } ($ LTABG \geq 3$ の時)
TVARG (3)	71 ~ 80	

b. Card 2A, etc. FORMAT (8F10.0)

$|LTABG| \geq 4$ の時に、GT(N), TVARG(N) の組で順に記入していく。

(N = 4 ~ $|LTABG|$) (1 枚のカードに 4 組まで記入できる)

($|LTABG| \leq 3$ の場合は不要である)。

(9) BLOCK 9 初期値(温度, 反応濃度, および熱生成の割合)

Card 1. FORMAT (3I5, 5X, 4F10.0)

記号	カラム	内 容
NOTE	1 ~ 5	初期条件を与えるノードのノード番号
NSEQ	6 ~ 10	追加するノードの数 ((NSEQ + 1) 個のノードが作成される)
NADD	11 ~ 15	NSEQ を用いて (NSEQ + 1) 個のノードを作成していく時に逐次 NOTE に加算されていく増分
TT	21 ~ 30	初期温度。指定しなければ、BLOCK 1 の TONE がセットされる。
AA	31 ~ 40	第 1 反応成分の初期重量分率。指定しなければ、BLOCK 1 の ALONE がセットされる。Problem Name カードの 67 ~ 71 カラムに "A=BL9" と記入することにより、AA を TMELT と HMELT が指定されている物質のノードの中の低温相の初期濃度を与えるのに用いることもできる。あるいは、初期温度を TMELT 以下にして濃度を 1.0 としたり、初期温度を TMELT より大きく与えて濃度を 0.0 にすることもできる。 AA か、あるいは BB (後述) が負の値で与えられて、そのノードが同じ反応物を含むのであれば、最初の時間ステップの計算においては濃度

第4.4表 (つづき)

(BLOCK 9 Card 1の続き)

記号	カラム	内 容
AA (続き)		が0.0にセットされ、反応熱が顕熱に変換される。反応はそれ以上起こらない。その結果の温度の変化は、その物質の比熱における変化が、それに伴う温度差に対して小さければ正確である。温度は反応熱が負であれば増加し、反応熱が正であれば減少する。
BB	41~50	第2反応成分の初期重量分率。指定しなければ、BLOCK 1のBONEがセットされる。 BBは上述のAAと同様に負の値を与えることもできる。
GG	51~60	熱生成の割合(たとえば cal/sec-cm ³)もし指定しなければBLOCK 1のGONEがセットされる。 BLOCK 8でこのノードに対してGT対TVARGを与えていても影響は受けない。

(10) BLOCK 10 流れの接続

a. Card 1. FORMAT(6I5, 3F10.0)

記号	カラム	内 容
NODF 1	1~5	上流側ノードのノード番号
NODF 2	6~10	下流側ノードのノード番号。体積が0のノードであってはならない。
NSEQ	11~15	追加する流れの接続の数((NSEQ+1)個の接続が作成される)。
NADF 1	16~20	} NSEQを用いて(NSEQ+1)個の接続を作成していく時に逐次NODF 1, NODF 2に加算されているそれぞれの増分
NADF 2	21~25	
LTABFL	26~30	流量の割合を表で与える時のポイントの数。一定値とする場合は0, あるいはブランクのままとする。LTABFL > 0であれば対温度, LTABFL < 0であれば対時間であることを示す。
FLOWN	31~40	流量の割合(一定の場合)(たとえば g/sec)
DELF 1	41~50	} 接続面までのNODF 1, NODF 2のそれぞれの節点からの流路の距離。 DELF 2は0であってはならない。
DELF 2	51~60	

b. Card 2 A, etc. FORMAT(8F10.0) 流量割合の表

(流量割合が一定(LTABFL = 0)である場合は不要)

記号	カラム	内 容
FLOWT (1)	1~10	流量割合
TVARFL (1)	11~20	FLOWT (1)を与える時の温度(LTABFL > 0の時), あるいは時間(LTABFL < 0の時)
.....	LTABFL の数だけ順にFLOWT(N), TVARFL(N)の組で入力していく(N=1~ LTABFL) (1枚のカードで4点まで入力できる)

第4.4表 (つづき)

(1) BLOCK 11 作図のコントロール, 作図するノード

a. Card 1. FORMAT(4I5, 6F10.0)コントロール

記号	カラム	内 容
JPIC	1 ~ 5	1回目, 2回目, 及び最終回の時間ステップのアウトプットに加えて, 作図のためのデータを作成する時間ステップの回数の間隔。アウトプットはまた TIMEP でもコントロールされる。負符号をつければ, 温度対時間のグラフに加えて, 温度対ノードのグラフを得ることができる。JPICが0, あるいはブランクの場合に NODEP(N)(後述)に記入がなければ作図は行なわない。
LOGR	6 ~ 10	} それぞれ, グラフ上のノードの位置, 温度, 時間の軸の目盛のとり方のコントロールである。 } 正の値であれば対数目盛, 0, あるいはブランクの場合は等間隔目盛がとられる。負の値にすると, 対数目盛と等間隔目盛の両方のグラフが得られる。 } ノードの位置対時間のグラフ上に等温線を作図したい場合は LOG-TIM > 100と指定する。
LOGTEM	11 ~ 15	
LOGTIM	16 ~ 20	
FRAD 1	21 ~ 30	} それぞれ, ノードの位置, 温度, および時間を, $x' = f_1 + f_2 x$ という一次変換によって, 実際の値から, グラフ上の値に変換する時の係数。FRAD 2, FTEMP 2, FTIME 2 は0かブランクであれば, 1.0がセットされる。
FRAD 2	31 ~ 40	
FTEMP 1	41 ~ 50	
FTEMP 2	51 ~ 60	
FTIME 1	61 ~ 70	
FTIME 2	71 ~ 80	

b. Card 2. FORMAT(16I5) 作図するノード

記号	カラム	内 容
NODEP (1)	1 ~ 5	温度対時間のグラフ, ノードの位置対時間のグラフ上の等温線を作図するノードのノード番号。温度対ノードの位置のグラフはすべてのノードについて作図される。
.....	NODEP(N)を順に記入していく ($1 \leq N \leq 16$)

第 4.4 表 (つづき)

(2) BLOCK 12 他のノードの温度に依存する物性を持つノード

a. Card 1. FORMAT(7I5)

記号	カラム	内 容
NODP 1	1 ~ 5	それぞれ、温度依存の物性が用いられるノード、及びその温度が物性に影響を与えるノードのノード番号 すなわち $P(NOD 1) = P[T(NOD 2)]$ となる。
NODP 2	6 ~ 10	
NPROP	11 ~ 15	
NSEQ	16 ~ 20	追加する NODP 1, NODP 2, NPROP の組の数 (NSEQ+1)個の組が作成される。
NADP 1	21 ~ 25	(NSEQ+1)個のノード番号と物性番号 NODP 1, NODP 2, NPROP の組を作成していく時に逐次それぞれの番号に加算されていく増分
NADP 2	26 ~ 30	
NADPR	31 ~ 35	

BLOCK 1 以外のデータブロックはすべてどのような順序になってもよく、BLOCK 11 の他は、それぞれのデータブロックについて、ブロックのタイプ MOD が A, あるいは B の任意の数のデータブロックを用いることができる。ある特定のブロックに対して、制限よりも多い項目が記述されている場合は、診断メッセージがプリントされ、残りの項目は順次メモリー内の利用可能な位置にたくわえられ、KWIT がセットされる。また、表の長さが制限を越えている場合は、そのデータのたくわえられる位置は保証されず、KWIT には 12 がセットされる。このような場合は、いずれの場合も、その問題のインプットデータの処理および初期設定の終了した段階でその問題が終了する。

ブロックのタイプ MOD が B のデータブロックは、MOD が A のデータブロックと同じ目的を果たすことができる(すべての項目を新しい参照番号で与える)が、その場合は、以前に読込まれているブロックの中のすべての項目を探す時間だけ無駄になる。

Problem Name カードの K が 2, 3, あるいは 4 のいずれかである連続問題においては、8 カラムがブランクの Block Number カードとブランクカードだけから成る。データブロックを組込むことによって、データブロックを(新しいデータと置換えることなしに)、メモリー内でクリアすることができる。ただし、このオプションは BLOCK 1 と 11 のデータブロックには適用できない。BLOCK 11 に適用する場合は 2 枚のブランクカードが必要である。

あるデータブロック内で、同一項目が一度以上記述されている場合には、BLOCK 5, 6, 10 ではその効果が追加され得るが、BLOCK 2, 3, 4, 7, 8, 9, 及び 12 では、最後に記述した項目だけが用いられる。

(3) データ終了カード

各ケースのインプットデータの最後は 1 カラム～5 カラムが " ENDED ", 6 カラム～7 カラムが "-1" か、あるいは "-2" である Data End カードでなければならない。(オプション "-1", "-2" は、実行が中断した場合のためのものであるが、現在は使用していない)。

BLOCK 1 のデータの中の NPUNCH を 1 にすると、問題の終了時に、BLOCK 9 のインプット形式に従って、各ノードの温度、反応濃度、内部熱生成の最終値がパンチアウトされるので、さらに進んだ時間の計算をする時の初期値として、パンチアウトされたデータブロックを組込むこともできる。

第 4.5 表には、TRUMP 3 の許容制限値を示す。表のとおり、現在、3 つのバージョンが用意されている。

第4.5表 許容制限値

記号	説明	Data BLOCK	TRUMP3 (V.1)	TRUMP3 (V.2)	TRUMP3 (V.3)
M 2	物質の総数	2	40	40	40
M 3	反応物質の総数	3	5	5	5
M 4	ノードの総数	4, 9	1,000	1,500	2,000
M 5	内部熱接触の総数	5	3,000	4,500	6,000
M 6	外部熱接触の総数	6	500	500	1,000
M 7	境界ノード（外部温度）の総数	7	50	50	50
M 8	内部熱生成ノードの総数	8	1,000	1,500	2,000
M 9	表のポイント数の総数	2, 3, 6, 7, 8, 10	16	16	16
M 10	流れの接続の総数	10	100	100	1,000
M 11	プロット図のノードの総数	11	0	0	0
M 12	他のノードの温度に依存するノードの総数	12	500	500	1,000
	計算機CORE容量		1.524KB	1.964KB	3.068KB

4.2 TRUMP 3 の出力形式

4.2.1 出力データ

いくつかのオプションにより、プリントアウトする量や形式をコントロールすることができる。また外部記憶装置(磁気ディスク、磁気テープなど)を指定してアウトプットすることもできる。

最初にインプットデータ (ノードの体積、接触面積、表関数データの傾きなどのいくつかの計算値や、インプットエラーのある場合のコメントなどを含む) がプリントされる。1回目、2回目、および最終回の時間ステップの計算結果は必ずアウトプットされる。その間については、時間ステップの回数の間隔 IPRINT あるいは/および時間の間隔 TIMEP のコントロールに従って、計算結果がアウトプットされる。プリントアウトされる量は KDATA のインプット値によりコントロールされる。それぞれのプリントアウトの最初には次の各項目が含まれる。

- (i) データデック番号(NPROB) および問題の名称(NAME)
 - (ii) 計算の開始時刻(CLOCKB) および日付(CLOCKA)
 - (iii) 総時間(SUMTIM), 時間ステップの回数(KCYC), プリントアウトの回数(NPRINT), およびその時の時間ステップ(DELT)
 - (iv) 時間ステップの下限および上限のカウンター(MF, MSS)
 - (v) 問題終了の指標(KWIT)
 - (vi) 特別なノードの熱収支計算の繰返し回数(NUTS)
 - (vii) 時間ステップの上限および下限(DELTMX, SMALL)
 - (viii) 温度変化量のコントロール(TVARY), 系内の最大温度変化量(DTEMP), および時間ステップのコントロール(DTMAXS)
 - (ix) 系の平均温度(TEMPAD), 総熱容量(CAPS, たとえば cal/°C), および総熱量(HEAT = TEMPAD × CAPS, たとえば cal)
 - (x) 系内に流入する熱流量(FLUX, たとえば cal), それによる平均の温度変化量(TEMPER = FLUX / CAPS), 平均の熱流入率(FX = FLUX / SUMTIM, たとえば cal/sec), およびそれによる温度変化率(TX = FX / CAPS, たとえば °C/sec)
 - (xi) 系の総熱発生率(GS, たとえば cal/sec), 総熱発生量(GENS = GS × SUMTIM, たとえば cal), およびそれによる平均の温度変化量(TEMPLE = GENS / CAPS)
- 温度データのプリントの後で、次の各項目がプリントアウトされる。
- (xii) 特別なノードの熱収支計算の繰返しの総数(NUTSUM), その時間ステップでの平均および最大の繰返し回数(NUTAVG, NUTX)
 - (xiii) 時間ステップの補挿係数(FOR)

(1) BLOCK 1 の KDATA が負である場合は、途中回のプリントアウトは、ノード番号と温度だけである。KDATA が負でなければ、次に示すデータがそれぞれのノード毎にプリントアウトされる；

- (i) 温度(T), その時間ステップでの温度変化量(DT), その次の時間ステップでの温度変化量の推定(DDT), 熱生成率(\bar{g} , たとえば cal/sec), 総熱量(W, たとえば cal), 問題の始まりからの熱量の変化(H, たとえば cal), および、内外部の熱接触によるそのノード内

への伝熱量(F, たとえば cal)

- (ii) 相変化あるいは／および化学反応を含んでいる問題の場合は、ゼロでない濃度を持ったノードに対して、次のデータがプリントアウトされる。

温度(T), 濃度の重量分率(A, B), その時間ステップでの濃度の変化量(DA, DB), およびその次の時間ステップでの濃度の変化量の推定(DDA, DDB)

- (2) それぞれの境界ノードに対して、次のデータが、各プリントアウト毎に、プリントアウトされる。

温度(TEMPB), 境界ノードから系内に入る熱流量(HEAT FLOW, たとえば cal), その時間までの平均熱流(AVG RATE, たとえば cal/sec), およびその時間ステップでの熱流(LAST RATE, たとえば cal/sec)

- (3) BLOCK 1 でノード(NUM)を指定している時は、そのノードのT, DDT, A, B, G, およびSUMTIM がすべての時間ステップについてプリントアウトされる。

1回目(KDATA=-9の時は除く), および最終回の時間ステップについて、またKDATAが正である時は、他の指定された時間ステップについて、さらに次のデータがプリントアウトされる;

- (i) 各物質毎に次のデータがプリントアウトされる。

総熱容量(CAPMS, たとえば cal/°C), 総熱量(WMS, たとえば cal), 平均温度(TMS = WMS / CAPMS), および相変化温度(TMELT), 相変化時の潜熱効果(HMELT, たとえば cal/g)

- (4) 各ノード毎に次のデータがプリントアウトされる。

物質番号(NODMAT), ノードのタイプ(NTYPE)^(注), 半径(RADIUS, BLOCK 4 における DRAD × SCALE), 体積(VOLS), 質量(HEFT), 熱容量(CAP, たとえば cal / °C), 熱伝導率(CON, たとえば cal / cm · sec · °C), 熱接触の総コンダクタンス(ZIP, たとえば cal / sec · °C), および時間定数(SLIM = CAP / ZIP, 前進差分方程式で使用する安定の時間ステップをコントロールする)。

(注) ノードのタイプは次のように表わされる。

NTYPE = 0 ……ふつうのノード

1 ……表面のノード

2 ……体積0のノード

3 ……KS = 1 の特別なノード

4 ……KSPEC = 0 の時, 特別なノードに変化

5 ……KSPEC = 1 の時, 特別なノードに変化

- (5) 化学反応を伴っている場合は、反応物質を含んでいるノード毎に次のデータがプリントアウトされる。

質量(HEFT), 反応熱(QA, QB, たとえば cal), 対数衝突頻度(ZA, ZB), および活性化エネルギー(EA, EB, たとえば cal / g · mol. °K)

- (6) 質量流れを伴っている場合は、流れの接続を持つノード毎に次のデータがプリントアウトされる。

流入速度 (FLINT, たとえば g/sec), 流出速度 (FLOUT, たとえば g/sec), 流入量 (FLIPS, たとえば g), 流出量 (FLOPS, たとえば g), ノードの質量 (HEFTS), 滞留時間の平均 (DFLOT = HEFTS / FLINT), および問題の始まり (TAU) からその時間 (SUMTIM) までの間の平均の流出入速度 (FX 2, FX 1)

- (7) また質量流れの接続毎に次のデータがプリントアウトされる。

質量速度 (FLOWN, たとえば g/sec), 流量 (FLAPS, たとえば g), 問題の始まり (TAU) からその時間 (SUMTIM) までの間の平均の質量速度 (FX, たとえば g/sec), 上流側ノードの加重係数 (DELF 1), および下流側ノードの加重係数 (DELF 2)。(DELF 1, DELF 2 はそれぞれインプットデータの DELF 1 と DELF 2 に対応し, 接続界面のエンタルピを求めるのに用いられる)

- (8) 内部熱接触毎に次のデータがプリントアウトされる。

伝熱面積 (AREA), 接触面のコンダクタンス (HINT, たとえば cal/cm²·sec·°C), 接触面のふく射の形態係数 (RINT), 総括熱コンダクタンス (TRAN, たとえば cal/sec·°C), NOD 2 から NOD 1 へ入る熱流の問題の始まりからの積分量 (FI, たとえば cal), その平均 (FX, たとえば cal/sec), およびその時間ステップでの NOD 2 から NOD 1 へ入る熱流 (たとえば cal/sec)

- (9) 外部熱接触毎に次のデータがプリントアウトされる。

面積 (AREAS), 熱伝達率 (HSURE, たとえば cal/sec·°C), 自然対流の場合の温度差に対する指数 (POWER), ふく射の形態係数 (RSURE), 接触の総括熱コンダクタンス (TRANS, たとえば cal/sec·°C), 境界ノード (NODSB) から表面のノード (NODS) へ伝わる熱流の問題の始まりからの積分量 (たとえば cal), その平均 (たとえば cal/sec), およびその時間ステップでの NODSB から NODS へ伝わる熱流 (たとえば cal/sec) (最後の三項についてはすべての外部熱接触の総和もプリントアウトされる)。

- (10) 計算の途中で, 特別なノードに関する熱収支の繰返しが許容最大回数を越えた時や時間ステップを減少させてさらに繰返さなければならない時は, いつでもその旨のメッセージがプリントアウトされ, さらに次のデータがプリントアウトされる。

時間ステップの回数 (KCYC), 収束しなかった時の時間ステップ (DELT), その時間ステップの計算を始めた時の問題時間 (SUMTIM), 収束計算がうまくいかなかったことを示す係数 (DTMAXS = 80.0 × TVARY) あるいは表関数で与えた値の変化率 (DTMAXS = %変化 × TVARY), およびその時の系内の最大温度変化 ΔT_{max} (DTEMP)

- (11) 最終回の時間ステップでは, さらに次のデータがそれぞれの問題毎にプリントアウトされる。

- (i) 系の持つ熱の問題の始まりからの積分量 (FINAL HEAT, たとえば cal), および系に伝わる熱流の問題の始まりからの積分量 (FINAL FLOW, たとえば cal)
 (ii) 問題の番号 (NPROB), 時間ステップの回数 (KCYC), 最終の時間 (SUMTIM), 問題終了の指標 (KWIT), および KWIT を説明する表

- (12) さらに, インプットデータにエラーのある場合, 前の問題のデータを用いている場合, 特別なノードに対する熱収支計算が収束しなかった場合, 時間ステップを減少してさらに計算を繰返す必要がある場合などに, その旨のメッセージがプリントアウトされる。

⑬ パンチアウトのオプション

ノードの温度、反応濃度、および一定の熱生成割合の、問題が終了した時の最終値を、BLOCK 9 のインプットデータ形式と同様の形式でパンチアウトすることができる。この場合はBLOCK 1 のNPUNCH に0以外の値を指定すればよい。このオプションにより、パンチアウトしたデータをオリジナルのインプットデータのBLOCK 9のデータと置換えて、次の問題の初期値として用いてさらに計算を進めることができる。

4.2.2 計算結果の評価

(1) 入力データエラーの診断

インプット値、プログラムがブランクデータに対して置換えた値、およびノードの体積、接触面積、物質を記述するデータなどのいくつかのインプット値から得られた値のすべてが、問題が始まるたびに書き出される。これらのデータを、意図した計算モデルと合っているか十分にチェックすべきである。

インプットデータのすべてが読み込まれる前に問題が終了してしまうのは、次のような場合である；Problem Name カードが抜けている時、BLOCK Number カードが抜けている時、データブロックの終わりにブランクカードがない時、Data End カードが抜けている時、表の長さが正しくない時、判読不能の文字がパンチされている時、カラムずれでパンチされている時、不適當な位置にカードがある時、指数部の値が大きすぎる時。このようなエラーは、通常、判読不能な文字、不確定な演算、オーバーフロー、あるいは不十分なデータの診断の原因となる。

インプットデータがすべて読み込まれても、1回目の時間ステップの計算の前に終了した場合は、プリントアウトされるKWITの値が5, 6, 9, 11, あるいは12となり、起こったエラーのタイプが示される。(表3.1を参照のこと) プログラムで発見されたインプットエラーのほとんどに対して診断ステートメントが書き出され、KWITの値は、生じたエラーの最後に対しての指標となる。

1回目の時間ステップの計算の後で問題が終了する場合は、第4.6表に示されているような理由のためか、インプットデータで不適當な指数があつてオーバーフローや不確定な演算のエラーのためであり、KWITには1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, あるいは10のいずれかが示される。

(2) 計算結果の解析

各問題に対して得られた数値データやプロット図のすべてを、その精度、堅実さ、确实性に関して十分にチェックすべきである。熱収支の精度は、系、各物質、各ノード、各境界ノード、各内部熱接触、および各外部熱接触のそれぞれに関してチェックすることができる。空間や時間の精度は、温度対位置や温度対時間のプロット図のなめらかさなどから調べられる。堅実さ、确实性については、その結果を同一の系に関する結果と比較するか、あるいは、経験や信頼できる判断、およびその系を支配している物理法則についての精通を基準にして予想される結果と比較するなどして調べられる。

熱収支における誤差は、次のようなことの結果として起こり得る；系内の最大の総温度変化に関連して、大きすぎるTVARYの値を用いること、細かすぎる区域に分割したために、計算に用いられる時間ステップに関連して、時間定数(SLIM)が非常に小さくなること(それにより繰返し計算の収束が遅くなったり、収束しなかったりする)、熱容量曲線がそれに厳密に従うのを許すよ

うな大きすぎる時間ステップと合わせて、強く温度に依存する熱容量を用いること。

物理的に非現実的な解がインプットした表の範囲外の温度で求めた温度に依存する量から、得られることもあり得る。このことは、表で与える時の温度範囲を、考えられる計算温度の範囲で与えたり、表の始点と終点の傾きを0で与えたりすることにより避けることができる。プログラムでは、0か負の熱伝導率に対しては 10^{-24} を、0か負のノードの総熱容量に対しては 10^{-36} を置換える。ただし、表面の熱伝達率と他の表で与えた量が負になった場合は、そのまま扱う。

(3) 追加の計算の必要条件

エラーを訂正するために次のような追加の計算が必要となる。(1)さらに細かく分割した系を用いて精度を向上する。(2)計算をコントロールする別の方法を使用する。(3)インプット値が不正確である時にその値の範囲を試行してその影響をみる。(4)モデルの単純化の効果をみるために他のモデルを試行する。多数の同様の計算を同一、あるいは同様の系に関して行う時は、計算のコントロールとノードに分割する時のその割合を注意深く選択することにより、必要な精度が最も少ない機械時間で得られるであろう。また、インプットデータを最適な編成にしたりすることなどの改善により、追加の計算に必要な労力を大きく減少させることができるであろう。

(4) 結果の一般化

計算された仕様問題と別の問題に適用できるようにしたり、他の同様の計算の結果との比較を簡単にするなどのために、結果を無次元化して表現したり、正規化した形で表現したりすることにより、多くの問題を一般化することができる。インプットデータを無次元化したり、正規化した形で(あるいはプロットする変数を適切な一次変換して)指定することにより無次元化した形、あるいは、正規化した形のグラフを作成することもできる。

温度あるいは温度差 T 、位置 x 、時間 t 、密度 ρ 、比熱 c 、熱伝導率 k 、基準長さ L 、基準温度あるいは基準温度差 T_0 、体積当りの熱生成割合 G 、単位面積当りの表面の熱流 F 、質量流量割合 M 、熱伝達率 h 、および総熱量 W を結合して、次のような無次元割合、およびそれらのいくつかの結合とすることができる。

$$T/T_0, x/L, kt/\rho cL^2, Gt/\rho cT_0, FL/kT_0, Mc/kL, hL/k, W/\rho cL^3T_0$$

通常、上記の初めの4グループを用いるか、他のグループとそれとの結合を用いて、縦軸と横軸としてグラフを作成する。適当なグループ、およびスケールを選ぶことにより、有効な分析の近似を、そのグループの大きい、あるいは小さい、あるいは中間の範囲に対して見つけ出すことができる。

4.2.3 問題の終了条件

(1) 種々の制限

問題の終了の条件としていくつかの条件があり、そのいくつか、あるいはすべてを用いることができる。最大の問題時間 t_{\max} (TIMAX) を指定することができる。もし t_{\max} は無視される。 t_{\max} が負であると、最初の時間ステップの計算だけで終了する。最高温度 T_{\max} (TMAX) を指定することもできる。これは無制御の化学分解を含む問題に最も有効である。もし指定しないか、あるいは T_{\min} と等しければ、 T_{\max} には 10^{12} がセットされる。最低温度 T_{\min} (TMIN) を指定することもできる。もし指定しないか、あるいは T_{\max} 以上であれば T_{\min} には -10^{12} がセットされ

る。 T_{\max} と T_{\min} の制限を与えて、系内の任意のノードに、時間のいくつかの指定の周期について個々に適用することができる。これは、体積0のノードをコントロールするノードに接続させ、また時間依存の熱伝達率を介して境界ノードに接続させることによって行われる。接触コンダクタンスと境界ノードの温度は、コントロールするノードが望みの制限温度に達する時に、体積0のノードの温度が T_{\min} あるいは T_{\max} に指定した温度に達するように選ばれる。

時間ステップの最大の計算回数 M_{cyc} (MCYC) を指定することができる。指定しなければ M_{cyc} は無視される。 M_{cyc} が負であれば、最初の時間ステップの計算だけで終了する。

1カラム～6カラムが“*CHECK”であるコントロールカードをProblem Nameカードの前に読み込ませて、最初の時間ステップの計算だけで終了させることができる。これによりインプットデータのエラーチェックを行なうことができる。

(2) 定常状態

どのような終了条件でも終了せず、境界条件あるいは熱生成の割合が時間によって変化しない場合には、通常は、最終的に定常になるように計算が進められる。次のような項目が満足されている時、その問題が定常状態に達したとして終了する。

- (i) インプットの変数 KSPEC が非負であること。
- (ii) 時間ステップの上限 DELTMX が DELTO と 10^{12} のいずれか小さい値と等しいこと。あるいは、DELTMX がいずれかより小さい時は、その時刻の時間ステップ DELT が DELTMX と等しいこと。
- (iii) 最大温度変化 DTMAX が、二つの連続した時間ステップに対して TVARY の 0.1% より小さいこと。
- (iv) 少なくとも時間ステップが10回は計算されていること。
- (v) 三つの連続した時間ステップに対して特別なノードとして再分類されるノードがないこと。
- (vi) 三つの連続した時間ステップに対して、繰返される時間ステップがないこと。

定常解のみが必要な時は、指定する平均温度変化 ΔT_{av} (TVARY) をかなり大きな値にしてもよい。ただし、系内の重要な熱の生成や吸収、あるいは熱伝達のプロセスが温度に強く依存している場合は、 ΔT_{av} はこれらのプロセスの量の変化を小さな割合におさえるぐらい十分に小さくすべきである。あるいはまた、 ΔT_{av} を大きくとりすぎると、定常条件を満足せずに、振動してしまうこともあり得る。 Δt_{max} (DELTO) を指定するのであれば、系の近似の時間定数10%より大きくすべきではない。

4.2.4 計算法のコントロール

熱流および質量流れによる熱伝達に関する差分方程式のタイプをコントロールして拡張することができる。時間ステップの安定限界に左右されない安定した差分方程式が、すべての体積0のノード、外部熱接触を持つノード、インプットデータのBLOCK 4で $KS \approx 0$ と指定されているノード、および計算中に特別なノードとして再分類された通常のノードなどの特別なノードのすべてに対して用いられる。BLOCK 1でKSPECに負の値を指定していると計算中に特別なノードとして通常のノードが再分類されることはない。KSPECを0とするか、あるいは指定しなければ、通常のノードはそれぞれ、最大温度変化がTVARYに近づくような時間ステップがそのノードの

安定限界にほぼ等しくなった時に、特別なノードとして再分類される。KSPECが正であれば、最初の時間ステップの計算の前に、すべての通常のノードが特別なノードに変わる。KSPEC=2の時は、熱伝達方程式中の初めと終りの温度勾配間の補間の量を決める補挿係数FORが1.0に固定され、単純な後退差分方程式が用いられる。KSPEC=3の時は補挿係数が0.5に固定され、中央差分方程式が用いられる。KSPEC=0のオプションはKSPEC=0の場合よりは不正確で効率が悪く、単純な前進、後退、あるいは中央差分方程式を用いている他のプログラムによって得られた結果とより直接的な比較をするだけのものである。

さらにまた、時間ステップの上限、下限(DELTO, SMALL)をBLOCK1で指定することもできる。これにより時間ステップを固定して計算することができるが、通常のノードに対して決まる安定限界よりSMALLが大きければSMALLは無視されるほとんどの問題においては、KS, KSPEC, SMALL, DELTOを指定しなくとも、最も効率的な計算をすることができる。

4.2.5 精度のコントロール

(1) 主要な誤差の形式

精度に影響を及ぼす主な誤差のタイプは次の6種である。

(i) モデル化の誤差

不正確な物質や反応の属性、不正確な初期条件や境界条件、実際の系をモデル化する時に用いる他の近似、および表関数から値を求める時の補間の誤差などから生ずる誤差。

(ii) 空間座標の誤差

系を連続な体積要素、すなわちノードに分割することにより生ずる誤差(空間に依存する変数の平均値を求めなければならなかったり、体積や面積、距離が不正確である場合など)。

(iii) 時間の誤差

非定常の計算において不連続な時間ステップを用いることから生ずる誤差(時間依存の変数の平均値を求めなければならない場合など)。

(iv) 温度の誤差

各時間のステップ内での各ノードに起こる不連続な温度変化から生ずる誤差(温度依存の変数の平均値を求めなければならない場合など)。

(v) 収束誤差

特別なノードとの接続に関する熱伝達の差分方程式を任意の収束条件で解く時の反復法を用いることから生ずる誤差。

(vi) 数値的な誤差

丸めの誤差の累積や次数の広くはなれた数値を加えたり、引いたりする時に起こる有効数字の桁落ちなどから生ずる誤差。

(2) モデル化の誤差

モデル化の誤差は通常、同一の系に対して別のモデルを用いた結果と比較することにより推算することができる。物質や反応の有効な属性、および境界条件についての仮定は、有効数字の2桁か3桁以上には影響を及ぼさない。誤差が累積する傾向のある所を除いて、空間座標や時間の誤差をモデル化の誤差以下にするような方法はない。

(3) 空間座標の誤差

空間座標の誤差は系を分割する時に、非線形の温度分布がノードの節点間の線形補間によって必要な精度内で合い、各ノードの体積についての温度依存の属性の変数が、節点に関して決められる平均値の必要な制限内になるように十分に細かく分割することによりコントロールされる。計算の前にこのことを行なうのは難しいであろうが、1回の計算が行なわれた後なら簡単である。系を単純化して計算して、系の別の部分の分割の必要な大きさを求めるのに役立てることもできる。

ほとんどの問題においては、時間定数(総熱容量を熱流及び質量流れのすべての接続の総括コンダクタンスで割った値)が、系内のノードの位置における温度変化が大きい総時間範囲の約1%であるようなノードに系を分割することにより、妥当な精度と機械時間の効率的な使用が得られる。これは、初めに温度の不連続さが与えられている境界や接続界面の近傍の点から、不連続な所から離れた点へと広く変化する。

(4) 時間の誤差

時間の誤差は通常、各時間ステップに対する望みの最大温度変化 TVARY を指定することにより間接的にコントロールされる。各時間ステップは、その前の値から固定した制限内で、最大温度変化が、平均で TVARY に、および TVARY の 2 倍は越えないように維持されるように合わせられる。

さらに、時間ステップは、時間および温度に依存する関数の変化を、各時間ステップ当たり平均で 1% から 2% を越えないようにおさえるような値に合わせられる。時間ステップはまた、熱収支における繰返しの数を平均で 40、及び 80 を越えないようにおさえるような値に合わせられる。温度変化、表関数の変化、あるいは繰返し回数がこれらの制限を越える場合の時間ステップの値は除かれ、時間ステップの大きさが半分になる。時間に依存する量は、初期時刻に、0.57~1.0 倍の時間ステップを加えて得られる、各時間ステップの中間の時刻において求められる。

また、時間ステップの大きさについての上限と下限、DELTO と SMALL を指定することもできる。上限は、時間の表関数において狭い範囲でピークが急にスキップするのを防いだり、特に高温依存のパラメータ、あるいはふく射熱伝達を含んだ問題において、定常状態に近づける時の繰返し過程の収束性が遅くなるのを避けたりするのに必要である。DELTO は不明の場合は重要な温度変化の起こる総時間のおよそ 0.1 から 1% の間の値を指定すべきである。下限は、プログラムで求められる下限(系内の通常のノードの最小安定限界の 1% の $\frac{2}{3}$ が通常とられる)で許される以上にきっちりと時間依存の関数を合わせようとするのに必要である。下限はまた、表形式のパラメータが正確にたどる必要のない大きな割合の変化を受ける時の非常に小さな時間ステップを避けるためにも用いられる。DELTO と SMALL は、別のプログラムとの比較、あるいは正確な時刻毎にアウトプットを得た方が都合の良い場合などのために、一定の時間ステップを用いるようにする時には同一の値を指定すればよい。

時間ステップについての勾配の計算された平均値が非常に不正確であるような場合の非常に大きな時間ステップを用いると不安定さが結果として起こり得る。TRUMP においては、熱伝達の場合には、別の点で不安定さを起こし得る熱流と質量流れの接触に対する安定した陰方程式を用いることにより、このような不安定さが起こることを自動的に防いでいる。しかしながら、質量

流れの反応濃度への効果は安定化されず、任意のノードに固有の時間ステップ(ノードの質量を流量割合で割った値)より大きい時間ステップが用いられると、反応濃度が不正確な値になり得る。これは、反応物質を含むノードに固有の時間ステップより小さい値を DELTO に与えてコントロールしなければならない。

(5) 温度の誤差

温度の誤差は、時間ステップの大きさを SMALL と DELTO の範囲内に抑える TVARY を指定することによりコントロールされる温度依存の量は、各時間ステップに関する平均温度から求められ、またその前の時間ステップで推算された温度変化率を、時間ステップの 0.57~1.0 の間の倍率で初期温度に加えることによって得られる。ほとんどの問題においては、系内で起こると予想される最大の温度変化のおよそ 0.1 から 1% の値かあるいは、温度間隔 TVARY 内で温度依存の量の変化が 1% 以内になるような値を TVARY に与えることにより、妥当な精度が得られ、機械時間が効率的に使用される。熱ふく射による感知できる程の熱流を含む問題の場合は、TVARY は 5 あるいは 10 °C 以上にすべきではない(結果が振動するおそれがある)。熱収支と計算された温度における累積誤差の平均は、非常に小さな時間ステップの同じノードの系の計算と比較して、およそ TVARY の 1% 程度の量であろう(個々の誤差は 10% を越えることはないであろう)。

(6) 収束の誤差

特別なノードとの接続に対する反復解における収束誤差は TVARY の指定値によりコントロールされる特別なノードとの接続のすべてに関する繰返しの 1 ステップからその次のステップまでの、総熱容量で割った総熱量の変化は、 $5 \times 10^{-5} \times \text{TVARY}$ より小さく、有限体積の特別なノードが繰返しの 1 ステップから次のステップまでに 10^{-4} TVARY より大きい計算された温度の変化を持つ時に繰返しが止まる。80 回の繰返しの制限に達した場合はその結果が無視され、時間ステップを半分にして繰返しを行う。TVARY は系内の最大の温度変化であると思われる値のおよそ 0.02% より小さくすべきではない。あるいはまた、数値誤差が、時間ステップのある大きさに対する収束の基準を満足するのを妨げることがあるかもしれない。

もし系が、空間と時間についての必要な精度に関連して非常に細かく分割されていると、繰返しの収束性が非常に遅くなったり、あるいは熱収束や温度が正しく求まらないで収束しなかったりすることもある。各繰返しにおいては、あるノードが直接接続しているノードに影響を及ぼされるだけで、二つのノードが正しく相互作用するのに必要な繰返し回数は、それらが直列に接続している数に比例する。このような反復法のために、二つのノード間の単一の熱接触が、そのノードの他の接続のコンダクタンスと比べて、大きな数値誤差を生ずる程、非常に高いコンダクタンスを持つならば、収束が遅くなったり、収束しなかったりする。たとえば、高い熱伝導率を持つ物質の二つの非常に薄い層が低い熱伝導率の物質をはさんで接触している時にこのようなことが起こる。それらが振動したり、あるいは、互いに平衡にある時は、低い伝導の物質内の温度変化が無視されて一定温度に保たれる。このことは、そのような対のノードを単一のノードに総括することにより避けることができる。すべての問題において、そのような接続がある場合には、アウトプットデータの中の接触コンダクタンス(記号が TRAN)の値をチェックすべきである。アウトプットデータの中のノードの時間定数(記号が SLIM)の値も、不必要に小さな時間定数が使われていないかどうかチェックすべきである。非常に多くの接続のノードが、計算に用いら

れる時間ステップより(10,あるいは100あるいはそれ以上の割合で)かなり小さな時間定数を持つ場合に特別なノードと熱収支の保存に関する繰返し計算の収束性が悪くなることがある。収束性は、より雑な区域に分けたり、TVARYにある程度小さな値を指定したり、あるいはDELTOにそのノードのグループの安定限界の平均の10倍から100倍以下で全体の系の時間定数の10%以下の値を指定したりすることなどにより改善されることもある。系の温度の特別な関数を得たり、あるいは、ある程度の熱勾配を表面において求まるようにする場合に正確な表面温度を決定したりすることに関して、絶対的に必要とする所でのみ体積が0のノードを使用すべきである。

(7) 数値的な誤差

丸めの誤差の累積から生ずる数値的な誤差は、モデル化の誤差、および空間座標、時間、および温度の誤差と比較することにおいては一般に重要ではない。一般に、そのような効果は各時間ステップに対するある量の最後の有効桁の1桁か2桁に及ぼされるだけである。

ほとんど等しく、逆の符号を持つ項、あるいはその大きさの次数が大きく異なる項の加算により生ずる誤差は、かなり問題となる。ノード特に体積0のノードについての熱流量と平均の熱流の割合は、このタイプの誤差の影響を受け得る。これらの誤差は一つのノードに対する熱流量をそのノードの熱接触のすべてを通る熱流量と比較することにより見つけることができる。これらは大きな割合の誤差を現わすことがあるが、非常に小さな絶対誤差となることもあり、この時は温度あるいは熱量の計算には影響を持たない。

特別なノードに対する反復法の収束性は、もしあるノードが次数の広く異なるコンダクタンスを持つ時に、このタイプの誤差に影響を受けることがある。極端に大きいコンダクタンスを避けるようにするためには、可能であれば、そのノード同志を一緒にしてしまうか、非常に薄い層か、ガス膜を接続界面のコンダクタンスとしてモデル化するなどの方法がある。

第4.6表に問題終了の指標KWITの値の意味が示されている。

第 4.6 表 問題終了の指標 KWIT の値

KWIT	問 題 終 了 の 原 因
1	問題の総時刻 SUMTIM が TIMAX に達した。(注 a)
2	温度が $(TMAX + 0.001 \cdot TVARY)$ を超えた。(注 a)
3	温度が $(TMIN - 0.001 \cdot TVARY)$ より低くなった。(注 a)
4	定常の条件が満足された。(注 a)
5	指定していない物質, 反応物質, ノード, あるいは境界ノードが参照された。(注 a)
6	"*CHECK" カードが Problem Name カードの前に読込まれていた。
7	時間ステップの計算回数が MCYC に達した。(注 a)
8	Problem Name カードを読込んでからの機械時間(CPU時間;秒)が MSEC に達した。(注 a)
9	物質データ(BLOCK 2), あるいはノードデータ(BLOCK 4)がインプットデータに全く含まれていなく, また前の問題からもデータが渡されなかった。(注 b)
10	特別なノードとの接続における温度変化に関する繰返し計算が $(2 \times SMALL)$ 以下の時間ステップを用いても 80 回でも収束しなかった。(注 b)
11	データブロックの項目の数が最大数を超えた。
12	時間, あるいは温度に関する表の長さが最大数を超えた。

(注 a) BLOCK 1 で指定する制限。

(注 b) それぞれのエラーに対して, 診断ステートメントが書き出される。

4.3 TRUMP 3 の入出力例

TRUMP 3 の入力データを第 4.7 表に示す。出力例は第 4.8 表に示されている。

第4.7表 TRUMP3 の入力例

PRINT INPUT CARD IMAGES W/CARD COLUMNS INDICATED EVERY 50TH CARD--

```

CARD
NO./COL. 1.....10.....20.....30.....40.....50.....60.....70.....80
 1 BOX YO6 TRUMPSAMP RUN
 2 FILE TRUMPSAMP. SAMPLE PROBLEMS IN UCRL-14754 REV. 3. VERSION 12/9/74.
 3 * HEAT REGENERATOR. SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT. 2/27/68.
 4 NOTE. UNITS ARE MKS-JOULE-KELVIN.
 5 NOTE. THIS PROBLEM DOES NOT USE GEN OR CHEM SUBROUTINES.
 6 * TEST PROBLEM #1 TRANSIENT
 7 BLOCK 1
 8 100
 9 3 .001 1.0
10
11 BLOCK 2 MATERIAL PROPERTIES
12 SLAB 50 58.0 0.09 22.0
13
14 BLOCK 4
15 1 50 2.500000 2.000000 1.000000
16 2 50 2.500000 2.000000 1.000000
17 3 50 2.500000 2.000000 1.000000
18 4 50 2.500000 2.000000 1.000000
19 5 50 2.500000 2.000000 1.000000
20 6 50 2.500000 2.000000 1.000000
21 7 50 2.500000 2.000000 1.000000
22 8 50 2.500000 2.000000 1.000000
23
24 BLOCK 5
25 1 2 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
26 2 3 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
27 3 4 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
28 1 5 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
29 2 6 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
30 5 6 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
31 3 7 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
32 6 7 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
33 4 8 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
34 7 8 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
35
36 BLOCK 6
37 4 1040 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
38 8 1041 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
39 1 1001 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
40 5 1002 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
41
42 BLOCK 7
43 1001 50.0
44 1002 50.0
45 1040 100.0
46 1041 100.0
47
48 BLOCK 9
49 1 1 50.0
50 5 1 50.0
51 4 1 100.0
52 8 1 100.0
53
54 ENDED-1
55 *SPLIT
NO./COL. 1.....10.....20.....30.....40.....50.....60.....70.....80
NEW TRUMP RUN. 12.56.58 82-06-14.
    
```

第4.8表 TRUMP3 の出力例

```

MACHINE TIME (FACOM M-200 1 82-06-14) = 0.0 SECONDS. TOT SECS = 0.0 .
BOX Y06 TRUMPSAMP RUN
FILE TRUMPSAMP. SAMPLE PROBLEMS IN UCRL-14754 REV. 3. VERSION 12/9/74.
INPUT UNIT = 5. OUTPUT UNIT = 6.

TRUMP OUTPUT DATA.      RUN STARTED 12.56.58 82-06-14. TRUMP AE74 3/5.      DATA DECK 1.

* HEAT REGENERATOR.  SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT.  2/27/68.      12.56.58 FACOM M-200 1 82-06-14
=====

NO DATA CARRYOVER FROM PRECEDING PROBLEM.
=====
NOTE.      UNITS ARE MKS-JOULE-KELVIN.
NOTE.      THIS PROBLEM DOES NOT USE GEN OR CHEM SUBROUTINES.
* TEST PROBLEM #1 TRANSIENT

DATA BLOCK 1

IPRINT  NUM KDATA KSPEC MCYC MSEC NPUNCH MDOT IRITE ITAPE TIMEP SCALE
100      0      0      0      0      0      0      0      0      0.0      1.00000D+00

KD  KT  DELTO  SMALL  TVARY  TAU  TIMAX  TMIN  TMAX
1  3  1.00000D-03  1.00000D-12  5.00000D+00  0.0      1.00000D+00  -1.00000D+12  1.00000D+12

KD KSYM  GEOM  TEMP UNITS  TBASE  SIGMA  SIGMA UNITS
1  1  1.00000D+00  FAHREN  4.59670D+02  1.71320D-09  BTU/H F **2  DEG R**4

TONE  ALONE  BONE  GONE  FONE  HONE  RONE  PONE
0.0   0.0   0.0   0.0   0.0   0.0   0.0   0.0
=====
DATA BLOCK 2
=====
MATERIAL PROPERTIES
=====
NAME MATL INDEX KA KB LTABC LTABK DENSITY CAPACITY CONDUCTIVITY TMELT HMELT
SLAB 50 1 0 0 0 5.8000D+01 9.0000D-02 2.2000D+01 0.0 0.0
=====
DATA BLOCK 4
=====
NODE INDEX MATL NTYPE DLONG DWIDTH DRAD VOLUME
1 1 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
2 2 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
3 3 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
4 4 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
5 5 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
6 6 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
7 7 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
8 8 50 0 2.50000D+00 2.00000D+00 1.00000D+00 5.00000D+00
=====
DATA BLOCK 5
=====

```

第4.8表 (つづき)

```

=====
NOD1 NOD2 INDEX DEL1 DEL2 DLONG DRAD DRAD HINT RINT AREA
1 2 1 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
2 3 2 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
3 4 3 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
1 5 4 1.0000D+00 1.0000D+00 2.5000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.5000D+00
2 6 5 1.0000D+00 1.0000D+00 2.5000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.5000D+00
5 6 6 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
3 7 7 1.0000D+00 1.0000D+00 2.5000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.5000D+00
6 7 8 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
4 8 9 1.0000D+00 1.0000D+00 2.5000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.5000D+00
7 8 10 1.2500D+00 1.2500D+00 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+12 0.0 2.0000D+00
=====
DATA BLOCK 6

```

```

=====
NODS NODSB INDEX LTABH LTABV POWER DLONG DRAD DRAD HINT RINT AREA
4 1040 1 0 0.0 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+08 0.0 2.0000D+00
8 1041 2 0 0.0 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+08 0.0 2.0000D+00
1 1001 3 0 0.0 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+08 0.0 2.0000D+00
5 1002 4 0 0.0 2.0000D+00 1.0000D+00 1.0000D+08 0.0 2.0000D+00
=====
DATA BLOCK 7

```

```

=====
NODB INDEX LTABT LTABV TEMPB SLOPE TIMEB
1001 1 0 5.0000000D+01 0.0
1002 2 0 5.0000000D+01 0.0
1040 3 0 1.0000000D+02 0.0
1041 4 0 1.0000000D+02 0.0
=====
DATA BLOCK 9

```

```

=====
NOTE INDEX TT AA BB GG
1 1 0.0 0.0 0.0 0.0
5 2 0.0 0.0 0.0 0.0
4 3 0.0 0.0 0.0 0.0
8 4 0.0 0.0 0.0 0.0
=====
DATA ENDED -1
=====

```

第4.8表 (つづき)

MACHINE TIME (FACOM M-200 1 82-06-14) = 0.59 SECONDS. TOT SECS = 0.59.

SUMMARY OF INPUT DATA

BLOCK NUMBER	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
KEY, TIMES READ	1	0	1001	1001	2001	1	1000	1001	1000	1000	1000
ITEM NAME	MAT	KEM	NODE	NOD1	NODS	NOD8	NODG	NOTE	MODF1	NODEP	NODP1
MAXIMUM SIZE	40	5	1000	3000	500	50	1000	1000	1000	100	500
UNMODIFIED SIZE	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FINAL SIZE	1	0	8	10	4	4	4	0	4	0	0

TABLES	CAPT	CONT	QT	ZT	ET	HSURT	TEMP8	GT	FLOWT	TOTAL
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

MAXIMUM ALLOWED TABLE LENGTH IS 16.

ARRAY STORAGE REQUIREMENTS.

NWREGD = (8 + 7*M9)*M2 + 28*M4 + 12*M5 + 3*M9 = 68848
 NWCHEM = 4*M2 + (6 + 9*M9)*M3 + 10*M4 (M3 NOT 0) = 10910
 NWGEN8 = 2*M4 + (3 + 3*M9)*M8 (M8 NOT 0) = 53000
 NWFLOW = 4*M4 + (9 + 3*M9)*M10 (M10 NOT 0) = 9700
 NWSURE = (12 + 3*M9)*M6 + (5+3*M9)*M7 (M6 NOT 0) = 32700
 NWPL0T = 4*M4 + 3*M11 + (1 + M11)*M1 (M11 NOT 0) = 0
 NWBL12 = 8*M4 + 5*M12 (M12 NOT 0) = 10500

TOTAL ADJUSTABLE ARRAY STORAGE = 185658

OTHER TOTALS NOSPEC NOGEN NORAD NORADS NMELT NREACT
 0 0 0 0 0 0

MATERIAL SUMMARY

NAME	MATL	NODES	DENSITY	CAPACITY	TOT VOL	TOT MASS	TOT CAP	TOT HEAT
SLAB	50	8	5.80000D+01	9.00000D-02	4.00000D+01	2.32000D+03	2.08800D+02	0.0
SYSTEM TOTAL	8			4.00000D+01	2.32000D+03	2.08800D+02	0.0	0.0

第4.8表 (つづき)

TRUMP OUTPUT DATA DATA DECK 1
 * HEAT REGENERATOR. SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT. 2/27/68. 12.56.58 82-06-14

EDIT NO. CYCLE MF MSS KWIT DELTMX SMALL TVARY DTEMP DTMAXS NUTS
 12 1000 3 992 0 1.00000D-03 1.00000D-05 5.00000D+00 2.81759D-02 0.0 0

TOTAL TIME TIME STEP HEAT FLOW HEAT FROM FLUX FLUX RATE TEMP RATE
 9.92290D-01 1.00000D-03 1.16502D+04 5.57960D+01 1.17407D+04 5.62295D+01

AVG TEMP HEAT CAPACITY HEAT CONTENT GEN RATE HEAT GEN TEMP FROM GEN
 5.57936D+01 2.08800D+02 1.16497D+04 0.0 0.0 0.0

NODE	TEMP	DT	DDT	GEN RATE	W	H	F
1	5.0000D+01	2.0807D-09	2.0791D-06	0.0	1.3050D+03	1.3050D+03	1.3051D+03
2	2.9372D+01	2.3645D-02	2.3626D+01	0.0	7.6661D+02	7.6661D+02	7.6661D+02
3	4.3803D+01	2.8176D-02	2.8154D+01	0.0	1.1432D+03	1.1432D+03	1.1432D+03
4	1.0000D+02	2.4795D-09	2.4775D-06	0.0	2.6100D+03	2.6100D+03	2.6102D+03
5	5.0000D+01	2.0807D-09	2.0791D-06	0.0	1.3050D+03	1.3050D+03	1.3051D+03
6	2.9372D+01	2.3645D-02	2.3626D+01	0.0	7.6661D+02	7.6661D+02	7.6661D+02
7	4.3803D+01	2.8176D-02	2.8154D+01	0.0	1.1432D+03	1.1432D+03	1.1432D+03
8	1.0000D+02	2.4795D-09	2.4775D-06	0.0	2.6100D+03	2.6100D+03	2.6102D+03

MATERIAL DATA

NAME MATL TOT CAP TOT HEAT AVG TEMP TMELT HMELT
 SLAB 50 2.08800D+02 1.16497D+04 5.57936D+01 0.0 0.0

BOUNDARY NODE DATA

NODB TEMPB HEAT FLOW AVG RATE LAST RATE
 1001 5.0000D+01 1.9062D+03 1.9210D+03 1.9062D+06
 1002 5.0000D+01 1.9062D+03 1.9210D+03 1.9062D+06
 1040 1.0000D+02 3.9189D+03 3.9493D+03 3.9189D+06
 1041 1.0000D+02 3.9189D+03 3.9493D+03 3.9189D+06

SYSTEM TOTAL 1.1650D+04 1.1741D+04 1.1650D+07

KCYC = 1000, ITERATIONS... TOTAL = 28, AVERAGE = 0, MAXIMUM = 10. FOR = 0.570

第4.8表 (つづき)

```

TRUMP OUTPUT DATA                                DATA DECK 1
* HEAT REGENERATOR. SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT. 2/27/68. 12.56.58 82-06-14
=====
EDIT NO. CYCLE MF MSS KMIT DELTMX SMALL TVARY DTEMP DTMAXS NUTS
13 1008 3 1000 1 1.00000D-03 1.00000D-05 5.00000D+00 1.98823D-02 0.0 0
=====
TOTAL TIME TIME STEP HEAT FLOW HEAT CONTENT GEN RATE GEN RATE W H F
1.00000D+00 7.10000D-04 1.16710D+04 5.58956D+01 1.16710D+04 5.58956D+01
=====
AVG TEMP HEAT CAPACITY HEAT CONTENT GEN RATE GEN RATE HEAT GEN TEMP FROM GEN
5.58932D+01 2.08800D+02 1.16705D+04 0.0 0.0 0.0
=====
NODE TEMP DT DDT TOT HEAT HINT RINT TRAN HEAT FLOW AVG RATE LAST RATE
1 5.0000D+01 1.4708D-09 2.0709D-06 0.0 0.0 1.3050D+03 1.3051D+03
2 2.9554D+01 1.6717D-02 2.3538D+01 0.0 0.0 7.7136D+02 7.7136D+02
3 4.4019D+01 1.9882D-02 2.7995D+01 0.0 0.0 1.489D+03 1.489D+03
4 1.0000D+02 1.7493D-09 2.4631D-06 0.0 0.0 2.6100D+03 2.6102D+03
5 5.0000D+01 1.4708D-09 2.0709D-06 0.0 0.0 1.3050D+03 1.3051D+03
6 2.9554D+01 1.6717D-02 2.3538D+01 0.0 0.0 7.7136D+02 7.7136D+02
7 4.4019D+01 1.9882D-02 2.7995D+01 0.0 0.0 1.489D+03 1.489D+03
8 1.0000D+02 1.7493D-09 2.4631D-06 0.0 0.0 2.6100D+03 2.6102D+03
=====
MATERIAL DATA
=====
NAME MATL TOT CAP TOT HEAT HINT RINT TRAN HEAT FLOW AVG RATE LAST RATE
SLAB 50 2.08800D+02 1.16705D+04 5.58932D+01 0.0 0.0 0.0
=====
INTERNAL CONNECTION DATA. CHECK CONDUCTANCES (TRAN).
LARGE DIFFERENCES BETWEEN CONNECTIONS MAY BE DUE TO POOR ZONING, AND MAY PRODUCE POOR RESULTS.
=====
NOD1 NOD2 AREA HINT RINT TRAN HEAT FLOW AVG RATE LAST RATE
1 2 2.0000D+00 1.0000D+12 0.0 1.7600D+01 -6.0392D+02 -3.5998D+02
2 3 2.0000D+00 1.0000D+12 0.0 1.7600D+01 1.6744D+02 2.5453D+02
3 4 2.0000D+00 1.0000D+12 0.0 1.7600D+01 1.3163D+03 9.8542D+02
4 5 2.5000D+00 1.0000D+12 0.0 2.7500D+01 0.0 0.0
5 6 2.5000D+00 1.0000D+12 0.0 2.7500D+01 0.0 0.0
6 7 2.0000D+00 1.0000D+12 0.0 1.7600D+01 -6.0392D+02 -3.5998D+02
7 8 2.0000D+00 1.0000D+12 0.0 1.7600D+01 1.6744D+02 2.5453D+02
8 8 2.5000D+00 1.0000D+12 0.0 2.7500D+01 0.0 0.0
=====

```

第4.8表 (つづき)

```

BOUNDARY NODE DATA
=====
NODS  TEMPB  HEAT FLOW  AVG RATE  LAST RATE
1001  5.0000D+01  1.9090D+03  1.9090D+03  2.6887D+06
1002  5.0000D+01  1.9090D+03  1.9090D+03  2.6887D+06
1040  1.0000D+02  3.9265D+03  3.9265D+03  5.5303D+06
1041  1.0000D+02  3.9265D+03  3.9265D+03  5.5303D+06
SYSTEM TOTAL  1.1671D+04  1.1671D+04  1.6438D+07
=====
EXTERNAL CONNECTION DATA
=====
NODS  NODSB  AREAS  HSURE  POWER  RSURE  TRANS  HEAT FLOW  AVG RATE  LAST RATE
4  1040  2.0000D+00  1.0000D+08  0.0  0.0  2.0000D+08  3.9265D+03  3.9265D+03  9.8542D+02
8  1041  2.0000D+00  1.0000D+08  0.0  0.0  2.0000D+08  3.9265D+03  3.9265D+03  9.8542D+02
1  1001  2.0000D+00  1.0000D+08  0.0  0.0  2.0000D+08  1.9090D+03  1.9090D+03  3.5998D+02
5  1002  2.0000D+00  1.0000D+08  0.0  0.0  2.0000D+08  1.9090D+03  1.9090D+03  3.5998D+02
=====
KCYC = 1008, ITERATIONS... TOTAL = 28, AVERAGE = 0, MAXIMUM = 10, FOR = 0.570
ENDED PROB 1. KCYC = 1008. KWIT = 1. SUMTIM = 1.0000D+00. 12.56.58 82-06-14
KWIT, 1=TIMAX, 2=TMAX, 3=TMIN, 4=S.S., 5=DATA, 6=CARD OR KEY, 7=MSEC, 8=MSEC, 9=BLKS 2,4,7,
10=CONVERGENCE FAILURE, 11=PROBLEM SIZE LIMIT, 12=TABLE LENGTH OR ORDER, 13=MAXCPU.
=====
MACHINE TIME (FACOM M-200 1 82-06-14) = 1.45 SECONDS. TOT SECS = 1.45.
END TRUMP RUN. SECONDS = 1.45.

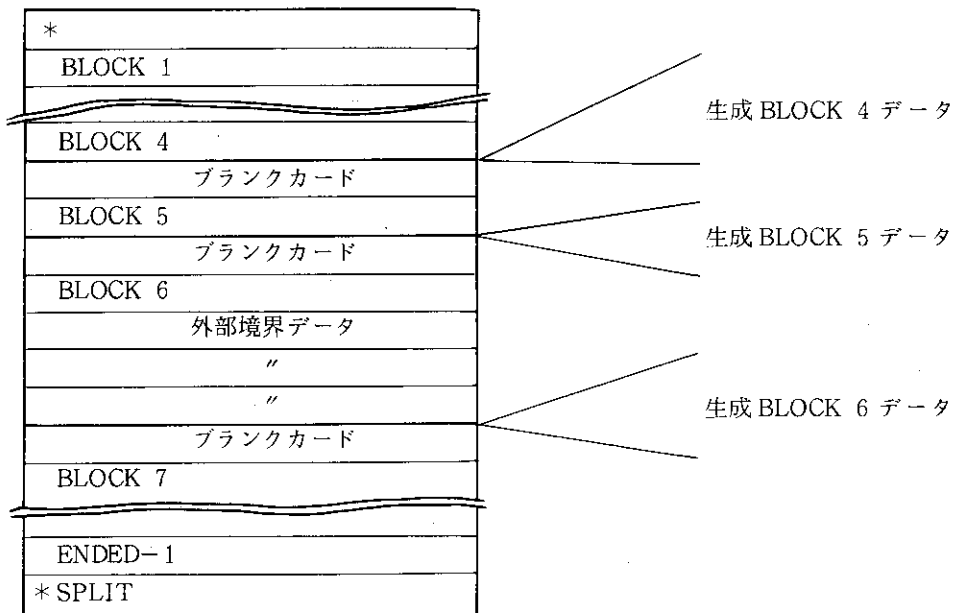
```


5. PRE-TRUMPの入力・出力形式

5.1 PRE-TRUMPの入力形式

PRE-TRUMPでは有限要素データからBLOCK 4, BLOCK 5, BLOCK 6のデータを生成するとともに, TRUMP 3の入力データと合せて全体のTRUMP 3のデータを作成する。ここでは有限要素データの入力形式について述べる。データ並びは第5.1表に示すように, TRUMP 3の入力データにBLOCK 4, 5, 6のデータが挿入される。これらの挿入位置はBLOCK 4, 5, 6の最後を示すblankカードの前である。すでにBLOCK 4, 5, 6のデータがあれば, その直後に, データが無い場合でも, BLOCK 4, 5, 6のBLOCK 番号カードとblankカードは生成データの挿入位置を示すために必ず存在しなければならない。

第5.1表 PRE-TRUMP の入力データ

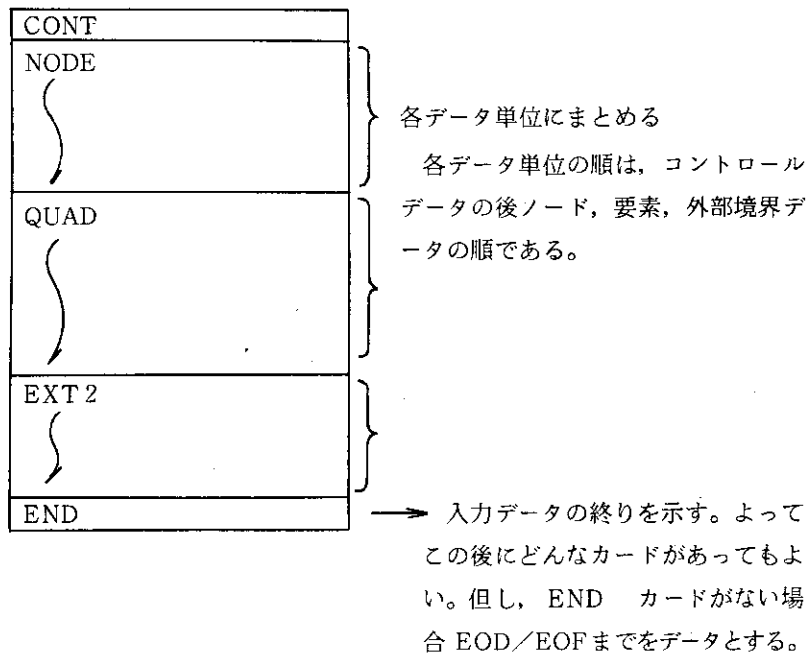


TRUMP BLOCK 4, 5, 6 データ生成のもととなるFEM様式の入力データは, コントロールデータ, ノードデータ, 要素データ, 外部境界データで構成される。

入力順は, 最初にコントロールデータを1枚のみ, 続いてノードデータ, 要素データ, 外部境界データと各データ単位にまとめて連続してセットする。

また入力データは, 有効データ終了カード以前までを有効なデータとして処理する。有効データ終了カードがない場合は, EOD/EOFまでを有効なデータとする。

ここで, 各データの座標系は統一されていなければならない。即ち, TRUMP入力データの座標系指標KDとコントロールデータ, 要素データの'QUAD'と'HEXA', 境界データの'EXT2'と'EXT3'は整合していなければならない。



座標系は、TRUMP 入力データ KD により軸対称か直交かが定まり、FEM 様式のデータにより 2 次元か 3 次元かが定まる。軸対称では 2 次元しかなく、3 次元とするとエラーとなる。

第 5.2 表は PRE-TRUMP の入力データの並びを生成データと並べて示す。PRE-TRUMP の FEM 様式データの入力形式を第 5.2 表と第 5.3 表に示す。

5.2 PRE-TRUMP の出力形式

PRE-TRUMP の出力は次の 3 項目から構成される。

- (1) 通常の TRUMP 3 の入力データ
- (2) FEM 様式の入力データ
- (3) TRUMP 3 の全入力データ

第 5.4 表は FEM 様式データから TRUMP 3 のデータが生成された場合のデータ並びを示す。

第 5.5 表は PRE-TRUMP のエラーメッセージの一覧表を示す。

5.3 PRE-TRUMP の入出力例

PRE-TRUMP の入力データを第 5.6 表と第 5.7 表に示す。第 5.6 表は通常の TRUMP 3 の入力データであり、第 5.7 表は FEM 様式の入力データである。第 5.8 表は PRE-TRUMP の出力例であり、TRUMP 3 の全入力が生成されていることがわかる。

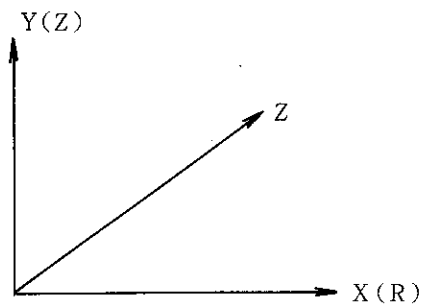
第 5.2 表 PRE-TRUMP の FEM 様式データの入力形式

(1) コントロールデータ FORMAT(A 4, 1X, I 5, E10.3, 13 A 4)

カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	CONT	
6 ~ 10	座標対称フラグ = 1 ; 2次元軸対称 = 0 ; その他(2次元板又は3次元)	KD
11 ~ 20	2次元板の時の板厚(省略時, 2次元軸対称= 1.0)	DTHICK
21 ~ 72	FEM様式データタイトル(52文字)	IFTTL

(2) ノードデータ FORMAT(A4, 1X, I 5, 3 E10.3)

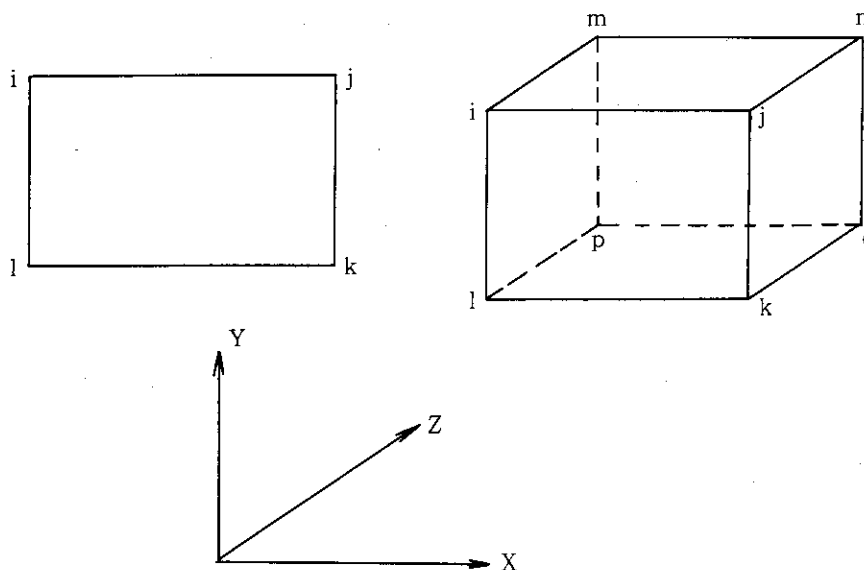
カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	NODE	
6 ~ 10	ノード番号 ≤ 2000 (MF)	INOD
11 ~ 20	ノードの座標 X, Y, Z (3次元)	CXYZ
21 ~ 30	X, Y (2次元板)	(I)
31 ~ 40	R, Z (2次元軸対称)	I = 1, 3



第 5.2 表 (つづき)

(3) 要素データ FORMAT (A4, 1X, 10I5)

カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	QUAD 2次元 4辺形 HEXA 3次元 6面体	
6 ~ 10	要素番号 ≤ 2000 (MF) (= TRUMPノード#)	IE (I) I = 1, 10
11 ~ 15	材料番号	
16 ~ 20	構成FEMノード番号	
21 ~ 25	" i, j, k, l (2次元4辺形)	
26 ~ 30	i, j, k, l, m, n, o, p (3次元6面体)	
31 ~ 35	(時計回りに入力する)	
36 ~ 40		
41 ~ 45		
46 ~ 50		
51 ~ 55		



第 5.2 表 (つづき)

(4) FEM 外部境界データ

1) 2次元の場合 FORMAT(A4, 1X, 4I5, 3E10.3)

カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	'EXT2'	
6 ~ 10	FEM要素番号	IETC(2)
11 ~ 15	構成FEMノード番号 } 辺を構成	IETC(4)
16 ~ 20		(5)
21 ~ 25	NODEB	(3)
26 ~ 35	HSURE	EHRP (I) I=1, 3
36 ~ 45	RSURE	
46 ~ 55	POWER	

2) 3次元の場合 FORMAT(A4, 1X, 6I5, 3E10.3)

カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	'EXT3'	
6 ~ 10	FEM要素番号	IETC(2)
11 ~ 15	構成FEMノード番号 } 面を構成	IETC(I) I=4, 7
16 ~ 20		
21 ~ 25		
26 ~ 30		
31 ~ 35	NODEB	IETC(3)
36 ~ 45	HSURE	EHRP(I) I=1, 3
46 ~ 55	RSURE	
56 ~ 65	POWER	

(5) 有効データ終了カード (オプション) FORMAT(A4)

カラム	内 容	記 号
1 ~ 4	'END' このカードはオプションであり、このカード以前に読み込んだデータをのみ有効とする。 このカードが存在しない場合はEODまで全カードを有効とする。	

第5.3表 入力FEM様式データ形式

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
1. コントローラデータ (A4, IX, I5, E10.3)																																																																																																			
CONT b ccccd cthick																																																																																																			
2. ノードデータ (A4, IX, I5, 3E10.3)																																																																																																			
NODE b IARD(4) CXYZ(1,*) CXYZ(2,*) CXYZ(3,*)																																																																																																			
3. 要素データ 4辺形(2次元)の場合 (A4, IX, I0I5)																																																																																																			
QUAD b IELI(4) IENT(4) IEND(4,*) IEND(5,*) IEND(6,*)																																																																																																			
6面体(3次元)の場合 (A4, IX, I0I5)																																																																																																			
HEXA b IELI(6) IENT(6) IEND(6,*) IEND(7,*) IEND(8,*) IEND(9,*) IEND(10,*)																																																																																																			

第5.3表 (つづき)

	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80
4. 境界データ														
2次元の場合 (A4, 1X, 4I5, 3E10.3)														
EIX2	IEIC(2,*)	IEIC(4,*)	IEIC(5,*)	NEDEB	HSURE	RSURE		POWER						
3次元の場合 (A4, 1X, 6I5, 3E10.3)														
EIX3	IEIC(2,*)	IEIC(4,*)	IEIC(6,*)	IEIC(8,*)	NEDEB	HSURE	RSURE	POWER						

第5.4表 生成データ

12	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80
1. BLOCK 4 $\bar{7}-9$ (15, 10X, 15, 10X, 3E10.3)														
NODE			NEPMT		PLZNG		DWIDE		PRAD					
2. BLOCK 5 $\bar{7}-9$ (215, 10X, 4E10.3)														
NOD1			PEL1		PEL2		PLZNG		PRAD					
3. BLOCK 6 $\bar{7}-9$ (215, 20X, 5E10.3)														
NOD5					PLZNG		PRAD		HSURE		RSURE		POWER	

第 5.5 表 TRUMP 準備プログラム エラーメッセージ一覧

No.	エラーメッセージ	意味
1.	ILLEGAL SYMMETRY TYPE INDICATOR	TRUMP BLOCK I で不当な対称タイプ(極座標)を指定した。又はコントロールデータで上記と矛盾する指定をした。
2.	$\left. \begin{array}{l} \text{NODE} \\ \text{NO. OF ELEMENT} \\ \text{EXTERNAL CONNECTION} \\ \text{OVER UPPER LIMIT} \end{array} \right\} \text{CARDS}$	<p>ノード要素外部境界 の入力データ数がプログラムの上限を越えた。</p> $\left(\begin{array}{l} \text{ノード} \leq 2,000 \\ \text{要素} \leq 2,000 \\ \text{外部境界} \leq 1,000 \end{array} \right)$
3.	SORT AREA INSUFFICIENT COVER PRIGRAM LIMIT	要素の数に対して、プログラム中のソート領域が不足した。(上記 2. 制限をプログラム修正した場合以外発生せず。)
4.	$\left. \begin{array}{l} \text{ELEMENT} \\ \text{NODE} \end{array} \right\} \text{NO. n, OUT OF RANGE}$	<p>要素ノード 番号 n は、使用可能範囲外である。 (要素, ノード番号 ≤ 2,000)</p>
5.	$\left. \begin{array}{l} \text{ELEMENT} \\ \text{NODE} \end{array} \right\} \text{NO. n, DUPLICATE}$	要素ノード 番号 n を重複して指定した。
6.	RECORD NO. n, ILLEGAL CARD $\left. \begin{array}{l} \text{IDENTIFICATION} \\ \text{FORMAT} \end{array} \right\}$	入力レコード n 番目の { データ識別指票 } に誤りがある。 <small>書式</small>
7.	ELEMENT NO. n, ILLEGAL NODE SEQUENCE	要素番号 n を構成するノードが不当である又はノード指定順序が誤っている。
8.	ELEMENT NO. n, REFERED UNDEFINED NODE NO. m	要素番号 n は、存在しないノード番号 m で構成しようとした。

第 5.5 表 (つづき)

No.	エラーメッセージ	意味
9.	ELEMENT NO. n TO m, ILLEGAL CONNECTION	要素番号 n と m の接触が不当である。 (要素が長方形(直方体)より大きく異っているか, 重複して接触している。)
10.	ELEMENT NO. n, ILLEGAL EXTERNAL CONNECTION DATA	要素番号 n の外部接続データが不当である。 (要素番号又は接触ノードを誤っている。)
11.	RECORD NO. n, ILLEGAL CARD SEQUENCE	入力レコード n 番目のデータ入力位置が誤っている。

第5.6表 PRE-TRUMP の入力例 (TRUMP データ)

*** TRUMP INPUT CARD IMAGE

--- 1

```

*-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8
BOX Y06 TRUMPSAMP RUN
FILE TRUMPSAMP. SAMPLE PROBLEMS IN UCRL-14754 REV. 3. VERSION 12/9/74.
* HEAT REGENERATOR. SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT. 2/27/68.
NOTE. UNITS ARE MKS-JOULE-KELVIN.
NOTE. THIS PROBLEM DOES NOT USE GEN OR CHEM SUBROUTINES.
* TEST PROBLEM #1 TRANSIENT
BLOCK 1
  100
  3 .001
  1.0
BLOCK 2 MATERIAL PROPERTIES
SLAB 50 58.0 0.09 22.0
BLOCK 4
BLOCK 5
BLOCK 6
BLOCK 7
  1001 50.0
  1002 50.0
  1040 100.0
  1041 100.0
BLOCK 9
  1 1 50.0
  5 1 50.0
  4 1 100.0
  8 1 100.0
ENDED-1
*SPLIT
*-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----8

```

REC NO. 1
 REC NO. 2
 REC NO. 3
 REC NO. 4
 REC NO. 5
 REC NO. 6
 REC NO. 7
 REC NO. 8
 REC NO. 9
 REC NO. 10
 REC NO. 11
 REC NO. 12
 REC NO. 13
 REC NO. 14
 REC NO. 15
 REC NO. 16
 REC NO. 17
 REC NO. 18
 REC NO. 19
 REC NO. 20
 REC NO. 21
 REC NO. 22
 REC NO. 23
 REC NO. 24
 REC NO. 25
 REC NO. 26
 REC NO. 27
 REC NO. 28
 REC NO. 29
 REC NO. 30
 REC NO. 31
 REC NO. 32
 REC NO. 33

TOTAL RECORDS 33

第5.7表 PRE-TRUMP の入力例 (FEM データ)

*** FEM FORMAT INPUT CARD IMAGE

-----1

CONT	0	1	2	3	4	5	6	7	8
NODE	1	0.0	4.000	***	SAMPLE	2D	***		
NODE	2	2.5	4.000						
NODE	3	5.0	4.000						
NODE	4	7.5	4.000						
NODE	5	10.0	4.000						
NODE	6	0.0	2.000						
NODE	7	2.5	2.000						
NODE	8	5.0	2.000						
NODE	9	7.5	2.000						
NODE	10	10.0	2.000						
NODE	11	0.0	0.000						
NODE	12	2.5	0.000						
NODE	13	5.0	0.000						
NODE	14	7.5	0.000						
NODE	15	10.0	0.000						
QUAD	1	50	1	2	7	6			
QUAD	2	50	2	3	8	7			
QUAD	3	50	3	4	9	8			
QUAD	4	50	4	5	10	9			
QUAD	5	50	6	7	12	11			
QUAD	6	50	7	8	13	12			
QUAD	7	50	8	9	14	13			
QUAD	8	50	9	10	15	14			
EXT2	4	5	10	1040	1.0E8				
EXT2	8	10	15	1041	1.0E8				
EXT2	1	1	6	1001	1.0E8				
EXT2	5	6	11	1002	1.0E8				

-----1

TOTAL RECORDS 28

第5.8表 PRE-TRUMP の出力例

```

BOX Y06 TRUMPSAMP RUN
FILE TRUMPSAMP. SAMPLE PROBLEMS IN UCRL-14754 REV. 3. VERSION 12/9/74.
* HEAT REGENERATOR. SAMPLE PROBLEM FOR TRUMP REPORT. 2/27/68.
NOTE. UNITS ARE MKS-JOULE-KELVIN.
NOTE. THIS PROBLEM DOES NOT USE GEN OR CHEM SUBROUTINES.
* TEST PROBLEM #1 TRANSIENT
BLOCK 1
  100
    3 .001 1.0

BLOCK 2 MATERIAL PROPERTIES
SLAB 50 58.0 0.09 22.0

BLOCK 4
  1 50 2.500000 2.000000 1.000000
  2 50 2.500000 2.000000 1.000000
  3 50 2.500000 2.000000 1.000000
  4 50 2.500000 2.000000 1.000000
  5 50 2.500000 2.000000 1.000000
  6 50 2.500000 2.000000 1.000000
  7 50 2.500000 2.000000 1.000000
  8 50 2.500000 2.000000 1.000000

BLOCK 5
  1 2 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
  2 3 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
  3 4 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
  1 5 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
  2 6 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
  5 6 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
  3 7 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
  6 7 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000
  4 8 1.000000 1.000000 2.500000 1.000000
  7 8 1.250000 1.250000 2.000000 1.000000

BLOCK 6
  4 1040 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
  8 1041 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
  1 1001 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0
  5 1002 2.000000 1.000000 0.100E+09 0.0 0.0

BLOCK 7
  1001 50.0
  1002 50.0
  1040 100.0
  1041 100.0

BLOCK 9
  1 1 50.0
  5 1 50.0
  4 1 100.0
  8 1 100.0

ENDED-1
*SPLIT
    
```

6. POST-TRUMPの入力・出力形式

6.1 POST - TRUMP の入力形式

POST-TRUMP には次の機能がある。

- (1) 有限要素の入力図の作成
- (2) 有限要素の節点図の作成
- (3) 有限要素の要素図の作成
- (4) 有限要素の要素一節点図の作成
- (5) TRUMP 計算結果の温度変化図の作成
- (6) TRUMP 計算結果の温度分布図の作成
- (7) 応力用解析データの作成

入力データのコントロールデータは次のものから構成されている。

- (i) TITLE データ
 タイトルの指定
- (ii) MPLOT データ
 有限要素形状図の作成
- (iii) TPLOT データ
 温度変化図の作成
- (iv) CONTOUR データ
 温度分布図の作成
- (v) STRESS データ
 応力解析用データの作成
- (vi) END データ
 データの終了

POST-TRUMP の入力形式を第 6.1 表に示す。

コントロールデータは何回でも繰り返し使用できる。

タイトルは任意の箇所で挿入できる。

(例)

TITLE	CASE (1)	NODE 1-5
{	TPLOT	
	0 5 1 2 3 4 5	
	0.0 100.0	

```

TITLE      CASE (1)    NODE 11- 13
{ TPLOT
  0  3  11  12  13
  0.0  100.0
TITLE      CASE (1)    T= 1.0
{ CONTOUR
  1.0
TITLE      CASE (1)    T= 10.0
{ CONTOUR
  10.0
TITLE      CASE (1)    FEM INPUT
{ MPLOT
  ブランク
END

```

6.2 POST - TRUMP の出力形式

POST - TRUMP の出力は出力を制御する入力データと形状データ、温度計算結果のデータならびに計算結果の図形表示および応力計算用のデータから構成される。

- (1) 印刷出力
 - (i) 出力制御のための入力データ
 - (ii) 形状データ (節点データ, 要素データ)
 - (iii) 温度データ
- (2) 図形表示
 - (i) 要素節点図
 - (ii) 節点図
 - (iii) 要素図
 - (iv) 形状図
 - (v) 温度変化図
 - (vi) 温度分布図
- (3) 応力計算用データ
 - (i) 形状データ (節点データ, 要素データ)
 - (ii) 温度データ

6.3 POST - TRUMP の入出力例

POST - TRUMP の入力データを第 6.2 表に示す。第 6.3 表は POST - TRUMP の出力例である。第 6.1(a)図～第 6.1(f)図の図形出力例である。

第 6.1 表 POST- TRUMP の入力データ

(1) TITLE データ

①枚のみ

変数名	カラム	内 容
KEY	1 ~ 5	TITLE を指定
ATITLE	7 ~ 46	プロット図等のタイトルに使用 (MAX. 40 文字)

TITLE データは任意の箇所で指定できる。

(2) MPlot データ

①枚目

KEY	1 ~ 5	MPlot を指定
-----	-------	-----------

②枚目

IMPND	1 ~ 5	節点番号の PLOT の有無 0 = PLOT する 1 = PLOT しない
IMPEL	6 ~ 10	要素番号の PLOT の有無 0 = PLOT する 1 = PLOT しない
IMP 3D	11 ~ 15	2次元 / 3次元の指定 0 = 2次元 1 = 3次元を2次元 (XY 図) 2 = 同 上 (XZ 図) 3 = 同 上 (YZ 図)
DXYZ	16 ~ 25	3次元を2次元にする時の指定値 XY図の時 Z値指定 YZ図の時 X値指定 XZ図の時 Y値指定

(3) TPLOT データ

①枚目

KEY	1 ~ 5	TPLOT を指定
-----	-------	-----------

第 6.1 表 (つづき)

②枚目

変数名	カラム	内 容
ITPID	1 ~ 5	要素/節点の指数 0 = 節点 1 = 要素
ITPN	6 ~ 10	1 図に PLOT する要素/節点の数 (MAX. 10個) PLOT する要素/節点の番号を指定
ITPND	11 ~ 15	
	16 ~ 20	
	21 ~ 25	
	56 ~ 60	

③枚目

TPTS	1 ~ 10	PLOTの開始時刻	両者共 0.0 の時は、計算時間 全てを PLOT する
TPTE	11 ~ 20	PLOTの終了時刻	
TPXMN	21 ~ 30	時間軸の開始値	両者共 0.0 の時プログラム内 でラウンドして決める
TPXMX	31 ~ 40	時間軸の終了値	
TPYMN	41 ~ 50	温度軸の最小値	両者共 0.0 の時プログラム内 で決定する
TPYMX	51 ~ 60	温度軸の最大値	

(4) CONTOUR データ

①枚目

KEY	1 ~ 7	CONTOUR を指定
-----	-------	-------------

②枚目

COTIME	1 ~ 10	温度分布図の時刻を指定 計算時刻と一致しない時は、指定時刻より大きい最小の計算時刻が選択される。
ICOL	11 ~ 15	温度分布図の等温度の数 無指定の時 10 本
ICO3D	16 ~ 20	2次元/3次元の区別 0 = 2次元 1 = 3次元 (XY) 2 = " (YZ) 3 = " (XZ)
ICOMEN	20 ~ 25	3次元の時、PLOT する面の数 2次元の時不要

第 6.1 表 (つづき)

③枚目以降 (ICOMEN の枚数だけ必要)

変 数 名	カ ラ ム	内 容
ICOEL	1 ~ 5	要素番号 (TRUMP ノード数番号) } FEM ノード番号を指定 } 各面毎に 4 ノード指定
ICOND	6 ~ 10	
	11 ~ 15	
	16 ~ 20	
	21 ~ 25	

(5) STRESS データ

KEY	1 ~ 6	STRESS を指定 応力解析データを作成する。
-----	-------	-----------------------------

(6) END データ

KEY	1 ~ 3	END を指定 処理の終了を示す
-----	-------	---------------------

第6.2表 POST-TRUMP の入力例

```

*****
* INPUT DATA LIST *
* *****
1.....*.....2.....*.....3.....*.....4.....*.....5.....*.....6.....*.....7.....*.....8
TITLE TRUMPJ TEST (TEST1)
MPLOT
MPLOT 1
MPLOT
MPLOT 1
MPLOT 1
TPLOT 4 1 2 3 4
CONTOUR
0.9
STRESS
END
.....*.....1.....*.....2.....*.....3.....*.....4.....*.....5.....*.....6.....*.....7.....*.....8

*** INPUT DATA END ***

```

第6.3表 POST-TRUMP の出力例

ID23= 2 NUMID= 15 NUMEL= 8 MAXND= 15 MAXEL= 8

** CXYZ ***

1	0.0	4.000	0.0
2	2.500	4.000	0.0
3	5.000	4.000	0.0
4	7.500	4.000	0.0
5	10.000	4.000	0.0
6	0.0	2.000	0.0
7	2.500	2.000	0.0
8	5.000	2.000	0.0
9	7.500	2.000	0.0
10	10.000	2.000	0.0
11	0.0	0.0	0.0
12	2.500	0.0	0.0
13	5.000	0.0	0.0
14	7.500	0.0	0.0
15	10.000	0.0	0.0

** IENODE **

1	1	2	7	6	0	0	0	0
2	2	3	8	7	0	0	0	0
3	3	4	9	8	0	0	0	0
4	4	5	10	9	0	0	0	0
5	6	7	12	11	0	0	0	0
6	7	8	13	12	0	0	0	0
7	8	9	14	13	0	0	0	0
8	9	10	15	14	0	0	0	0

KEY ID =MPLO

*** SUB (FEMND) SUMTIM= 0.0000
FEM NODE NO. TEMP. X Y Z

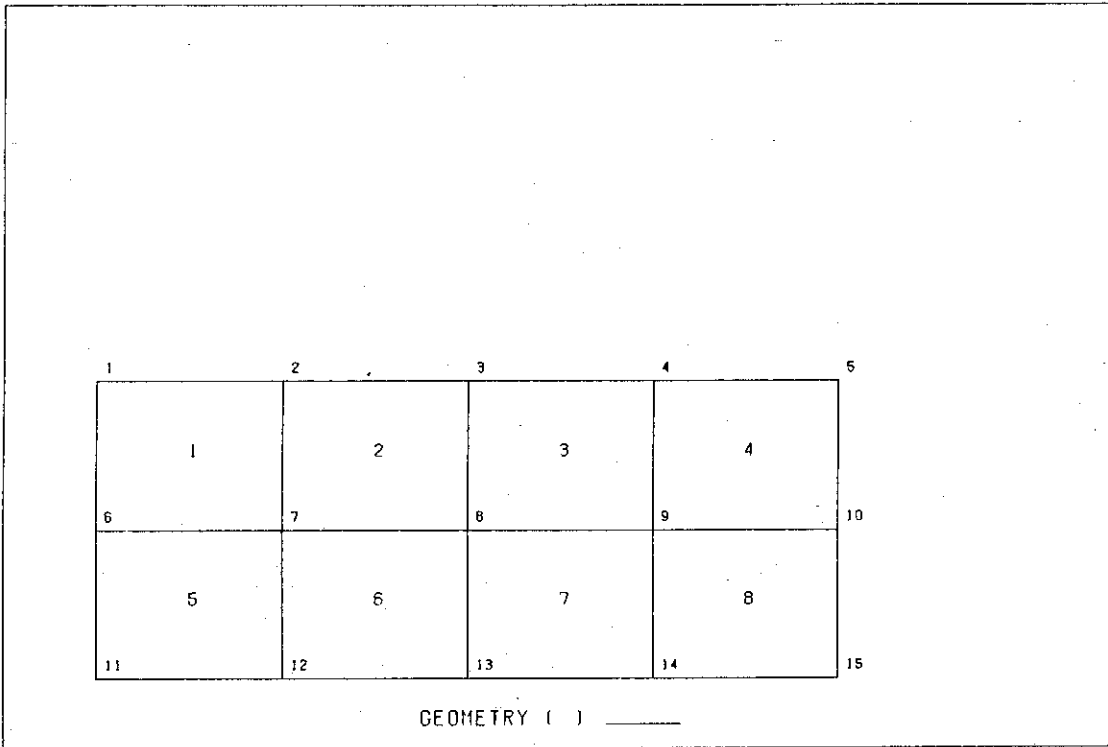
1	85.7557	0.0	4.0000	0.0
2	42.8780	2.5000	4.0000	0.0
3	0.0005	5.0000	4.0000	0.0
4	85.7560	7.5000	4.0000	0.0
5	171.5113	10.0000	4.0000	0.0
6	85.7557	0.0	2.0000	0.0
7	42.8780	2.5000	2.0000	0.0
8	0.0005	5.0000	2.0000	0.0
9	85.7560	7.5000	2.0000	0.0
10	171.5112	10.0000	2.0000	0.0
11	85.7557	0.0	0.0	0.0
12	42.8780	2.5000	0.0	0.0
13	0.0005	5.0000	0.0	0.0
14	85.7560	7.5000	0.0	0.0
15	171.5113	10.0000	0.0	0.0

第6.3表 (つづき)

*** SUB (FEMND)		SUMTIM= 0.4923		
FEM NODE NO.	TEMP.	X	Y	Z
1	50.0000	0.0	4.0000	0.0
2	32.9644	2.5000	4.0000	0.0
3	21.1857	5.0000	4.0000	0.0
4	63.2214	7.5000	4.0000	0.0
5	100.0000	10.0000	4.0000	0.0
6	50.0000	0.0	2.0000	0.0
7	32.9644	2.5000	2.0000	0.0
8	21.1857	5.0000	2.0000	0.0
9	63.2214	7.5000	2.0000	0.0
10	100.0000	10.0000	2.0000	0.0
11	50.0000	0.0	0.0	0.0
12	32.9644	2.5000	0.0	0.0
13	21.1857	5.0000	0.0	0.0
14	63.2214	7.5000	0.0	0.0
15	100.0000	10.0000	0.0	0.0

*** SUB (FEMND)		SUMTIM= 1.0000		
FEM NODE NO.	TEMP.	X	Y	Z
1	50.0000	0.0	4.0000	0.0
2	39.7769	2.5000	4.0000	0.0
3	36.7864	5.0000	4.0000	0.0
4	72.0095	7.5000	4.0000	0.0
5	100.0000	10.0000	4.0000	0.0
6	50.0000	0.0	2.0000	0.0
7	39.7769	2.5000	2.0000	0.0
8	36.7864	5.0000	2.0000	0.0
9	72.0095	7.5000	2.0000	0.0
10	100.0000	10.0000	2.0000	0.0
11	50.0000	0.0	0.0	0.0
12	39.7769	2.5000	0.0	0.0
13	36.7864	5.0000	0.0	0.0
14	72.0095	7.5000	0.0	0.0
15	100.0000	10.0000	0.0	0.0

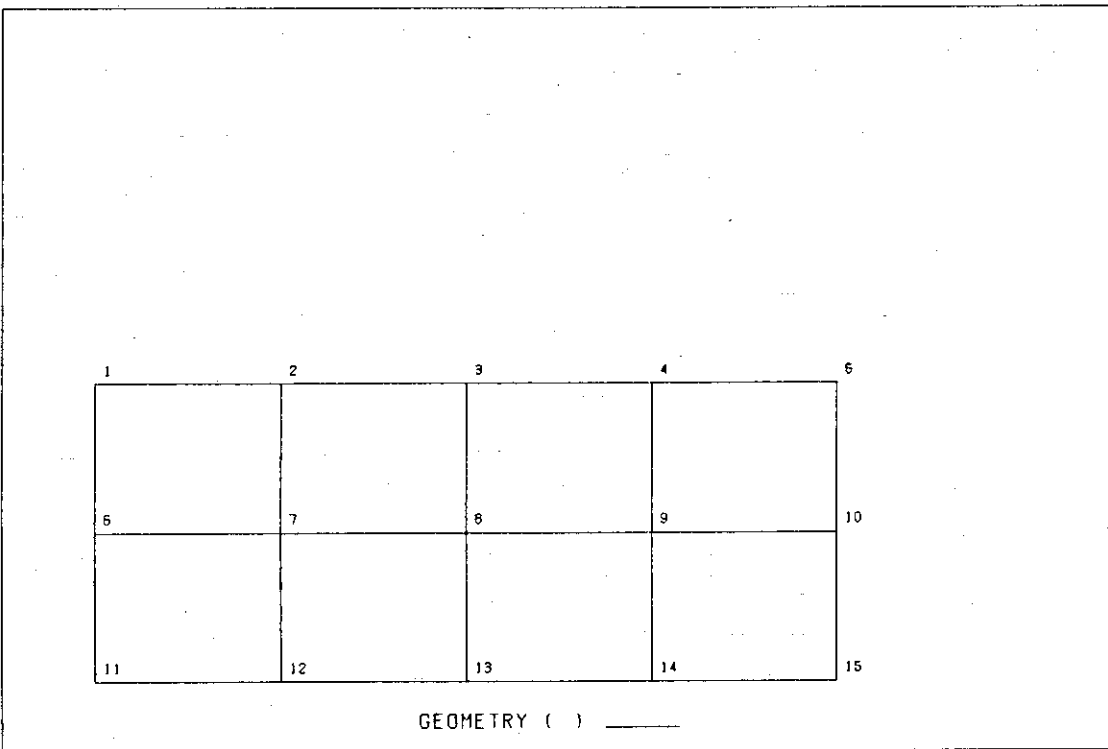
KEY ID =END



ELEMENT - NODE

TRUMPJ TEST (TEST1)

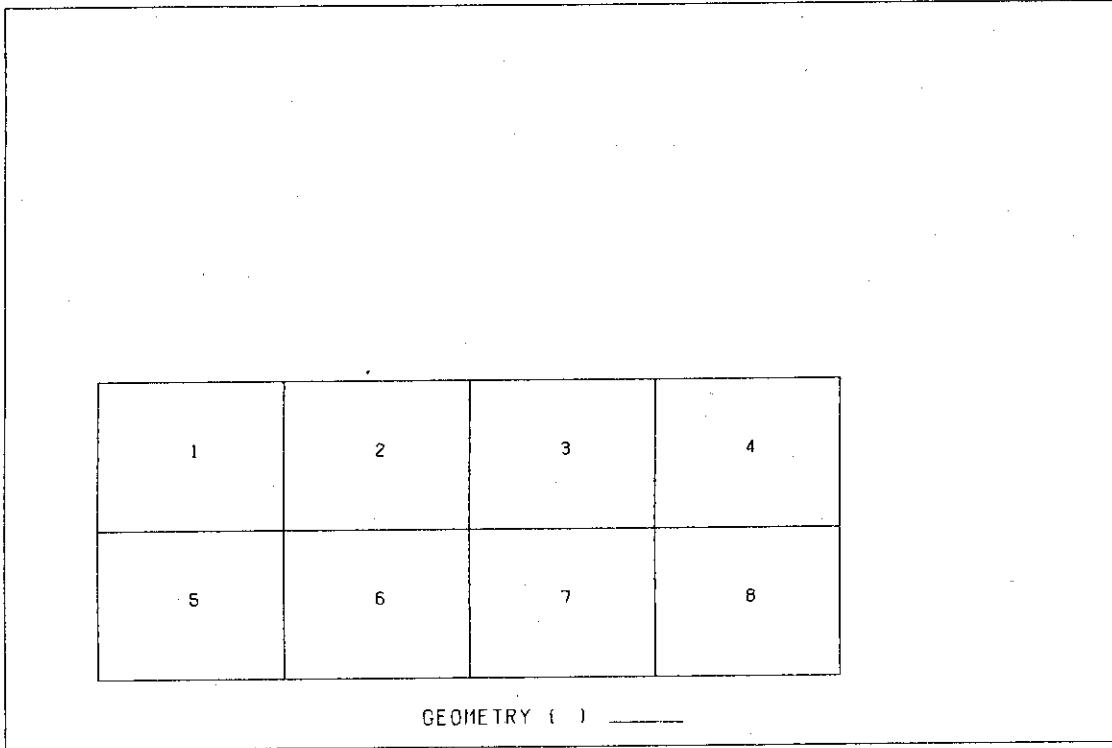
第6.1(a)図 節点-要素図



NODE

TRUMPJ TEST (TEST1)

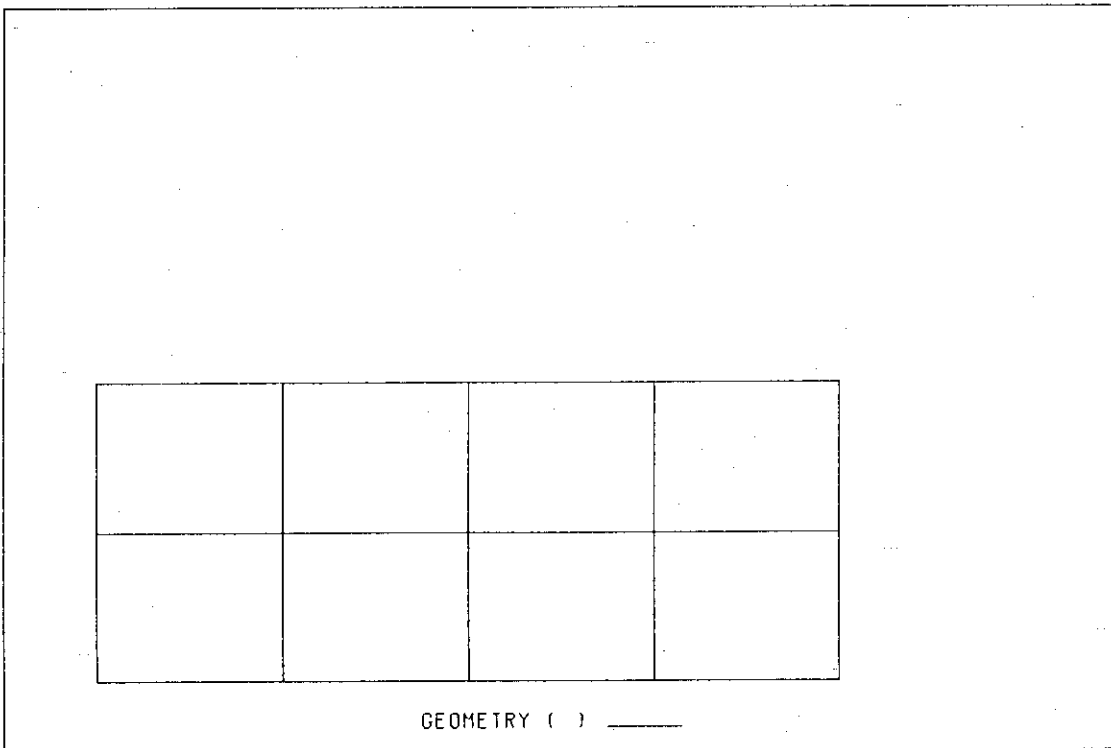
第6.1(b)図 節点図



ELEMENT

TRUMPJ TEST (TEST1)

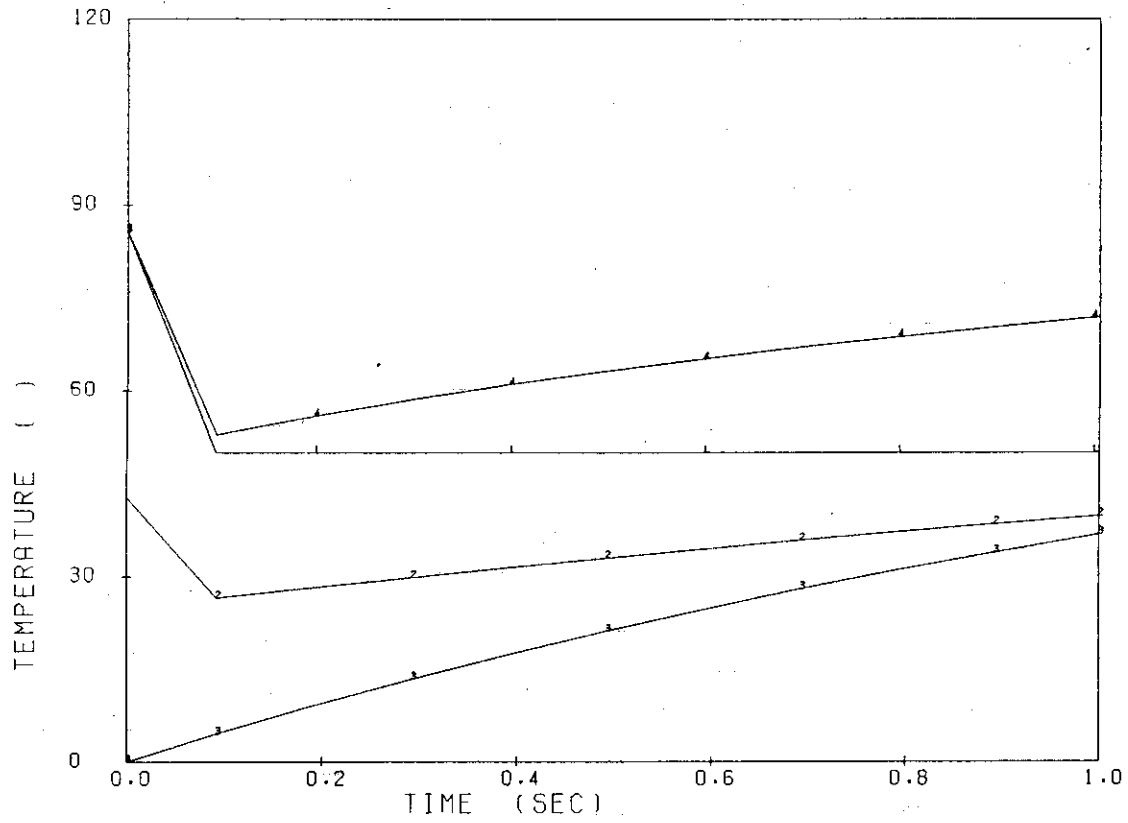
第6.1(c)図 要素図



GEOMETRY

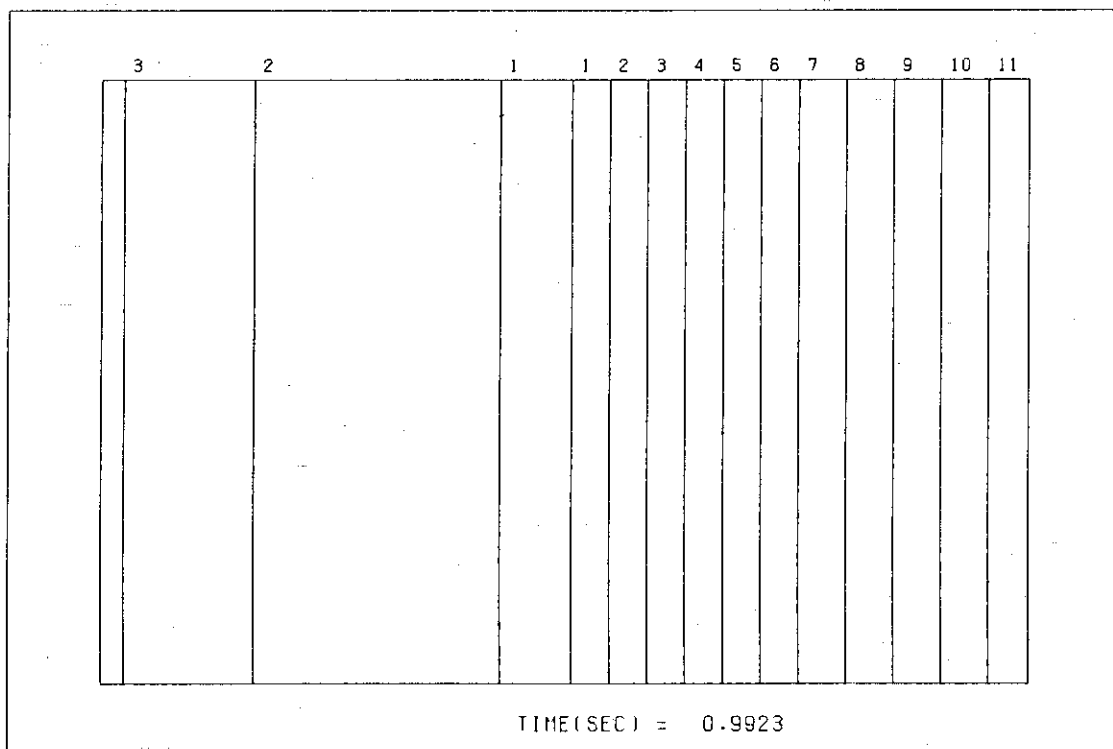
TRUMPJ TEST (TEST1)

第6.1(d)図 外形図



TRUMPJ TEST (TEST1)

第6.1(e)図 温度変化図



TEMPERATURE CONTOUR

TRUMPJ TEST (TEST1)

第6.1(f)図 等温度線図

7. ジョブ制御文

ジョブ制御文は第 7.1 表～第 7.3 表に示す。計算プログラムの実行時に使用するファイルの番号および用途を第 7.4 表～第 7.6 表に示す。

第 7.1 表 TRUMP3 ジョブ制御文

```
// EXEC PGM=TRUMPJ
//STEPLIB DD DSN=J2322.LMTRUMPJ.LOAD,DISP=SHR
// EXPAND DISK,
// DDN=FT05F001
//FT06F001 DD SYSOUT=*
//FT07F001 DD SYSOUT=*
//FT10F001 DD SPACE=(CYL,(10,10)),UNIT=TSSWK
//FT47F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK,DISP=(NEW,DELETE),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT48F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK,DISP=(OLD,DELETE),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10)),
//          VOL=REF=*.FT47F001
//FT50F001 DD DSN=J2322.TRUMPJ.TESTX,DISP=SHR
//FT55F001 DD DSN=J2322.DTTRUMPJ.DATA(TEST1),DISP=SHR
//
```

第 7.2 表 PRE-TRUMP のジョブ制御文

```
// EXEC PGM=PRETRP
//STEPLIB DD DSN=J2322.LMTRUMPJ.LOAD,DISP=SHR
//FT08F001 DD SYSOUT=*,DCB=(RECFM=FA,LRECL=133,BLKSIZE=133)
//FT06F001 DD SYSOUT=*
//FT11F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK1,DISP=(NEW,PASS),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT21F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK2,DISP=(NEW,PASS),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT24F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK3,DISP=(NEW,PASS),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT25F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK4,DISP=(NEW,PASS),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT26F001 DD UNIT=WK10,DSN=&&WORK5,DISP=(NEW,PASS),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=1600),SPACE=(TRK,(10,10))
//FT10F001 DD DSN=J2322.DTPRETRP.DATA(TRPTTEST1),DISP=SHR
//FT20F001 DD DSN=J2322.DTPRETRP.DATA(FEMTEST1),DISP=SHR
//FT30F001 DD DSN=J2322.DTTRUMPJ.DATA(TEST1),DISP=SHR
//FT05F001 DD *
//
```

第 7.3 表 POST-TRUMP のジョブ制御文

```
// EXEC PGM=POSTTRP
//STEPLIB DD DSN=J2322.LMTRUMPJ.LOAD,DISP=SHR
// EXPAND GRNLP,
// SYSOUT=K
//FT06F001 DD SYSOUT=*
//FT05F001 DD DSN=J2322.DTPSTTRP.DATA(TEST1),DISP=SHR
//FT10F001 DD DSN=J2322.DTPRETRP.DATA(FEMTEST1),DISP=SHR
//FT20F001 DD DSN=J2322.TRUMPJ.TEST1,DISP=SHR
//FT30F001 DD SYSOUT=*,DCB=(RECFM=FA,LRECL=133,BLKSIZE=133)
//FT50F001 DD SYSOUT=*,DCB=(RECFM=FA,LRECL=133,BLKSIZE=133)
//FT31F001 DD DUMMY,DISP=OLD
//
```

第 7.4 表 TRUMP 3 の使用ファイル

ファイル名	入出力	内 容	備 考
FT05F001	中間	入力データストア	通常 DUMMY
FT06F001	出力	プリント	
FT10F001	中間	作業用	
FT47F001	中間	作業用	
FT50F001	出力	POST- TRUMP 用出力	
FT55F001	入力	入力データ	
FT07F001	出力	温度パンチアウト	

第 7.5 表 PRE- TRUMP の使用ファイル

ファイル名	入出力	内 容	備 考
FT05F001	入力	入力データ	通常 DUMMY
FT06F001	出力	プリント	
FT08F001	出力	チェックプリント	
FT10F001	入力	TRUMP 入力データ	
FT11F001	中間	作業用	
FT20F001	入力	FEM データ	
FT21F001	中間	作業用	
FT24F001	中間	作業用	
FT25F001	中間	作業用	
FT26F001	中間	作業用	
FT30F001	出力	TRUMP 3 用データ	

第 7.6 表 POST- TRUMP の使用ファイル

ファイル名	入出力	内 容	備 考
FT05F001	入力	入力データ	NO FORMAT 80 バイト 通常 DUMMY
FT06F001	出力	プリント	
FT10F001	入力	FEM 形状データ	
FT20F001	入力	TRUMP の計算結果	
FT30F001	出力	応力解析用データのプリント	
FT31F001	出力	応力解析用データの出力ファイル	
FT50F001	出力	チェックプリント	

参 考 文 献

- (1) Edwards, A.L., "TRUMP: A Computer Program for Transient and Steady-State Temperature Distributions in Multidimension Systems", UCRL-14754, Rev. 3 (1972).
- (2) Turner, W.D., Elrod, D.C. and Siman-Toy, I.I., "HEATING 5 - An IBM 360 Heat Conduction Program", ORNL/CSD/TM-15 (1977).

付録A. 計算の一般的シーケンス

A. 1 入力データと初期値

ほとんどのデータは入力データによる。最初のステップでは、全時間SUMTIM は入力データ t 。(TAU) に等しく、時間ステップ Δt (DELTA)は 10^{-12} である。内挿係数 f (FOR) は 1.0 である。温度変化の推定割合 T_n (DDT), 変化 a_n (DDA)と b_n (DDB)は零である。入力値 KSPEC が正ならば、すべてのノードは特別ノードとなる。ステップのカウンタはKCYCである。

A. 2 各時間ステップの計算

最初のステップでは最大温度変化DTMAXは零にリセットされる。温度の増分変化 ΔT_n (DT) および Δa_n (DA), Δb_n (DB)に零にリセットされる。サブルーチンTHERMによって各ノードにおいて熱量 W_n (W), 予測平均熱容量 \bar{C}_n (CAP), 熱伝導率 \bar{k}_n (CON) が計算される。

サブルーチンGENによって、予測平均内部熱生成量 \bar{g}_n (G) およびノード温度変化 $\Delta T_{n, G, Reg}$ が計算される。

サブルーチンCHEMにおいて、予測平均反応熱 $Q_{a, n}$ (QA)と $Q_{b, n}$ (QB)および対数衝突回数 $Z_{a, n}$ (ZA)と $Z_{b, n}$ (ZB)および活性化エネルギー $E_{a, n}$ (EA)と $E_{b, n}$ (EB)が計算される。また、ノードが保有する反応変化 $\Delta a_{n, R}$ (DA)と $\Delta b_{n, R}$ (DB)およびノードの温度変化 $\Delta T_{n, R, Reg}$ (DT)が計算される。

サブルーチンFINKにおいて、内部熱接触の予測平均熱伝導率 $U_{n, k}$ (TRAN)と各ノードの全熱伝導率に寄与する Z_k (ZIP)が計算され、ノード温度変化 $\Delta T_{n, I, Reg}$ (DT)が計算される。

サブルーチンFLOWにおいて、流体接合部での予測平均流量 $\bar{F}_{n, k}$ (FLOWN)と各ノードの全熱伝導に及ぼす量 Z_n (ZIP)が計算され、ノードの温度変化 $\Delta T_{n, F, Reg}$, $\Delta a_{n, F}$, $\Delta b_{n, F}$ が計算される。

サブルーチンSUREにおいて、外部表面接触の予測平均熱伝導 $U_{n, b}$ (TRANS)と各ノードの全熱伝導 Z_n (ZIP)が計算され、ノード温度変化 $\Delta T_{n, E, Reg}$ が計算される。

サブルーチンTHERM1において、相変化量 $\Delta a_{n, P}$ (DA)とノード温度 $\Delta T_{n, P}$ (DT)に及ぼす潜熱の影響を計算する。

サブルーチンSPECKにおいて、特別のノードの温度変化と特別のノードに接続する通常のノードの温度を計算する。

サブルーチンTHERM2において、相変化量 $\Delta a_{n, P}$ (DA)の最終の計算と潜熱の影響 $\Delta T_{n, P}$ (DT)が計算される。

サブルーチンTALLYにおいて、すべてのノードの安定限界 τ_n (SLIM)が計算され、通常のノードの最大安定時間ステップ $\Delta t_{s, Reg}$ (DELTMX)が計算される。

付録B. 物性値, 熱収支データ, 物質収支データの計算

B.1 関数値の計算

物性値や流量などを時間や温度に関する表の形で与えることもできる。これらは、物質の比熱とエンタルピー(CAPT及びWF対TVARC), 熱伝導率(CONT対TVARK); 反応物の化学反応熱(QT対TVARQ), 対数衝突頻度(ZT対TVARZ), 活性化エネルギー(ET対TVARE); 熱生成強度(GT対TVARG); 表面の熱コンダクタンス(HSURT対TVARH); 質量流量速度(FLOWT対TVARFL)などであり, また外部温度を時間に関する表の形(TEMPB対TIMEB)で与えることもできる。

計算の各時刻 t (SUMTIM)において, 全ての表関数の平均値が, 次の時間ステップ Δt (DELTA)の計算に用いるために計算されている必要がある。これらの値は表から内挿や外挿によって求められる。時間に依存したパラメータは平均時間値

$$\bar{t} = t + f \cdot \Delta t \quad (\text{B-1-1})$$

について求められる。ただし, 外部温度だけは, 時間 $(t + \Delta t)$ における値が求められる。温度に依存したパラメータは, ノード温度の平均値 \bar{T}_n と外部温度の平均値 \bar{T}_b について求められる;

$$\bar{T}_n = T_n + f \cdot \Delta t \cdot \dot{T}_n \quad (\text{B-1-2})$$

$$\bar{T}_b = T_b + f \cdot (T'_b - T_b) \quad (\text{B-1-3})$$

T_n は時刻 t におけるノード温度, \dot{T}_n は推定の平均温度変化率(I.3を参照), T_b と T'_b はそれぞれ時刻 t , $(t + \Delta t)$ における外部温度, および f は0.57~1.0の間の値をとる補挿係数である。

表から求められる値の精度は, 表の各点を直線で得られる折れ線が実際の関数値の変化を2%以内におさえることにより, 有限の時間ステップを用いることによって生じる誤差をコントロールする。必要であれば, 下限値SMALLを条件として, 時間ステップを等分して反復計算する。

B.2 ノード熱収支および物質収支

B.2.1 熱物性値

温度や濃度の変化の計算に必要ないくつかの量, および熱収支や物質収支の計算に関係する量が系内の各ノードについて計算される。次式で求まるノードの体積 V_n (VOL)と質量 M_n (HEFT)は, 計算の間では一定とする。

$$V_n = \alpha \cdot d_1 \cdot d_w \cdot d_r \cdot S_d^3 \quad (\text{B-2-2})$$

$$M_n = \rho_m V_n \quad (\text{B-2-2})$$

ここで, α , β は系の対称性(非対称, 軸対称, 点対称)によって決まる値であり, d_1, d_w, d_r は各ノードについてのインプット値である。また ρ_m はノードを含んでいる物質の密度のインプット値(一定値)である。

各ノードの平均の総熱容量 \bar{C}_n (CAP) は次のように計算される。

$$\bar{C}_n = \bar{c}_n M_n \quad (B-2-3)$$

ここで \bar{c}_n は、ノードを含んでいる物質の、その時間ステップにおける平均時刻とノード n の平均温度 [(B-1-2) 式] における比熱である。

各ノードの初期熱量 W_n (W) は、もしノードの物質の比熱が温度に関する表関数として与えられていれば、各時間ステップの始まりにおいて、次のように計算される。

$$\bar{W}_n = W_o + (\bar{C}_n + C_o) \frac{(T_n - T_o)}{2} \quad (B-2-4a)$$

$$W_n = [\bar{W}_n + \Delta H_m (1 - a_n)] M_n \quad (B-2-4b)$$

ここで、

T_n ; 時間ステップの始まりにおけるノード温度

C_o ; T_n の近傍の温度 T_o ($\leq T_n$) におけるノードを含んでいる物質の比熱(表中の T_o に対応した値) (T_n が表中の最初の温度より低ければ、表の最初の温度に対応した比熱の値)

\bar{W}_n ; 温度 T_n におけるノードの物質の単位質量当りの顕熱量(温度ゼロと T_n の間の比熱の表関数値曲線の下面積に等しい)

ΔH_m ; ノードの物質の単位質量当りの相変化に関する潜熱

a_n ; 時間ステップの始まりにおけるノード内の低温相の重量分率

ノードを含んでいる物質の比熱が、温度に依存していない場合は、 W_n は次のように計算される。

$$W_n = \bar{C}_n T_n + \Delta H_m (1 - a_n) M_n \quad (B-2-5)$$

各時間ステップの終わり、各ノードの最終の全熱量 W'_n (W) が次のように計算される。

$$W'_n = W_n + \bar{C}_n \Delta T_n - \Delta H_m \Delta a_n M_n \quad (B-2-6)$$

初期値 W_n は、質量流れによる熱伝達の計算(F-2を参照)の時にだけ用いられ、最終値 W'_n は、追加の熱収支の情報を与える時にだけ計算される。

B. 2.2 熱収支データ

計算の始まりからの各ノードの熱量の変化量 $H_{n, net}$ (H) が、その時間ステップの終わりに次式により計算される。

$$H_{n, net} = \sum_t (\bar{C}_n \Delta T_n - \Delta H_m \Delta a_n M_n) \quad (B-2-7)$$

ここで、総和は、その時刻までの時間ステップの全てについての和を示す。

計算の始まりからの各ノード内への内外部熱接触による伝熱量 $H_{n, flux}$ (F) は、時間ステップの終わりに次式により計算される。

$$H_{n, flux} = \sum_t \left(\sum_k \Delta H_{n, k} + \sum_b \Delta H_{n, b} \right) \quad (B-2-8)$$

ここで、 k 、 b についての総和は、それぞれ、ノード n の内部熱接触の全てに関する和、ノード n の外部熱接触の全てに関する和を示す。熱流の増分 $\Delta H_{n, k}$ と $\Delta H_{n, b}$ は各時間ステップ毎に (F-1-1) 式、(G-1-1) 式によって計算される。

B. 2.3 物質の熱収支

各物質の総括熱収支に関係したいくつかの量が計算される。物質の総体積 V_{mat} (VOLMS),

総質量 M_{mat} (HEFTMS) は次のように計算され、計算の間ではこれらの値は一定とする。

$$V_{mat} = \sum V_{n, mat} \quad (B-3-1)$$

$$M_{mat} = \rho_m V_{mat} \quad (B-3-2)$$

ここで、総和は、その物質が含んでいるノードの全てについての和を示す。

その他のデータは、各時間ステップの終りに計算される。各物質の総熱容量 \bar{C}_{mat} (CAPMS)、総熱量 W_{mat} (CAPMS)、総熱量 W_{mat} (WMS)、および熱容量一定で、潜熱効果を含まないと仮定した時の平均温度 \bar{T}_{mat} (TMS) は次のように計算される。

$$\bar{C}_{mat} = \sum_n \bar{C}_n \quad (B-3-3)$$

$$W_{mat} = \sum_n W'_n \quad (B-3-4)$$

$$\bar{T}_{mat} = \sum_n \bar{C}_n T_n / \bar{C}_{mat} \quad (B-3-5)$$

B. 2.4 系の熱収支

系の総括熱収支に関係したいくつかの量が計算される。系の総体積 V_{sys} (VOLS) と全質量 M_{sys} (HEFTS) は、次のように計算され、計算の間その値は一定とする。

$$V_{sys} = \sum V_n \quad (B-4-1)$$

$$M_{sys} = \sum \rho_n V_n \quad (B-4-2)$$

ここで総和は系内に含まれるノードの全てのノードについての和を示す。

それぞれの時間ステップの終りで、系の総熱容量 \bar{C}_{sys} (CAPS)、総熱量 W_{sys} (HEAT)、および(熱容量一定で、潜熱効果を含まないと仮定した時の)平均温度 \bar{T}_{sys} (TEMPAD) が次式により計算される。

$$\bar{C}_{sys} = \sum_n \bar{C}_n \quad (B-4-3)$$

$$W_{sys} = \sum_n W'_n \quad (B-4-4)$$

$$\bar{T}_{sys} = \sum_n \bar{C}_n T_n / \bar{C}_{sys} \quad (B-4-5)$$

また系内に流入する正味の熱流量 $H_{sys, flux}$ (FLUX)、それによる(熱容量一定で、潜熱効果を含まないと仮定した時の)温度の変化量 $\Delta T_{sys, flux}$ (TEMPER)、系内に流入する平均の熱流量率 $\dot{H}_{sys, flux}$ (FX)、およびそれによる平均の温度変化率 $\dot{T}_{sys, flux}$ (TX) が次のように計算される。

$$H_{sys, flux} = \sum_n H_{n, flux} \quad (B-4-6)$$

$$\Delta T_{sys, flux} = H_{sys, flux} / \bar{C}_{sys} \quad (B-4-7)$$

$$\dot{H}_{sys, flux} = H_{sys, flux} / (t - t_0) \quad (B-4-8)$$

$$\dot{T}_{sys, flux} = \Delta T_{sys, flux} / (t - t_0) \quad (B-4-9)$$

ここで、 t は総時刻 SUMTIM であり、 t_0 は初期時刻 TAU である。

系に対する内部熱生成の影響は、系内の正味の熱発生率 G_{sys} (GS)、全発生熱量 $H_{sys, gen}$ (GENS)、および(熱容量一定で潜熱効果を含まないと仮定した時の)熱生成による温度変化量 $\Delta T_{sys, gen}$ (TEMPLE) でまとめられ、それぞれの時間ステップ毎に次のように計算される。

$$G_{sys} = \sum_n G_n \quad (B-4-10)$$

$$H_{sys, gen} = \sum_s G_{sys} \cdot \Delta t_s \quad (B-4-11)$$

$$\Delta T_{sys, gen} = H_{sys, gen} / \bar{C}_{sys} \quad (B-4-12)$$

ここで、s についての総和はその時点までの時間ステップの全てについての和を示している。

付録C. 相 変 化

指定した相変化あるいは T_{min} (TMIN) と T_{max} (TMAX) の間の相変化温度 T_m を持ち、潜熱効果 ΔH_m が指定された物質 m 中のそれぞれのノード n について低温相の初期濃度 a_n は次式で計算される。

$$a_n \begin{cases} 1.0, & T_n \leq T_m \\ 0.0, & T_n > T_m \end{cases} \quad (C-1-1)$$

(Problem Name カードの67~71カラムを 'A=BL9' とすると、BLOCK 9 でインプットした a_n の値を代わりに用いることができる)。

相濃度の変化とそれによる温度変化の計算は各時間ステップにおいて2段階に分けて行われる。初めに、ノード n で起こる相変化量の推定を次のようにする。

$$\Delta a_{n,P,est} = \dot{a}_n \Delta t + (T_m - T_n - \dot{T}_n \Delta t) \bar{c}_n / \Delta H_m \quad (C-1-2)$$

ただし

$$-a_n \leq \Delta a_{n,P,est} \leq 1 - a_n \quad (C-1-3)$$

相変化によるノードの推定の温度変化量は次のように計算される。

$$\Delta T_{n,P,est} = \Delta a_{n,P,est} \cdot \Delta H_m / \bar{c}_n \quad (C-1-4)$$

この計算は付録Hで記述されている反復計算を行う前に行われる。

相変化の計算は第2段階として反復計算が終了した後で行われる。補正後の相変化量は次式で計算される。

$$\Delta a_{n,P} = \Delta a_{n,P,est} + (T_m - T_n - \Delta T'_n) \bar{c}_n / \Delta H_m \quad (C-1-5)$$

ただし

$$-a_n \leq \Delta a_{n,P} \leq 1 - a_n \quad (C-1-6)$$

$\Delta T'_n$ は、相変化の最後の補正を除いた、すべての起因によるノード n の温度変化量である。相変化によるノード n の最終の温度変化は次式で求められる。

$$\Delta T_{n,P,Reg} = \Delta a_{n,P} \cdot \Delta H_m / \bar{c}_n \quad (C-1-7)$$

この方法によれば、ノードの温度を a_n が 0~1.0 の範囲内にある時に T_m に維持し、潜熱量を正しく求めることができる。体積がゼロのノードでは潜熱効果は無視される。最終の補正はノードの熱収支には影響を及ぼさないが、ノードの熱量と温度に相濃度が矛盾しないように、顕熱を潜熱に変えたり、また逆に潜熱を顕熱に変えたりする。

付録D. 化学反応

ある時間ステップでの、化学反応によるノードnの中の成分aとbの濃度の変化は、次式で計算される。

$$\Delta a_{n,R} = -a_n^{P_{a,n}} \Delta t \exp \left[\bar{Z}_{a,n} - \frac{\bar{E}_{a,n}}{R(\bar{T}_n + T_0)} \right] \quad (D-1-1)$$

$$\Delta b_{n,R} = -b_n^{P_{b,n}} \Delta t \exp \left[\bar{Z}_{b,n} - \frac{\bar{E}_{b,n}}{R(\bar{T}_n + T_0)} \right] \quad (D-1-2)$$

ここで

a_n, b_n ; 時間ステップの始まりでの濃度 (重量分率)

$P_{a,n}, P_{b,n}$; 反応次数

R ; 気体定数 (= 1.987 cal / gmol °K)

\bar{Z}, \bar{E} ; その時間ステップでの推定の平均値 (付録Bの1を参照のこと)

T_0 ; 絶対温度に変換するための定数

\bar{T}_n ; その時間ステップでのノードnの温度の計算値 (平均)

$$\bar{T}_n = T_n + f \Delta t \dot{T}_n \quad (D-1-3)$$

f ; 時間ステップの補挿係数 (付録Iの4を参照のこと)

\dot{T}_n ; ノードnの推定の温度変化率 (付録Iの3を参照のこと)

化学反応によるノードnの温度変化は、最初次式で計算される。

$$\Delta T_{n,R,Reg} = -(\bar{Q}_{a,n} \Delta a_{n,R} + \bar{Q}_{b,n} \Delta b_{n,R}) / \bar{C}_n \quad (D-1-4)$$

ここで \bar{Q} と \bar{C} はその時間ステップでの推定の平均値 (付録Bを参照のこと)。

もしノードnが特別なノードであれば、実際は化学反応による生成熱の一部が系内の他のノードに再分配され、ノードnの温度変化量が次のように与えられる。

$$\Delta T_{n,R} = \frac{\Delta T_{n,R,Reg}}{(1 + f \Delta t Z_n / \bar{C}_n)} \quad (D-1-5)$$

ここで Z_n はノードnの全コンダクタンスである (式(H-1-4))。

付録E. 内部熱発生

ある時間ステップでの内部熱発生による温度変化は、最初に次式で計算される。

$$\Delta T_{n,G,Reg} = \bar{G}_n \Delta t / \bar{C}_n \quad (E-1-1)$$

ここで、

$$\bar{G}_n = \bar{g}_n \cdot V_n \quad (E-1-2)$$

\bar{g}_n ; その時間ステップの間のノードnの単位体積当りの平均熱発生率

(付録Bを参照のこと)

ノード n が特別なノードであれば、反復計算の結果として、発生熱の一部が系内の他のノードに再分配され、温度変化量が次のように求められる。

$$\Delta T_{n,G} = \frac{\Delta T_{n,G,Reg}}{(1 + f \Delta t Z_n / C_n)} \quad (E-1-3)$$

ここで f は時間ステップの補挿係数 (付録 I の 4 を参照のこと)、 Z_n はノードの全コンダクタンス (式(H-1-4))である。

付録 F. 内部熱伝達および反応の伝達

F.1 内部熱接触

ある時間ステップ Δt の間に、熱接触によってノード k からノード n に流入する熱流 $\Delta H_{n,k,I}$ は次式により計算される。

$$\Delta H_{n,k,I} = U_{n,k} (\bar{T}_k - \bar{T}_n) \Delta t = -\Delta H_{k,n,I} \quad (F-1-1)$$

ここで、 $U_{n,k}$ は、平均のコンダクタンスであり、 \bar{T}_k 、 \bar{T}_n はその時間ステップにおける平均温度である。最初はノードの全てがふつうのノードとして扱われ、その後、特別なノードが含まれた時には、次に示すような平均温度に相当するような解を得るために、反復計算が行われる。

ノード n と k がともにふつうのノードの時

$$\bar{T}_n = T_n \quad (F-1-2)$$

$$\bar{T}_k = T_k \quad (F-1-3)$$

n がふつうのノードで、 k が特別なノードの時

$$\bar{T}_n = T_n + f \Delta T_{n,Reg} \quad (F-1-4)$$

$$\bar{T}_k = T_k + f \Delta T_k \quad (F-1-5)$$

n と k がともに特別なノードの時

$$\bar{T}_n = T_n + f \Delta T_n \quad (F-1-6)$$

$$\bar{T}_k = T_k + f \Delta T_k \quad (F-1-7)$$

ここで、 T_n 、 T_k は時間ステップの始まりにおけるそれぞれのノード温度、 f は 0.57~1.0 の間の値をとる補挿係数、 $\Delta T_{n,Reg}$ は、特別なノードとの接触と相変化について成される最終的な補正を除いた他の全ての原因によるふつうのノード n の温度変化量、 ΔT_n 、 ΔT_k は相変化について成される最終の補正を除いた他の全ての原因による特別なノード n 、 k 内の温度変化量である。

各内部熱接触間を流れる総熱流 $H_{n,k}$ (FI) およびその平均の割合 $\dot{H}_{n,k}$ (FX) は、各時間ステップ Δt_s において次のように計算される。

$$H_{n,k,I} = \sum_s U_{n,k} (\bar{T}_k - \bar{T}_n) \Delta t_s \quad (F-1-8)$$

$$\dot{H}_{n,k,I} = H_{n,k,I} / \sum_s \Delta t_s \quad (F-1-9)$$

またその時間ステップに関する割合 $U_{n,k} (\bar{T}_k - \bar{T}_n)$ も計算される。

内部熱接触によるノード n の温度の変化量 $\Delta T_{n,I}$ が、初めに次のように求められる。

$$\Delta T_{n, I, Reg} = \frac{\Delta t}{C_n} \sum_k U_{n, k} (T_k - T_n) \quad (F-1-10)$$

特別なノードを含む系に対しては、その時間ステップの最後の結果として反復計算の後、次のようになる。

ふつうのノード；

$$\Delta T_{n, I} = \frac{\Delta t}{C_n} \left[\sum_k^{all} U_{n, k} (T_k - T_n) + f \sum_k^{spec} U_{n, k} (\Delta T_k - \Delta T_{n, Reg}) \right] \quad (F-1-11)$$

特別なノード；

$$\Delta T_{n, I} = \frac{\Delta t}{C_n} \left[\sum_k^{all} U_{n, k} (T_k - T_n) + f \sum_k^{Reg} U_{n, k} (\Delta T_{k, Reg} - \Delta T_n) + f \sum_k^{spec} U_{n, k} (\Delta T_k - \Delta T_n) \right] \quad (F-1-12)$$

F. 2 質量流れの接続

F. 2.1 熱伝達

時間ステップ Δt の間に質量流れによってノードからノードに伝わる熱量 $\Delta H_{n, x, F}$ は次式で求められる。

$$\Delta H_{n, k, F} = \bar{F}_{n, k} (\bar{w}_{n, k} - \bar{w}_n) \Delta t \quad (F-2-1)$$

ここで、 $\bar{F}_{n, k}$ は平均の質量速度、 $\bar{w}_{n, k}$ はノード n と k との接続境界面での平均の比エンタルピー、 \bar{w}_n はノード n の平均の比エンタルピーである。 \bar{w}_n の項は、指定した各質量流れが、ノードの平均温度において暗黙的に逆流を伴うようにして、それぞれのノードに関する質量収支を保証するために含まれている。

内部熱接触の場合と同様に、すべてのノードが初めにふつうのノードとして扱われ、特別なノードが存在する時に、陰方程式を解くための反復計算が行なわれる。いろいろな場合に用いられる平均の比エンタルピーが次のように計算される。

ノード n と k が共にふつうのノードの時；

$$\bar{w}_n = w_n - f \Delta t \dot{a}_n \Delta H_n = w_{n, Reg} \quad (F-2-2)$$

$$\bar{w}_k = w_k - f \Delta t \dot{a}_k \Delta H_k = w_{k, Reg} \quad (F-2-3)$$

$$\bar{w}_{n, k} = \frac{d_k w_{n, Reg} + d_n w_{k, Reg}}{d_n + d_k} = w_{n, k, Reg} \quad (F-2-4)$$

ここで

w_n, w_k ; その時間ステップの初めにおける(潜熱を含んだ)比エンタルピー

f ; 補挿係数

\dot{a}_n, \dot{a}_k ; 推定の相変化率

$\Delta H_n, \Delta H_k$; 相変化についての潜熱

d_n, d_k ; ノード n, k のそれぞれの節点から接続面までの相対距離

ここでは、反復計算を簡略にするために、推定の相変化を含んでいるが、相変化と質量流れが相

互に強く影響し合うところでは、不安定になることがあり得る。その他の場合には次のように平均の比エンタルピーが計算される。

ノード n がふつうのノード，ノード k が特別の場合；

$$\bar{W}_n = W_{n, \text{Reg}} + f \bar{C}_n \Delta T_{n, \text{Reg}} \quad (\text{F-2-5})$$

$$\bar{W}_{n, k} = W_{n, k, \text{Reg}} + \begin{cases} f \bar{C}_n \Delta T_{n, \text{Reg}} & \dots\dots n \text{ が上流の時} \\ f \bar{C}_k \Delta T_k & \dots\dots k \text{ が上流の時} \end{cases} \quad (\text{F-2-6})$$

ここで、 \bar{C}_n, \bar{C}_k は推定の平均比熱， $\Delta T_n, \Delta T_k, \Delta T_{n, \text{Reg}}$ および $\Delta T_{k, \text{Reg}}$ は、F.1 で定義されているものである。

ノード n が特別なノード，ノード k がふつうのノードの場合；

$$\bar{W}_n = W_{n, \text{Reg}} + f \bar{C}_n \Delta T_n \quad (\text{F-2-7})$$

$$\bar{W}_{n, k} = W_{n, k, \text{Reg}} + \begin{cases} f \bar{C}_n \Delta T_n & \dots\dots n \text{ が上流の時} \\ f \bar{C}_k \Delta T_{k, \text{Reg}} & \dots\dots k \text{ が上流の時} \end{cases} \quad (\text{F-2-8})$$

ノード n と k が共に特別なノードの場合；

$$\bar{W}_n = W_{n, \text{Reg}} + f \bar{C}_n \Delta T_n \quad (\text{F-2-9})$$

$$\bar{W}_{n, k} = W_{n, k, \text{Reg}} + \begin{cases} f \bar{C}_n \Delta T_n & \dots\dots n \text{ が上流の時} \\ f \bar{C}_k \Delta T_k & \dots\dots k \text{ が上流の時} \end{cases} \quad (\text{F-2-10})$$

以上のことは、接続境界面における比エンタルピーを、質量流れについての反復計算の適用が安定になるように、上流のノードに都合よく重みづけされていることを表わしている。簡単のために、上流のノードの温度変化は、接続境界面での温度変化を補挿したものでおきかえられている。

それぞれの流れについての接続を横切る正味の質量流量 $M_{n, k}$ (FLAPS) と、その平均の質量速度 $\dot{M}_{n, k}$ (FX) が次式で求められる。

$$M_{n, k} = \sum_s \bar{F}_{n, k} \Delta t_s \quad (\text{F-2-11})$$

$$\dot{M}_{n, k} = M_{n, k} / \sum_s \Delta t_s \quad (\text{F-2-12})$$

それぞれのノードに対して、正味の流入質量速度 $\bar{F}_{n, \text{in}}$ (FLINT)，流出質量速度 $\bar{F}_{n, \text{out}}$ (FLOU)，正味の流入量 $M_{n, \text{in}}$ (FLIPS)，流出量 $M_{n, \text{out}}$ (FLOPS)，および平均の流入質量速度 $\dot{M}_{n, \text{in}}$ (FX1)，流出質量速度 $\dot{M}_{n, \text{out}}$ (FX2) が次のように計算される。

$$\bar{F}_{n, \text{in}} = \sum_k^{\text{in}} \bar{F}_{n, k} \quad (\text{F-2-13})$$

$$\bar{F}_{n, \text{out}} = \sum_k^{\text{out}} \bar{F}_{n, k} \quad (\text{F-2-14})$$

$$M_{n, \text{in}} = \sum_s \bar{F}_{n, \text{in}} \Delta t_s \quad (\text{F-2-15})$$

$$M_{n, \text{out}} = \sum_s \bar{F}_{n, \text{out}} \Delta t_s \quad (\text{F-2-16})$$

$$\dot{M}_{n, \text{in}} = M_{n, \text{in}} / \sum_s \Delta t_s \quad (\text{F-2-17})$$

$$\dot{M}_{n, \text{out}} = M_{n, \text{out}} / \sum_s \Delta t_s \quad (\text{F-2-18})$$

質量流れの接続による各ノードの温度変化量 $\Delta T_{n, F}$ は、初めの段階で次のように求められる。

$$\Delta T_{n, F, \text{Reg}} = \frac{\Delta t}{C_n} \sum_k \bar{F}_{n, k} (W_{n, k, \text{Reg}} - W_{n, \text{Reg}}) \quad (\text{F-2-19})$$

特別なノードを含んでいる系に対しては、反復計算により次のように計算される。

$$\Delta T_{n,F} = \frac{\Delta t}{C_n} \sum_k \bar{F}_{n,k} (\bar{w}_{n,k} - \bar{w}_n) \quad (F-2-20)$$

ここで、 $\bar{w}_{n,k}$ と \bar{w}_n は、(F-2-2)~(F-2-10)式までに表わされているように、流れの方向とノードの分類によって与えられる平均の比エンタルピーである。

F. 2. 2 反応の伝播

質量流れによるノード n の中での反応濃度 a_n と b_n の変化は次のように求められる。

$$\Delta a_{n,F} = \sum_k \bar{F}_{n,k} (\bar{a}_{n,k} - \bar{a}_n) \Delta t / \rho_n V_n \quad (F-2-21)$$

$$\Delta b_{n,F} = \sum_k \bar{F}_{n,k} (\bar{b}_{n,k} - \bar{b}_n) \Delta t / \rho_n V_n \quad (F-2-22)$$

ここで、総和は、ノード n の流れの接続のすべてについての和であり、

$\bar{F}_{n,k}$; その時間ステップにおける平均の質量速度

\bar{a}_n, \bar{b}_n ; ノード n の中の平均濃度

$\bar{a}_{n,k}, \bar{b}_{n,k}$; 次式で求められる接続境界面における平均濃度

$$\bar{a}_n = a_n + f \Delta t \dot{a}_n \quad (F-2-23)$$

$$\bar{b}_n = b_n + f \Delta t \dot{b}_n \quad (F-2-24)$$

$$\bar{a}_{n,k} = \frac{d_n \bar{a}_k + d_k \bar{a}_n}{d_n + d_k} \quad (F-2-25)$$

$$\bar{b}_{n,k} = \frac{d_n \bar{b}_k + d_k \bar{b}_n}{d_n + d_k} \quad (F-2-26)$$

ここで、

d_n, d_k ; それぞれのノード n, k の節点から接続面までの相対距離

\dot{a}_n, \dot{b}_n ; 推定の濃度変化率 (I-4を参照のこと)

以上の式は無条件に安定であることはなく、最大安定時間ステップは、近似的に次式で表わされる。

$$\Delta t_{\max} = \frac{\frac{1}{2} \rho_n V_n}{\sum_k |\bar{F}_{n,k}|} \quad (n ; \text{下流}) \quad (F-2-27)$$

温度変化に対して用いられるような反復処理を、質量流れによる濃度変化に関して無条件に安定となるように用いることは不可能であり、プログラム内には含まれていない。

付録G. 外部熱伝達

時間ステップ Δt の間に境界ノードbからノードnに入る熱流 $\Delta H_{n,b,E}$ は次のように計算される。

$$\Delta H_{n,b,E} = U_{n,b} (\bar{T}_b - \bar{T}_n) \Delta t \quad (G-1-1)$$

ここで

$U_{n,b}$; 平均コンダクタンス (2.2.10(2)および付録Bを参照のこと)

\bar{T}_b, \bar{T}_n ; その時間ステップでの平均温度

最初、全部のノードがふつうのノードとして扱われ、特別なノードが系内に含まれる時に反復計算が行われる。境界ノードと接触しているノードはすべて特別なノードとして分類される。

$$\bar{T}_b = T_b + f (T'_b - T_b) \quad (G-1-2)$$

$$\bar{T}_n = T_n \quad (\text{時間ステップの始まり}) \quad (G-1-3)$$

$$\bar{T}_n = T_n + \Delta T_n \quad (\text{終り}) \quad (G-1-4)$$

ここで

T_b, T'_b ; それぞれの時間ステップの始めと終りにおける境界ノードの温度 (外部温度)
(付録Bを参照のこと)

T_n ; 時間ステップの始まりにおけるノードnの温度

ΔT_n ; 最終の相変化の補正を除いた、すべての起因によるノードnの温度変化量

それぞれの外部接触を横切る総熱流 $H_{n,b,E}$ (FS), および平均の割合 $\dot{H}_{n,b,E}$ (FX)は、各時間ステップ Δt について次のように計算される。

$$H_{n,b,E} = \sum_s U_{n,b} (\bar{T}_b - \bar{T}_n) \cdot \Delta t_s \quad (G-1-5)$$

$$\dot{H}_{n,b,E} = H_{n,b,E} / \sum_s \Delta t_s \quad (G-1-6)$$

さらにその時間ステップでの割合 $U_{n,b} (\bar{T}_b - \bar{T}_n)$ も計算される。

それぞれの境界ノードから系内に入る総熱流 H_b (FB), および平均の割合 \dot{H}_b (FX)は、各時間ステップ Δt について次のように計算される。

$$H_b = \sum_n H_{n,b,E} \quad (G-1-7)$$

$$\dot{H}_b = H_b / \sum_s \Delta t_s \quad (G-1-8)$$

さらにその時間ステップでの割合 $\sum_n U_{n,b} (\bar{T}_b - \bar{T}_n)$ も計算される。

外部接触によるノードn内の温度変化量 $\Delta T_{n,E,Reg}$ は初めに

$$\Delta T_{n,E,Reg} = \frac{\Delta t}{C_n} \sum_b U_{n,b} \{ T_b + f (T'_b - T_b) - T_n \} \quad (G-1-9)$$

から計算され、反復計算の後の最終値は次のように求められる。

$$\Delta T_{n,E} = \frac{\Delta t}{C_n} \sum_b U_{n,b} \{ T_b - T_n + f (T'_b - T_b - \Delta T_n) \} \quad (G-1-10)$$

付録H. 陰差分方程式

H. 1 温度変化の方程式

それぞれのノードの温度変化量は、最初に次のようなふつうのノードに対して適用される式を用いて計算される。

相変化(C-1-4), 内部熱発生(E-1-1), 化学反応(D-1-4), 内部熱接触(F-1-11), 流れの接続(F-2-19), 外部熱接触(G-1-9)以上の式をまとめると、最初に求められる温度変化量は

$$\Delta T_{n, \text{Reg}} = \frac{\Delta t}{C_n} \left\{ S_n + \sum_b U_{n,b} (\bar{T}_b - T_n) + \sum_k U_{n,k} (T_k - T_n) \right. \\ \left. + \sum_k \bar{F}_{n,k} (\bar{W}_{n,k, \text{Reg}} - \bar{W}_{n, \text{Reg}}) \right\} \quad (\text{H-1-1})$$

ここで S_n は、相変化, 内部熱発生, および化学反応によるノード n への流入熱量である。特別なノードに対してまとめた式は次のようになる。

$$\Delta T_n = \Delta T_{n, \text{Reg}} + \frac{f \Delta t}{C_n} \left\{ - \sum_b U_{n,b} \cdot \Delta T_n + \sum_k^{\text{Spec}} U_{n,k} (\Delta T_k - \Delta T_n) \right. \\ \left. + \sum_k^{\text{Reg}} U_{n,k} (\Delta T_{k, \text{Reg}} - \Delta T_n) + \sum_k^{\text{Spec, Up}} \bar{F}_{n,k} (\bar{c}_k \Delta T_k - \bar{c}_n \Delta T_n) \right. \\ \left. + \sum_k^{\text{Reg, Up}} \bar{F}_{n,k} (\bar{c}_k \Delta T_{k, \text{Reg}} - \bar{c}_n \Delta T_n) \right\} \quad (\text{H-1-2})$$

ここで質量流れについての総和は、ノード n の上流についてのみの総和を示す。式(H-1-2)を ΔT_n について表わすと

$$\Delta T_n = \left[\Delta T_{n, \text{Reg}} + \frac{f \Delta t}{C_n} \left(\sum_k^{\text{Spec}} U_{n,k} \Delta T_k + \sum_k^{\text{Reg}} U_{n,k} \Delta T_{k, \text{Reg}} \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_k^{\text{Spec, Up}} \bar{F}_{n,k} \bar{c}_k \Delta T_k + \sum_k^{\text{Reg, Up}} \bar{F}_{n,k} \bar{c}_k \Delta T_{k, \text{Reg}} \right) \right] / \left(1 + \frac{f \Delta t}{C_n} Z_n \right) \quad (\text{H-1-3})$$

ここで

$$Z_n = \sum_b U_{n,b} + \sum_k^{\text{all}} U_{n,k} + \bar{c}_n \sum_k^{\text{Up}} \bar{F}_{n,k} \quad (\text{H-1-4})$$

式(H-1-3)の右辺において未知であるのは ΔT_k , すなわち、ノード n に熱接触している他の特別なノードの温度変化, あるいは質量流れの接続におけるノード n の上流の特別なノードの温度変化である。この方程式が後述するような反復計算によって解かれる。

安定限界 τ_n (SLIM), すなわちあるノードの時間定数は

$$\tau_n = \frac{\bar{C}_n}{Z_n} \quad (\text{H-1-5})$$

によって表わされ、ふつうのノードに対して用いられる最大安定時間ステップである。物理的に言えば、あるノードが、熱接触または質量流れの接続をしているノードの温度変化に暗示的に反応するのに必要な時間の近似値を表わしている。

体積ゼロのノードの温度変化の方程式 $\Delta T_{n,zv}$ は、いくつかの特別な目的(2.2.11を参照のこと)に関しては有効でないことがあるが、特に重要である。体積ゼロのノードが質量流れの接続における下流側のノードとして用いることがないため、また上流側のノードとして用いる時は、接続面の条件が体積ゼロのノード内の条件と同一であるために、質量流れを含んだすべての項が(H-1-3)式と(H-1-4)式から除かれる。

体積 V_n がゼロであることから、(H-1-3)式は、限定された形として次式のようにになる。

$$\Delta T_{n,zv} = \left\{ \frac{1}{f} \left(\sum_b U_{n,b} (T_b - T_n) + \sum_k^{all} U_{n,k} (T_k - T_n) \right) + \sum_b U_{n,b} (T'_b - T_b) + \sum_k^{Spec} U_{n,k} \Delta T_k + \sum_k^{Rep} U_{n,k} \Delta T_{k,Reg} \right\} / \left(\sum_b U_{n,b} + \sum_k^{all} U_{n,k} \right) \quad (H-1-6)$$

時間ステップの始まりで T_n が接触しているノードと熱平衡にあるならば、

$$T_{n,equil} = \left(\sum_b U_{n,b} T_b + \sum_k^{all} U_{n,k} T_k \right) / \left(\sum_b U_{n,b} + \sum_k^{all} U_{n,k} \right) \quad (H-1-7)$$

で置換えることができ、(H-1-6)式の初めの二項の和が消え、また最終の $\Delta T_{k,Reg}$ の補正(H.4)を除いて、 $\Delta T_{n,zv}$ が接触しているノードと時間ステップの終りで熱平衡にある体積ゼロの温度を維持するのに十分となるであろう。最初に体積ゼロのノードが熱平衡でなく、係数 f が1.0であるならば、同様に、時間ステップの終りで体積ゼロのノードが熱平衡になるように温度変化が求められるであろう。

計算の始まりの時間ステップにおいては $f = 1.0$ として、すべての体積ゼロのノードを接触しているノードと熱平衡状態にする。その後の時間ステップでは、 f は0.57~1.0の間で変化し(付録I-3を参照のこと)、体積ゼロのノードの温度は、各時間ステップにおけるその平衡値を次式で表わされるような超過量 $\Delta T_{n,excess}$ だけ通り越す。

$$\Delta T_{n,excess} = \left(\frac{1-f}{f} \right) (T_{n,equil} - T_n) + \sum_k U_{n,k} (\Delta T_{k,Reg} - \Delta T_{k,Reg,Corr}) / \left(\sum_b U_{n,b} + \sum_k U_{n,k} \right) \quad (H-1-8)$$

係数 $(1-f)/f$ は0.0~0.075間で変化し、平衡値についての T_n の任意の振動を減少させる。ふつうのノードの温度変化に関する補正を含んでいる項は、同様の減衰効果を受けるような方法で相互に作用し合い、最初の項よりさらに小さくなるようにする。定常状態への適用において、ふつうのノードが特別なノードとして再分類され、補挿係数 f が、 $\Delta T_{n,excess}$ が0に近づいていく様に、1.0に近づけられていく。一般に体積ゼロのノードは、時間や温度に強く依存する属性や境界条件が用いられたり、反復の過程が収束するのに遅れすぎたりする時にだけ生じる振動に対しても、きっちりと平衡値を維持される。

H.2 反復の手順

TRUMPで用いる反復の方法は、Evansらが論じた方法(それは、方程式の係数が温度あるいは時間に強く依存することがない時に安定である)を引用して一般化したものである。一般に収

束が速く、必要な繰返し回数は、系内の内部熱接触をしている特別なノードの相対的な数と時間定数；その様なノード間のコンダクタンスの相対的な値；および収束のチェックに用いられる TVARY のインプット値に依存している。

反復計算に用いられる方程式は、(H-1-2)式において、繰返しの数を示す添字 p と $p+1$ を用いて、次のように置換えることによって得られる。

$$\text{左辺の } \Delta T_n \rightarrow \Delta T_n^{(p+1)} \quad (\text{H-2-1})$$

$$\text{右辺の } \Delta T_n \rightarrow (1+g)\Delta T_n^{(p+1)} - g\Delta T_n^{(p)} \quad (\text{H-2-2})$$

$$\text{右辺の } \Delta T_k \rightarrow \Delta T_k^{(p)} \quad (\text{H-2-3})$$

加速係数 g は収束のためには 0 か正でなければならない；数多くのいろいろなテスト問題に対して、最小の計算時間であったということから $g = 0.2$ を選択した。 $g = 0$ とした時は、対称な熱の流れを持ったある簡単な問題の収束が、 g を大きな値にした時に一般に収束が遅くなるという現象に対して、振動するという現象が起きた。最初の時間ステップ、および特別なノードがあっても内部熱接触をしていないという時は、いつでも $g = 0.0$ とする。そのようなノードに対する最終の正しい温度が最初の繰返しで与えられる。

(H-2-1)~(H-2-3)の置換えをして、 $\Delta T_n^{(p+1)}$ について表わして、最後に Z_n を置換えると次式ようになる。

$$\begin{aligned} \Delta T_n^{(p+1)} = & \left\{ \Delta T_{n, \text{Reg}} + \frac{f \Delta t}{C_n} \left[\sum_k^{\text{Spec}} U_{n,k} \Delta T_k^{(p)} + \sum_k^{\text{Reg}} U_{n,k} \Delta T_{k, \text{Reg}} \right. \right. \\ & + \sum_k^{\text{Spec, Up}} \frac{\overline{F}_{n,k}}{F_{n,k}} \overline{C}_k \Delta T_k^{(p)} + \sum_k^{\text{Reg, Up}} \frac{\overline{F}_{n,k}}{F_{n,k}} \overline{C}_k \Delta T_{k, \text{Reg}} \\ & \left. \left. + g Z_n \Delta T_n^{(p)} \right\} / \left[1 + \frac{f \Delta t}{C_n} (1+g) Z_n \right] \quad (\text{H-2-4}) \end{aligned}$$

最初の繰返し ($p = 0$) の時は、次の値が用いられる。

$$\Delta T_n^{(0)} = \Delta t \dot{T}_n \quad (\text{H-2-5})$$

$$\Delta T_k^{(0)} = \Delta t \dot{T}_k \quad (\text{H-2-6})$$

繰返しの間の ΔT_n の差は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} E_n^{(p+1)} = & \Delta T_n^{(p+1)} - \Delta T_n^{(p)} \\ E_n^{(p+1)} = & \frac{f \Delta t}{C_n} \left\{ \sum_k^{\text{Spec}} U_{n,k} [\Delta T_k^{(p)} - \Delta T_k^{(p-1)}] + \sum_k^{\text{Spec, Up}} \frac{\overline{F}_{n,k}}{F_{n,k}} \overline{C}_k [\Delta T_k^{(p-1)}] \right. \\ & \left. + g Z_n [\Delta T_n^{(p)} - \Delta T_n^{(p-1)}] \right\} / \left[1 + \frac{f \Delta t}{C_n} (1+g) Z_n \right] \quad (\text{H-2-8}) \end{aligned}$$

即ち

$$E_n^{(p+1)} = \frac{\frac{f \Delta t}{C_n} \left[\sum_k^{\text{Spec}} U_{n,k} E_k^{(p)} + \sum_k^{\text{Spec, Up}} \frac{\overline{F}_{n,k}}{F_{n,k}} \overline{C}_k E_k^{(p)} + g Z_n E_n^{(p)} \right]}{\left[1 + \frac{f \Delta t}{C_n} (1+g) Z_n \right]} \quad (\text{H-2-9})$$

$\Delta T_n^{(1)}$ の値は (H-2-4)~(H-2-6) 式から求められ、 $E_n^{(1)}$ は次のようになる。

$$E_n^{(1)} = \Delta T_n^{(1)} - \Delta t \dot{T}_n \quad (\text{H-2-10})$$

この時 $E_n^{(2)}$ が (H-2-9) から求められ、 $\Delta T_n^{(2)}$ が次の関係から求められる。

$$\Delta T_n^{(p+1)} = \Delta T_n^{(p)} + E_n^{(p+1)} \quad (\text{H-2-11})$$

この計算が収束条件を満足するか、あるいは80回の繰返しが行われるまで続けられる。後者の場合は、診断メッセージをプリントし、その時の時間ステップの結果は無視して、新しい時間ステップとしてその時の $\frac{1}{2}$ の値を用いて計算を続ける。もしその時間ステップが、時間ステップの最小値SMALLにすでに達していたら、別の診断メッセージをプリントして、計算を中断する。

H. 3 収束条件

すべての特別はノードの熱量の補正量と熱容量が次のように計算される。

$$\Delta H_{net}^{(p)} = \sum_n^{Spec} \bar{C}_n E_n^{(p)} \quad (\text{H-3-1})$$

$$C_{net} = \sum_n^{Spec} \bar{C}_n \quad (\text{H-3-2})$$

任意の繰返しの後で次のような条件を満足する時に繰返しは終了する。

$$\Delta H_{net}^{(p)} < 10^{-5} C_{net} T_{VARY} \quad (\text{H-3-3})$$

$$E_{n,max} < 10^{-4} T_{VARY} \quad (\text{H-3-4})$$

即ち、熱量の誤差量が、すべての特別なノードの温度を T_{VARY} だけ変化させるのに必要な熱の 10^{-5} 倍より小さく、体積ゼロを除いた特別なノードの誤差が $10^{-4} \cdot T_{VARY}$ より小さくなった時である。数百時間ステップの後では、ほとんどの問題で、系の平均温度で $0.01 T_{VARY}$ 以下、個々の温度で $0.1 \cdot T_{VARY}$ 以下という演算誤差量であり、もし表面温度(外部温度)が固定されている問題であれば、さらに小さな誤差量となる。少ない計算時間で定常状態とするために、非定常問題で用いられるような値より大きな T_{VARY} の値を指定することもできる。ただし、外部との熱接触を持たない系においては、最終の平衡温度が徐々に偏向していったり、また各時間ステップ内で、さらに繰返しを要するために、大きな累積誤差を生ずることを招いたりするので注意を要する。

H. 4 ノードの最終の補正

上述のような反復手順ですべての特別なノードの温度変化が最終的に求められた後で、特別なノードと接触しているふつうのノードのすべてに対して最終の補正をしなければならない。これは正しい熱収支を得るために必要であり、ふつうのノードについてまとめると次式になる。

$$\Delta T_{n,Reg,Corr} = \Delta T_{n,Reg} + \frac{f \Delta t}{C_n} \left[\sum_k^{Spec} U_{n,k} (\Delta T_k - \Delta T_{n,Reg}) - \sum_k^{Spec, Down} \bar{F}_{n,k} \bar{C}_n \Delta T_{n,Reg} \right] \quad (\text{H-4-1})$$

このような補正はまた内部熱接触や外部熱接触に関する(F-1-1)式と(G-1-1)式で計算される熱流に対しても行われる。

付録 I. 次の時間ステップの準備

I. 1 ノードの再分類

ふつうのノードから特別なノードへの再分類は BLOCK 1 の KSPEC, TVARY, および DELTO のインプット値によっている。KSPEC が負の時は, 計算の間でふつうのノードが特別なノードになることはなく, 特別なノードとなるのは, 体積ゼロのノード, 表面のノード, および BLOCK 4 で $KS \approx 0$ と指定されているノードだけである。KSPEC が正の時は, 最初の時間ステップの計算の前に, ふつうのノードの全部が特別なノードになり, 補挿係数の値もまたコントロールされる (I. 3 を参照のこと)。

最大許容時間ステップ DELTMX が使われて (I. 2 を参照のこと), DELTO より小さい各時間ステップの終りにおいて KSPEC が 0 であれば, すべてのふつうのノードの安定限界 SLIM がテストされる。 $SLIM \leq 1.8 \cdot DELTMX$ であるふつうのノードが特別なノードとして再分類される。DELTMX がいくつかのふつうのノードの最小安定限界の $\frac{2}{3}$ になると, 安定限界が最小値の 1.0 ~ 1.2 倍の値であるふつうのノードの全部が特別なノードとして再分類される。この範囲は, 非常に多くの問題の実行に関して必要な計算時間が最小になるように経験的に選ばれたものである。

TVARY の値を大きくとる程, 時間ステップの幅 (I. 2 を参照のこと) が, 系内のほとんどのノードの安定限界と比較して, 大きくなり, さらに KSPEC が 0 であれば, そのようなノードが特別なノードとして再分類される。

I. 2 時間ステップのコントロール

最小と最大の時間ステップ SMALL, DELTO, および時間ステップ当りの望みの平均最大温度変化 TVARY を指定したり, BLOCK 4 の KS を指定してあるノードを特別なノードと指定するか, BLOCK 1 でインプットする KSPEC を用いて, 計算法を選択したりすることができる。このようなことや, 他のいくつかの係数によって, 時間ステップを計算の進行につれて変化させる方法をコントロールすることができる。

最初の時間ステップ ($KCYC = 0$) は常に 10^{-12} となる。これは体積ゼロのノードを平衡にしたり, 時間微分を落ち着かせるためである。最初の時間ステップの終わりとその後の各時間ステップにおいて, 系内のふつうのノードの安定限界 τ_n (SLIM) の中から最小値 Δt_{STAB} が捜される。このことは最初の時間ステップの後では, もし安定限界とノードの分類に変化が起り得なければとばされる。そして最大許容時間ステップ DELTMX に, Δt_{STAB} , DELTO, あるいは 10^{12} のうちのいちばん小さな値の $\frac{2}{3}$ がセットされる。ただし, ふつうのノードが 10^{-10} 以下の安定限界 τ_n (SLIM) を持つべきではなく, また DELTO が 10^{-10} 以下になることはないので, DELTMX が 10^{-10} 以下になることは許されない。 $\frac{2}{3} \Delta t_{STAB}$ を用いることは, Δt_{STAB} を用いることと比べて, 分割のあらい系での時間誤差をより小さくする。最小時間ステップ SMALL には, 最初

SMALLのインプット値SMALTがセットされる。SMALLがDELTMX以上であれば、インプット値により使用する時間ステップが不安定にならないように、SMALLはDELTMXよりわずかに小さい値に減少される。SMALLにインプット値が与えられない時、系内の少くとも $\frac{1}{4}$ のノードがふつうのノードの時、そしてDELTMXが 10^{12} と等しくない時はDELTMXの $\frac{1}{1000}$ がSMALLにセットされる。

次に、最初の2回の時間ステップでの体積ゼロのノードを除いて、その時間ステップについての最大の温度変化DTEMPが求められる。またTVARYと、ある表関数の物性で起きた最大の変化率あるいは収束に要した繰返し回数の $\frac{1}{40}$ のいずれか大きい方との積DTMAXが求められる。その時次のような比 R_s が計算される。

$$R_s = TVARY / (DTEMP, DTMAX)_{\max} \quad (I-2-1)$$

R_s が0.5より小さく、かつ Δt_s が $1.01 \cdot SMALL$ より大きい時は、その時間ステップは繰返される。系内にふつうのノードがない場合は、計算がスムーズに始まるように、最初の時間ステップに関して、 R_s が $\frac{1}{100}$ 倍される。 R_s が1.0より小さければ、さらに

$$R'_s = [R_s^2, 0.5]_{\max} \quad (I-2-2)$$

R_s が1.0より大きければ

$$R'_s = [0.5(1 + R_s), 2.0]_{\min} \quad (I-2-3)$$

これらから新しい時間ステップが次の様に計算される。

$$\Delta t_{s+1} = \Delta t_s \cdot R'_s \quad (I-2-4)$$

$$\text{ただし } \begin{cases} \Delta t_{s+1} \geq SMALL & (I-2-5) \\ \Delta t_{s+1} \leq DELTMX & (I-2-6) \end{cases}$$

この方法により、最大温度変化がTVARYになるように時間ステップの大きさを連続的に調整したり、あるいは表関数の物性の最大変化が1%内になるように時間ステップを調整したり、また繰返し回数の平均が40を越えることがないように時間ステップを調整している。 R'_s の計算は Δt がこれらの制限を越えた時のその急な減少に対して、 Δt の変化がこれらの制限より小さい時にだんだん増加していくことを与えている。

BLOCK 1の Δt_p (TIMEP)のインプット値が正であれば、さらに時間ステップが調整される。これは、次の望みのプリント時間と調整された時間ステップの整数倍の値と等しくなるように、調整されていない時間ステップ $\Delta t'_{s+1}$ (DEL T)に $\frac{2}{3}$ から $\frac{3}{2}$ の間の(できるだけ1.0に近い)係数を乗じることによって行なわれる。ただし、調整された時間ステップは Δt_{\min} (SMALL)から Δt_{\max} (DELTMX)の範囲内に維持される。最初、望みのプリント時間になるように次のような計算が行なわれる。

$$\Delta t'_{rem} = [\Delta t_p (1 + |t / \Delta t_p|) - t]_{\text{modulo } \Delta t_p} \quad (I-2-7)$$

ここで縦棒は、計算値が整数となることを示している。 $\Delta t'_{rem}$ が、調整されていない時間ステップの少なくとも $\frac{2}{3}$ になるように、次のような調整を行なう。

$$\Delta t_{rem} = \Delta t'_{rem} + \Delta t_p [1 - |(\Delta t'_{rem} - \Delta t'_{s+1} / 1.5) / \Delta t_p|] \quad (I-2-8)$$

さらに次のプリント時間までの時間ステップの回数が

$$N_p = |\Delta t_{rem} / \Delta t_{s+1} + 0.5|$$

で求められ、新しい時間ステップが次のように求められる。

$$\Delta t_{s+1} = \Delta t_{rem} / N_p$$

Δt_{s+1} が SMALL より小さければ、 N_p は次に小さい整数値となる。 Δt_{s+1} が DELTMX より大きければ、 N_p は次に大きな整数値となる。その時に (I-2-6) の制限が適用される。調整の係数は常に $\frac{2}{3} \sim \frac{3}{2}$ の間にあり、もし Δt_p として比較して Δt_{s+1} が小さければ、より 1.0 に近い値に平均される。この方法により、時間ステップの連続した最小の調整が、可能である限り、望みのプリント時間を得るために SMALL と DELTMX の範囲内で行なうことができる。

最大許容時間 t_{max} (TIMAX) が指定されていると、同様に新しい時間ステップが、最後の時間ステップで t が t_{max} よりわずかに大きくなるように、次のように制限される。

$$\Delta t_{s+1} \leq t_{max} - t + 10^{-12} \quad (I-2-9)$$

増分 (10^{-12}) は、切捨ての誤差を考えている。

KSPEC が負でない場合は、安定限界が 1.8 DELTMX より小さい時のノードが、特別なノードとして再分類されているから、(I-2-8) の制限にはめったに達しない。

I. 3 時間微分の推定

温度の時間微分は、温度依存の表関数物性を求めるための、時間ステップでの平均温度を求める時に用いられ、反復熱収支計算を始めるための特別なノード内の最初の温度変化の推定値を得るために用いられる。相濃度の時間微分は、時間ステップでの相変化量の最初の推定を行うのに用いられる。反応濃度の時間微分は質量流れによる濃度変化の計算に関するノード内の平均濃度を求めるために用いられる。

次の時間ステップについての平均の時間微分は、後の時間ステップについての変化率から、各時間ステップの終りに計算される。計算は、先行した二つの時間ステップにおける最大変化率の比 R_c と、時間ステップの midpoint の間で先行した時間幅と外挿した時間幅の比 R_t を用いて行われる。

$$R_c = \left(\frac{\Delta T_{max, s-1}}{\Delta t_{s-1}} \right) \left(\frac{\Delta T_{max, s}}{\Delta t_s} \right) \quad (I-3-1)$$

$$R_t = (\Delta t_{s+1} + \Delta t_s) / (\Delta t_s + \Delta t_{s-1}), \quad 0.5 \leq R_t \leq 2.0 \quad (I-3-2)$$

R_t についての制限は、時間ステップの大きさにおける変化に制限をおくことからくる (即ち 2.0 より大きな係数ではない)。 R_c が 1.0 より大きい、即ち最大の温度変化率が減少している時は、計算は、すべての温度が同じ時間定数をもって指数関数的に平衡に達しているという仮定に基づく。その場合、次の時間ステップ Δt_{s+1} の中央における傾きと、 Δt_s と一致した時間ステップの中央における傾きの比が、次のような F_c によって与えられる。

$$F_c = R_c^{-R_t}, \quad 10^{-24} \leq F_c \leq 1 \quad (I-3-3)$$

R_c が 1.0 より小さい、即ち最大の温度変化率が増加している時は、計算は、非常に速く変化している温度が二次曲線に従っており、連続した傾き間の比がすべてのノードに関して同じであるという仮定に基づいている。その場合 F_c は次のように与えられる。

$$F_c = 1 + R_t(1 - R_c), \quad 1 \leq F_c \leq 3 \quad (I-3-4)$$

F_c の上限は R_t の値の制限からくる。これは、傾きのより大きな推定の変化となる指数関数的な増加を仮定するよりは、さらに妥当な推定である。導関数の符号が変化することはない。

時間微分は次のように計算される。

$$\dot{T}_n = F_c (\Delta T_{n,s} / \Delta t_s) \quad (I-3-5)$$

$$\dot{A}_n = F_c (\Delta A_{n,s} / \Delta t_s) \quad (I-3-6)$$

$$\dot{B}_n = F_c (\Delta B_{n,s} / \Delta t_s) \quad (I-3-7)$$

いくつかの考えられる不安定の原因に対して次のような予防策がとられる。(a)初めの2回の時間ステップについて F_c は1.0に固定される,(b)ある時間ステップが無視されたり,あるいはふつうのノードが特別なノードに再分類された後の2回の時間ステップについて F_c は1.0に固定される,(c)初期の時間ステップ($\Delta t = 10^{-12}$)については時間微分は0である,(d)体積ゼロのノードの時間微分は最初の2回の時間ステップについて0に固定される,(e)他の特別なノードの時間微分は最初の2回の時間ステップについて次のように計算される。

$$\dot{T}_{n, \text{special}} = (\Delta T_{n,s} / \Delta t_s) / (1 + \Delta t_s Z_n / \bar{C}_n) \quad (I-3-8)$$

ここで Z_n はすべての熱接続,およびそのノードが吸込側である質量流れの接続を含んだノードの全コンダクタンスである(これは特別なノードに対して Δt_s と比較して小さい安定限界をもってより正確な結果を生む),(f)時間微分は符号が変化する時はいつでも 10^{-24} が乗じられる。

これらの予防策のそれぞれは問題のいろいろな特別なタイプに関して必要であることがわかっている。

BLOCK 1のノードに正の値を指定することにより,時間微分を0に固定したまま計算することもできる。これにより精度が悪くなったり,計算時間が増加したりすることがあるが,使用する時間微分の効果を考察したり,時間微分を用いないプログラムの計算結果と比較することもできる。

I. 4 補正係数の推定

次のようなことから補挿係数 f (FOR)を用いる。

(a)温度依存の表関数物性の推算に用いる時間ステップにおける平均温度を求めるため,(b)質量流れによる濃度変化の計算に用いる平均の反応濃度を求めるため,(c)特別なノードを取りまく熱接触および質量流れの接続に関する熱流の割合を決めるのに用いられる温度を得るためにその時間ステップの始めと終りの間で補間する。

(c)の記述での使用に対して,前進,中央,後退公式に相当する f の値は,それぞれ0.0, 0.5, 1.0である。TRUMPでは, f は通常0.57から1.0の値とし連続した温度変化の比(I.3で説明している)から次のように求めている。

$$f = \left[0.57, \frac{(1.0, F_c)_{\max}}{(1.0 + F_c)} \right]_{\max} \quad (I-4-1)$$

任意のノードの時間定数((H-1-5)式)より大きい時間ステップについて, f の値が0.5かそれ以上の時のみ熱伝達差分式((H-1-2)式)が安定であるということが示される。さらに, f が0.5より大きくなければ,式の中の小さな振動は減衰されることはない。 f の最小値0.57は,数多くの問題の安定性と精度を最適にするために経験的に選ばれたものである。

(I-4-1)式の形は,温度を指数関数的に平衡に近づけていく時に正しい平均温度を得るの

に必要な補挿係数に近い f の値を与えるために選ばれたものである。即ち、傾きがある時間ステップでそれ程変化しない時は 0.5 に近い値、大きな時間ステップが平衡に近いところで使用されている時は 1.0 に近い値とする。このように中央差分式を使用する時に固有の精度が得られる。ただし、温度が急激に変化するような問題で、境界条件が急激に変化したり、温度あるいは時間依存の物性が急激に変化したりする時のそのような方程式からくる減衰できない振動は除く。補挿係数は、中央差分式を使う時に精度が失なわれるのを維持するために、平衡に近づくように、徐々に 1.0 へ向けて変化していく。前進あるいは中央差分式を使うと、通常に平衡により速く近づく。さらによりよい近似はここで述べている方法によって得られる。問題の過渡的な段階では、いくつかの時間ステップでの平均的な誤差が単一の時間ステップに関する誤差より通常はかなり小さいので、熱伝導方程式の特別な性質に使われる f の値は正確である必要はない。

起こり得る不安定性の原因に対するもうひとつの予防策として、 f の値は、初期時間ステップ ($\Delta t = 10^{-12}$) および時間ステップが無視された後の時間ステップについてはいつでも 1.0 に固定される。このことは境界条件、あるいは、温度依存、時間依存の物性の任意の変化のあとでの発散および振動の減衰((H-1-8)式を参照のこと)を除いて、小さい安定限界を持つ体積ゼロのノードと他のノードがそれらが接触しているノードと平衡に達するということを保証している。

BLOCK 1 で KSPEC = 2 として $f = 1.0$ と固定したり、KSPEC = 3 として $f = 0.5$ と固定したりすることにより、他の時間ステップで用いる f の値をコントロールすることもできる。この場合に、それぞれの結果としての計算法が後退あるいは中央となるために、最初の時間ステップの計算の前にすべてのノードが特別なノードとして再分類される。これにより通常は精度が落ちたり、計算時間が増加したりするけれども、精度の効果を考慮したり、同じ方法を用いているプログラムと比較したりすることができる。