

JAERI - M  
92-139

黒鉛酸化を伴う多成分混合気体の  
物質伝達に関する数値解析

1992年10月

小川 益郎

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 Division  
Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-  
mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

©Japan Atomic Energy Research Institute, 1992

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 いばらき印刷機

黒鉛酸化を伴う多成分混合気体の  
物質伝達に関する数値解析

日本原子力研究所東海研究所高温工学部  
小川 益郎

(1992年 8月19日受理)

本報告では、高温ガス炉の配管破断事故時における黒鉛の腐食速度や一酸化炭素の発生量を予測するため、黒鉛円管内の層流において、一酸化炭素の燃焼反応と黒鉛の固気化学反応を伴う場合の多成分混合気体（ヘリウム、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素の4成分）系の物質伝達に関する数値解析について述べる。

本数値解析では、多成分拡散係数を用いて拡散項を表し、各成分気体の質量保存式と混合気体の質量・運動量保存式を解いた。数値解法としてSIMPLE法を用いた。化学反応としては、黒鉛と酸素の反応、黒鉛と二酸化炭素の反応、一酸化炭素の燃焼反応を考慮した。基礎的な物質伝達特性を把握するため、熱伝達が共存しないよう、温度は一定とし、混合気体のエネルギー式を解かない。ただし、物質伝達がない場合の熱伝達特性を得るため、単成分の場合のエネルギー式を付加した。

本解析コードを用いて、入口レイノルズ数を50～1000、温度を800～1600°C、入口での酸素質量分率を0～0.5の範囲で、物質伝達率に及ぼす黒鉛の酸化反応や一酸化炭素の燃焼反応の影響を定性的・定量的に明らかにした。

Numerical Analysis of Mass Transfer with Graphite Oxidation  
in a Laminar Flow of Multi-component Gas Mixture  
through A Circular Tube

Masuro OGAWA

Department of High Temperature Engineering  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 19, 1992)

In the present paper, mass transfer has been numerically studied in a laminar flow through a circular graphite tube to evaluate graphite corrosion rate and generation rate of carbon monoxide during a pipe rupture accident in a high temperature gas cooled reactor. In the analysis, heterogeneous (graphite oxidation and graphite/carbon dioxide reaction) and homogeneous (carbon monoxide combustion) chemical reactions were dealt in the multi-component gas mixture; helium, oxygen, carbon monoxide and carbon dioxide.

Multi-component diffusion coefficients were used in a diffusion term. Mass conservation equations of each gas component, mass conservation equation and momentum conservation equations of the gas mixture were solved by using SIMPLE algorithm. Chemical reactions between graphite and oxygen, graphite and carbon dioxide, and carbon monoxide combustion were taken into account in the present numerical analysis. An energy equation for the gas mixture was not solved and temperature was held to be constant in order to understand basic mass transfer characteristics without heat transfer. But, an energy conservation equation for single component gas was added to know heat transfer characteristics without mass transfer.

The effects of these chemical reactions on the mass transfer coefficients were quantitatively and qualitatively clarified in the range of 50 to 1000 of inlet Reynolds numbers, 0 to 0.5 of inlet oxygen mass

fraction and 800 to 1600°C of temperature.

Keywords: High Temperature Gas Cooled Reactor, Numerical Analysis, Mass Transfer, Chemical Reactions, Laminar Flow, Multi-component Gas Mixture, Circular Graphite Tube, Pipe Rupture Accident

## 目 次

1. 緒 言 .....	1
2. 記 号 .....	3
3. 基礎方程式 .....	6
3.1 基礎方程式 .....	6
3.2 無次元化 .....	8
3.3 無次元基礎方程式 .....	10
3.4 離散式 .....	11
3.5 代数方程式の解法 .....	22
3.6 境界条件 .....	25
3.7 化学反応速度 .....	26
3.8 物質伝達率 .....	28
3.9 単成分気体のエネルギー保存式 .....	30
3.10 プログラミング .....	33
4. 結果と検討 .....	37
4.1 予備計算 .....	37
4.2 吹き出し流れの数値解析 (単成分気体の流れ) .....	38
4.3 黒鉛酸化を伴う多成分気体の数値解析 .....	41
5. まとめ .....	45
参考文献 .....	46
付録 .....	59

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Nomenclature .....	3
3. Basic Equation .....	6
3.1 Basic Equation .....	6
3.2 Dimensionless Quantity .....	8
3.3 Dimensionless Basic Equation .....	10
3.4 Discretization Equation .....	11
3.5 Solution Method of Algebraic Equation .....	22
3.6 Boundary Condition .....	25
3.7 Chemical Reaction Rate .....	26
3.8 Mass Transfer Coefficient .....	28
3.9 Energy Conservation Equation for Single Component Gas .....	30
3.10 Programming .....	33
4. Results and Discussion .....	37
4.1 Pre-calculation .....	37
4.2 Numerical Analysis of a Flow with Injection (a Single Gas Flow) .....	38
4.3 Numerical Analysis of a Multi-component Gas Flow with Graphite Oxidation .....	41
5. Concluding Remarks .....	45
References .....	46
Appendix .....	59

## 1. 緒 言

現在、日本原子力研究所では黒鉛減速・ヘリウムガス冷却型の高温工学試験研究炉 (HTTR)<sup>(1)</sup> を建設中である。HTTRは、ヘリウムガス冷却材の原子炉出口温度として、850°Cの定格運転を経て、最終的に、950°Cを得ることができる高温ガス炉である。一次冷却系における配管破断事故時<sup>(2)</sup>には、自然対流によって格納容器内の空気が原子炉圧力容器内へ侵入し、空気中の酸素と原子炉内の高温の黒鉛が反応する。この化学反応は、

- (1) 黒鉛燃料被覆材の消失による核分裂生成物の放出、
- (2) 炉心支持黒鉛材の機械強度の低下、
- (3) 発熱反応による黒鉛材の温度上昇、
- (4) 可燃性ガスである一酸化炭素の生成、

と言った事象を招く可能性がある。HTTRでは、この一次冷却系配管が破断する事故において、その事故結果を評価し、上述の事象がすべて安全基準内に収まることを既に確認している<sup>(3)</sup>。一方、事故事象の道筋をできるかぎり正確に知ることは、原子炉の安全特性を把握しておく上にも、より高精度な安全設計を行う上にも重要である。

配管破断事故時に化学反応によって消失する黒鉛の量を予測するには、酸素による黒鉛の腐食速度を知る必要がある。多孔質である黒鉛の腐食速度は、低温域では化学反応速度に等しく、中温域では黒鉛の多孔質内における酸素の拡散速度に等しく、高温域では、流体中の酸素の物質伝達過程が黒鉛の腐食速度を決める<sup>(4)</sup>。各領域は、順に、化学反応律速領域、細孔内拡散律速領域、物質伝達律速領域、と呼ばれている。

低温での化学反応律速領域では、黒鉛の腐食量は問題とならないほどわずかである。黒鉛の材質に大きく影響される中温域での腐食速度については、HTTRで用いるIG-110およびPGX黒鉛材の腐食速度が既に報告されている<sup>(5-7)</sup>。配管破断事故時の黒鉛の最高温度は、約1380°Cとなり<sup>(3)</sup>、このような高温での物質伝達律速領域における黒鉛の腐食速度を知るには、混合ガス流れにおける酸素の物質伝達率がわかればよい。酸素濃度が5% (質量分率) 程度と小さい場合には、濃度場と相似な温度場における既存の熱伝達相関式を物質伝達系に書き直し、その式から物質伝達率を求めて良いことを著者<sup>(8)</sup>は既に報告した。すなわち、この場合には、エネルギー保存式と成分気体の質量保存式は同型、境界条件も相似とみなせる。

しかしながら、HTTRの配管破断事故時には、酸素の質量分率が約20%であり、一酸化炭素の燃焼反応が起こり、主にヘリウム、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素、窒素の5種類の気体から成る混合気体系である。このような酸素の質量分率が大きい (壁面からの質量流入が大きい) 場合、一酸化炭素の燃焼と言った気相同士の化学反応が起こる場合には、成分気体の質量保存式と相似なエネルギー保存式において、その解から得られる熱伝達率に関する実験結果は少ない。また、混合気体が3成分以上から成る場合には、両保存式の拡散項が同型とはならないため、熱伝達相関式を物質伝



達相関式に変換することはできず、直接物質伝達率を求めるより他にない。しかし、黒鉛の酸化や一酸化炭素の燃焼のような化学反応を伴う多成分気体系の物質伝達に関する研究は少ない。さらに、1000°C以上の高温では、温度・速度・濃度などの局所値の分布を測定することは実験上非常に困難であり、総括的な値でさえ精度の良い実験結果を得るには限界があるため、実験結果を補うためにも数値計算が必要である。

そこで、黒鉛製円管内において、4成分の混合気体層流における物質伝達に関する数値解析を行い、入口での酸素質量分率、入口レイノルズ数、黒鉛壁温をパラメータとして、物質伝達率に及ぼす化学反応の影響を調べる。

## 2. 記 号

- $c_p$  : 定圧比熱  
 $D_{kj}$  : 多成分拡散係数  
 $D_{kj}^{(2)}$  : 2成分拡散係数  
 $Da_k$  : k成分気体のダムケラ数  $\left( = \frac{R_k d}{\rho_{in} u_{in}} \right)$   
 $Da_{k,w}$  : k成分気体の壁面ダムケラ数  $\left( = \frac{m_k}{\rho_{in} u_{in}} \right)$   
 $d$  : 等価直径  
 $f$  : 一酸化炭素と二酸化炭素のモル分率比  
 $Gr$  : グラスホフ数  $\left( = \frac{d^3 g}{\nu_{in}^2} \frac{\rho_{in} - \rho_{\infty}}{\rho_{in}} \right)$   
 $h$  : 熱伝達率  
 $J$  : 拡散流束  
 $k_+$  : 一酸化炭素の燃焼反応の速度定数  
 $M$  : 平均分子量  
 $M_k$  : k成分気体の分子量  
 $m$  : 質量流束  
 $N$  : モル濃度  
 $N$  : 物質伝達率を算出するときの質量流束  
 $Nu$  : ヌッセルト数  $\left( = \frac{q}{T_w - T_b} \right)$   
 $P$  : 無次元圧力  
 $Pr$  : プラントル数  $\left( = \frac{C_p \mu}{\lambda} \right)$   
 $p$  : 圧力  
 $q$  : 熱流束  
 $R$  : 半径方向無次元距離  
 $R^+$  : 反応速度  
 $Re$  : レイノルズ数  $\left( = \frac{\rho u d}{\mu} \right)$  もしくは、入口レイノルズ数  $\left( = \frac{\rho_{in} u_{in} d}{\mu_{in}} \right)$   
 $Re_w$  : 壁面レイノルズ数  $\left( = \frac{\rho_b v_w d}{\mu_b} \right)$

- $R_k$  : k成分気体の反応速度  
 $R_g$  : ガス定数 (=8.314)  
 $r$  : 半径方向距離  
 $Sc$  : シュミット数  $\left( = \frac{\nu}{D_{He/O_2}^{(2)}} \right)$   
 $Sh$  : シャーウッド数  $\left( = \frac{N_{dif}}{\omega_{k,b} - \omega_{k,w}} \right)$   
 $Sh^*$  : シャーウッド数  $\left( = \frac{N_{all}}{\omega_{k,b} - \omega_{k,w}} \right)$   
 $Sh_{O_2,0}$  : すべての化学反応がない場合の酸素のシャーウッド数  
 $Sh_{O_2,1}$  : 一酸化炭素の燃焼反応がない場合の酸素のシャーウッド数  
 $T$  : 温度  
 $T_k$  : 絶対温度  
 $t$  : 時間  
 $U$  : 無次元 x 方向流速  
 $u$  : x 方向流速  
 $V$  : 無次元 r 方向流速  
 $v_w$  : 壁面における無次元 r 方向流速  
 $v$  : r 方向流速  
 $v_w$  : 壁面における r 方向流速  
 $X$  : 無次元 x 方向距離  
 $x$  : x 方向距離  
 $x^*$  : 無次元 x 方向距離  $\left( = \frac{x}{R_e S_c} \right)$   
  
 $\beta$  : 物質伝達率  
 $\gamma$  : モル分率  
 $\lambda$  : 熱伝導率  
 $\mu$  : 粘性係数  
 $\nu$  : 動粘性係数  
 $\rho$  : 密度  
 $\tau$  : 無次元時間  
 $\phi$  : 変数  
 $\omega$  : 質量分率  
 $\Theta$  : 無次元温度

以上の記号のうち次元を有するものはすべて、SI単位系を用いた。

## 添字

b	:	バルク値
c	:	定数值
k	:	k成分気体 (k = 1 : He, k = 2 : O <sub>2</sub> , k = 3 : CO, k = 4 : CO <sub>2</sub> )
w	:	壁面值
ref	:	参照値
∞	:	周囲流体値
dif	:	拡散流束
all	:	全質量流束

### 3. 基礎方程式

#### 3.1 基礎方程式

非定常軸対称流において、混合気体の質量保存式と運動量保存式、ならびに各成分気体の質量保存式は以下のとおりである。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = 0 \quad (3-1)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \\ & \quad + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} (rv) \right] \right\} \\ & \quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right\} - \rho g \end{aligned} \quad (3-2)$$

$$\begin{aligned} & \rho \left( \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial r} \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\mu v}{r^2} \\ & \quad + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right] \right\} \\ & \quad + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{v}{r} \frac{\partial \mu}{\partial r} \end{aligned} \quad (3-3)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_k u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho_k v) = -\text{div } J_k + R_k \quad (3-4)$$

混合気体が理想気体であることを仮定して、混合気体の密度は、次式の状態方程式から計算する。

$$\rho = \frac{PM}{R_g T_k} \quad (3-5)$$

ここで、混合気体の平均分子量Mは、

$$\frac{1}{M} = \sum_j \frac{\omega_j}{M_j} \quad (3-6)$$

である。

(3-4) 式の k 成分気体の拡散流束  $J_k$  は、次式のように、普通拡散、熱拡散、圧力拡散、強制拡散から成る<sup>(8)</sup>。

$$J_k = J_k^{(n)} + J_k^{(T)} + J_k^{(P)} + J_k^{(f)} \quad (3-7)$$

$$J_k^{(n)} = \frac{N^2}{\rho R_g T_k} \sum_{i=1}^n M_i M_k D_{ki} \left[ \gamma_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left( \frac{\partial \bar{G}_i}{\partial x_j} \right)_{T, P, \gamma_m} \nabla \gamma_j \right] \quad (3-8)$$

$$J_k^{(T)} = -D_k^{(T)} \nabla_{1n} T_k \quad (3-9)$$

$$J_k^{(P)} = \frac{N^2}{\rho R_g T_k} \sum_{i=1}^n M_i M_k D_{ki} \left[ \gamma_i M_i \left( \frac{\bar{V}_i}{M_i} - \frac{1}{\rho} \right) \nabla P \right] \quad (3-10)$$

$$J_k^{(f)} = -\frac{N^2}{\rho R_g T_k} \sum_{j=1}^n M_i M_k D_{ki} \left[ \gamma_i M_i \left( \mathbf{g}_i - \sum_{j=1}^n \frac{\rho_j}{\rho} \mathbf{g}_j \right) \right] \quad (3-11)$$

本解析では、混合気体のエネルギー方程式を扱っていない。黒鉛の酸化反応や一酸化炭素の燃焼反応など吸・発熱反応を扱うが、物質伝達と熱伝達が共存する場合には、現象がより複雑となるため、まず、本報告では、熱伝達が共存しない物質伝達だけの場合を扱い、その基本的特性を把握することとした。別途計画中の対応する実験においても、黒鉛円管の肉厚をある程度厚くし、電気ヒータの電力を制御することによって、黒鉛管壁を一定温度に保持することが可能であり、ほぼ熱伝達のない状況を達成できると考えられる。(3-9) 式からわかるように、混合気体に温度分布がなければ、熱拡散(ソレー効果)の項を無視することができる。また、円管内層流の本解析では、圧力勾配も小さく、(3-10) 式の圧力拡散の項も無視することができる。(3-11) 式の強制拡散は、本体系には存在しないので、結局、拡散流束は、普通拡散の項だけで表すことができる。普通拡散の項は、理想気体を仮定すると次式のように書ける。

$$J_k = \frac{\rho M_k}{M^2} \sum_j \{ D_{kj} \nabla (M \omega_j) \} \quad (3-12)$$

(3-4) 式及び(3-12) 式の多成分拡散係数は、次のような性格を持っている。

$$\left. \begin{aligned} D_{ii} &= 0, \\ D_{ij} &\neq D_{ji}, \\ \sum_{i=1}^n (M_i M_n D_{in} - M_i M_k D_{ik}) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3-13)$$

今、4成分系を考えると、(3-12) 式は、

$$\left. \begin{aligned} J_1 &= \frac{\rho M_1}{M^2} \{ D_{12} \nabla (M \omega_2) + D_{13} \nabla (M \omega_3) + D_{14} \nabla (M \omega_4) \} \\ J_2 &= \frac{\rho M_2}{M^2} \{ D_{21} \nabla (M \omega_1) + D_{23} \nabla (M \omega_3) + D_{24} \nabla (M \omega_4) \} \end{aligned} \right\} \quad (3-14)$$

$$\begin{aligned} J_3 &= \frac{\rho M_3}{M^2} \{ D_{31} \nabla(M\omega_1) + D_{32} \nabla(M\omega_2) + D_{34} \nabla(M\omega_4) \} \\ J_4 &= \frac{\rho M_4}{M^2} \{ D_{41} \nabla(M\omega_1) + D_{42} \nabla(M\omega_2) + D_{43} \nabla(M\omega_3) \} \end{aligned}$$

となる。多成分系の拡散においては、各成分気体の拡散流束の式は、自分自身の質量分率を含んでいないのが特徴である。以上より、(3-4)式の拡散項は、

$$\begin{aligned} \operatorname{div} J_k &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\rho M_k}{M^2} \left\{ \sum_l D_{kl} \frac{\partial}{\partial x} (M\omega_l) \right\} \right] \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\rho M_k}{M^2} \left\{ \sum_l D_{kl} \frac{\partial}{\partial r} (M\omega_l) \right\} \right] \end{aligned} \quad (3-15)$$

となる。(3-4)式には、 $\operatorname{div} J_k$  に負号がついている。2成分系の場合には、この負号がとれることを以下に示しておく。

$$J_A = \frac{\rho M_A}{M^2} D_{AB} \nabla(M\omega_B) \quad (3-16)$$

ここで、 $1/M = \left( \frac{\omega_A}{M_A} + \frac{\omega_B}{M_B} \right)$  であるので、これを  $\nabla(M\omega_B)$  に代入し、 $\omega_A + \omega_B = 1$  を用いる。と、

$$\nabla(M\omega_B) = \frac{M^2}{M_A} \nabla\omega_B$$

となる。したがって、

$$J_A = \frac{\rho M_A}{M^2} D_{AB} \frac{M^2}{M_A} \nabla\omega_B = \rho D_{AB} \nabla\omega_B$$

となり、 $\omega_B = 1 - \omega_A$  より、

$$J_A = -\rho D_{AB} \nabla\omega_A \quad (3-17)$$

となって、 $-\operatorname{div} J_A = \operatorname{div}(\rho D_{AB} \nabla\omega_A)$  となり、2成分系拡散の場合には負号が消える。なお、質量分率の総和は、質量分率の定義からも明らかなように、 $\sum_k \omega_k = 1$  である。

$$\left( \omega_k = \rho_k / \rho, \quad \sum_k \rho_k = \rho \right)$$

### 3.2 無次元化

基礎方程式(3-1)～(3-4)について、時・空間、変数、物性値を以下のように無次元化する。

<時空間>

$$\left. \begin{aligned} X &= \frac{x}{d}, \\ R &= \frac{r}{d}, \\ \tau &= \frac{t}{\frac{d}{u_{in}}} \end{aligned} \right\} \quad (3-18)$$

<変数>

$$\left. \begin{aligned} U &= \frac{u}{u_{in}}, \\ V &= \frac{v}{u_{in}}, \\ P &= \frac{p'}{\rho_{in} u_{in}^2}, \\ \rho^* &= \frac{\rho}{\rho_{in}}, \\ \omega_k &= \frac{\rho_k}{\rho} \end{aligned} \right\} \quad (3-19)$$

ここで、 $p' = p - p_{\infty}$ ,  $\partial p_{\infty} / \partial x = -\rho_{\infty} g$  であり、 $p'$  は、静止流体圧基準の圧力である。

<物性値>

$$\left. \begin{aligned} \mu^* &= \frac{\mu}{\mu_{in}}, \\ D_{k\ell}^* &= \frac{D_{k\ell}}{D_{12,in}^{(2)}}, \\ \Delta\rho^* &= \frac{\rho - \rho_{\infty}}{\rho_{in} - \rho_{\infty}} \end{aligned} \right\} \quad (3-20)$$

無次元数を以下のように定義する。

$$\left. \begin{aligned} Re &= \frac{\rho_{in} u_{in} d}{\mu_{in}}, \\ Sc &= \frac{\mu_{in}}{\rho_{in} D_{12,in}} \end{aligned} \right\} \quad (3-21)$$



$$\left. \begin{aligned} Gr &= \frac{d^3 g}{\nu_{in}^2} \frac{\rho_{in} - \rho_{\infty}}{\rho_{in}}, \\ Da_k &= \frac{R_k d}{\rho_{in} u_{in}}, \end{aligned} \right\}$$

### 3.3 無次元基礎方程式

(3-18) ~ (3-21) 式の無次元式によって, (3-1) ~ (3-4) 式の基礎方程式を無次元化する。混合気体の質量保存式, 運動量保存式, 各成分気体の質量保存式の無次元式を以下に示す。

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial X} (\rho^* U) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (R \rho^* V) = 0 \quad (3-22)$$

$$\begin{aligned} & \rho^* \left( \frac{\partial U}{\partial \tau} + U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial R} \right) \\ &= -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \left( \mu^* \frac{\partial U}{\partial X} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( \mu^* R \frac{\partial U}{\partial R} \right) \right\} \\ &+ \frac{1}{3Re} \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \mu^* \left[ \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (RV) \right] \right\} \\ &+ \frac{1}{Re} \left\{ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( \mu^* R \frac{\partial V}{\partial X} \right) - \frac{\partial}{\partial X} \left[ \frac{\mu^*}{R} \frac{\partial}{\partial R} (RV) \right] \right\} \\ &- \frac{Gr}{Re^2} \Delta \rho^* \end{aligned} \quad (3-23)$$

$$\begin{aligned} & \rho^* \left( \frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial R} \right) \\ &= -\frac{\partial P}{\partial R} + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \left( \mu^* \frac{\partial V}{\partial X} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( \mu^* R \frac{\partial V}{\partial R} \right) - \frac{\mu^* V}{R^2} \right\} \\ &+ \frac{1}{3Re} \frac{\partial}{\partial R} \left\{ \mu^* \left[ \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial X} (RV) \right] \right\} \\ &+ \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \left( \mu^* \frac{\partial U}{\partial R} \right) - \frac{\partial}{\partial R} \left( \mu^* \frac{\partial U}{\partial X} \right) - \frac{V}{R} \frac{\partial \mu^*}{\partial R} \right\} \end{aligned} \quad (3-24)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (\omega_k \rho^*)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial X} (\rho^* \omega_k U) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (R \rho^* \omega_k V) \\ &= -\frac{1}{Re Sc} \left[ \frac{\partial}{\partial X} \left\{ \frac{\rho^* M_k}{M^2} \sum_l \left( D_{kl}^* \frac{\partial (M \omega_l)}{\partial X} \right) \right\} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left\{ R \frac{\rho^* M_k}{M^2} \sum_l \left( D_{kl}^* \frac{\partial (M \omega_l)}{\partial R} \right) \right\} \\
& + Da_k \tag{3-25}
\end{aligned}$$

ここで、(3-23) と (3-24) 式の運動量保存式の左辺について、(3-22) 式の質量保存式を用いて、次の保存形に書き直す。

$$(3-23) \text{ 式の左辺} = \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* U) + \frac{\partial}{\partial X} (\rho^* U U) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (R \rho^* V U)$$

$$(3-24) \text{ 式の左辺} = \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* V) + \frac{\partial}{\partial X} (\rho^* U V) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (R \rho^* V V)$$

### 3.4 離散式

無次元基礎方程式 (3-22) ~ (3-25) 式の記号を簡単のために、以下のように書き直す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v) = 0 \tag{3-26}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v u) \\
& = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right\} \\
& \quad + \frac{1}{3Re} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right] \right\} \\
& \quad + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu}{r} (rv) \right] \right\} \\
& \quad - \frac{Gr}{Re^2} \Delta \rho^* \tag{3-27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v^2) \\
& = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\mu v}{r^2} \right\} \\
& \quad + \frac{1}{3Re} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \mu \left[ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right] \right\} \\
& \quad + \frac{1}{Re} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{v}{r} \frac{\partial \mu}{\partial r} \right\} \tag{3-28}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\omega_k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\omega_k) \\
 &= -\frac{1}{\text{ReSc}} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\rho M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell} \frac{\partial M\omega_{\ell}}{\partial x} \right) \right\} \right] \\
 & \quad + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\rho M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell} \frac{\partial M\omega_{\ell}}{\partial r} \right) \right] + \text{Da}_k
 \end{aligned} \tag{3-29}$$

以上の式の離散化をSIMPLE法にて、以下のコントロールボリュームで行う。<sup>(10)</sup>

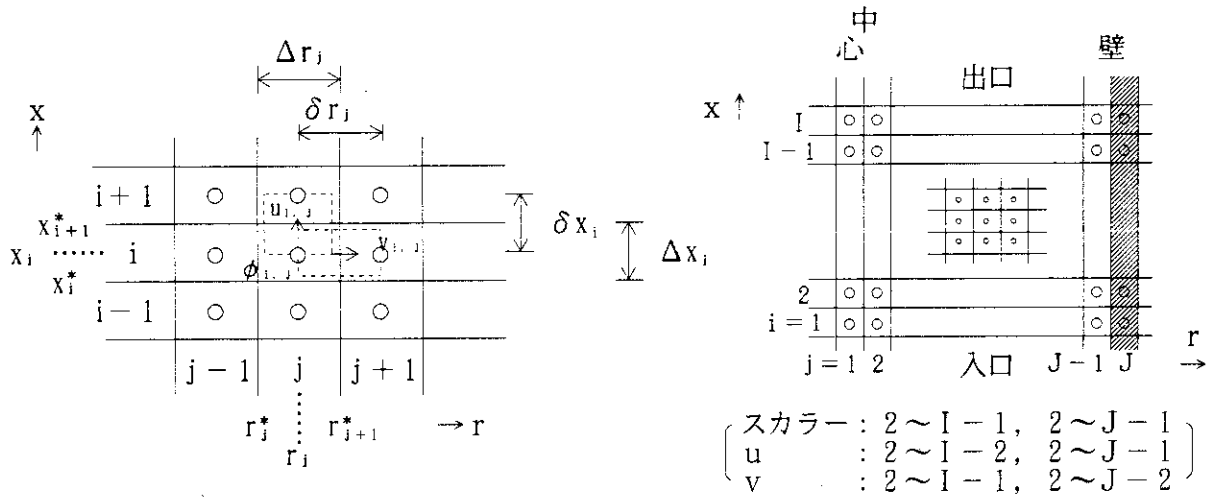


図3.1 コントロールボリュームとスタガードメッシュ

図3.1において、

$$\left. \begin{aligned}
 \Delta x_i &= x_{i+1}^* - x_i^* \\
 \Delta r_j &= r_{j+1}^* - r_j^*
 \end{aligned} \right\} \tag{3-30}$$

$$\left. \begin{aligned}
 x_i &= x_i^* + \frac{\Delta x_i}{2} \\
 r_j &= r_j^* + \frac{\Delta r_j}{2}
 \end{aligned} \right\} \tag{3-31}$$

$$\left. \begin{aligned}
 \delta x_i &= x_{i+1} - x_i \\
 \delta r_j &= r_{j+1} - r_j
 \end{aligned} \right\} \tag{3-32}$$

である。質量分率は、スカラーコントロールボリューム（図3.1中の実線で囲まれた1区画）で、x方向の流速には、uコントロールボリューム（図3.1中の破線で囲まれた1区画で、流速uを囲んでいる区画）で、r方向の流速vは、vコントロールボリューム（図3.1中の破線で囲まれた1

区画で、流速  $v$  を囲んでいる区画) で、離散化する。図 3.1 に示したように、スカラーは、ノード  
 点に、流速  $u$  と  $v$  は、ノードとノードの境界面上にとる。

スカラー、 $u$ 、 $v$  の各コントロールボリュームの体積は、次式で表わされる。

$$\left. \begin{aligned} \Delta V_{s_{i,j}} &= r_j \Delta r_j \Delta x_i 2\pi \\ \Delta V_{u_{i,j}} &= r_j \Delta r_j \delta x_i 2\pi \\ \Delta V_{v_{i,j}} &= r_{j+1}^* \delta r_j \Delta x_i 2\pi \end{aligned} \right\} \quad (3-33)$$

拡散項等の係数 (粘性係数, 多成分拡散係数) については、調和平均をとり、他の係数, 変数につ  
 いては、算術平均をとる。ここでは、不等間隔メッシュを考える。

混合気体の質量保存式 (3-26) 式をスカラーコントロールボリュームで積分する。

$$\left\{ \frac{\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} + \frac{\rho_{i+\frac{1}{2},j} u_{i,j} - \rho_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-1,j}}{\Delta x_i} \right. \\ \left. - \frac{r_{j+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j} - r_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-1}}{r_j \Delta r_j} \right\} \Delta V_{s_{i,j}} = 0 \quad (3-34)$$

$x$  方向の運動量保存式 (3-27) 式を  $u$  コントロールボリュームで積分する。

$$u_{i,j} = \frac{1}{a_{i,j}} \left( \overset{\text{上}}{a_{i,j}} u_{i+1,j} + \overset{\text{下}}{a_{i,j}} u_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{a_{i,j}} u_{i,j+1} \right. \\ \left. + \overset{\text{左}}{a_{i,j}} u_{i,j-1} + b \right) + e_{i,j} (p_{i,j} - p_{i+1,j}) \quad (3-35)$$

ここで、

$$a_{i,j} = \left( \frac{1}{\Delta t} \rho_{i+\frac{1}{2},j} + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right) \Delta V_{u_{i,j}} \\ + \overset{\text{上}}{a_{i,j}} + \overset{\text{下}}{a_{i,j}} + \overset{\text{右}}{a_{i,j}} + \overset{\text{左}}{a_{i,j}} \quad (3-36)$$

$$\overset{\text{上}}{a_{i,j}} = \left\{ \frac{1}{\text{Re}} \left( D_{i+1,j}^+ + D_{i+1,j} C_{x1} \right) + \left| \left[ -F_{i+\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \right\} \Delta V_{u_{i,j}} \quad (3-37)$$

$$\overset{\text{下}}{a_{i,j}} = \left\{ \frac{1}{\text{Re}} \left( D_{i,j}^+ + D_{i,j} C_{x1} \right) + \left| \left[ F_{i-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \right\} \Delta V_{u_{i,j}} \quad (3-38)$$

$$\overset{\text{右}}{a_{i,j}} = \left\{ \frac{1}{\text{Re}} \left( D_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \left| \left[ -F_{j+\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \right) \right\} \Delta V_{u_{i,j}} \quad (3-39)$$

$$\overset{\text{左}}{a_{i,j}} = \left\{ \frac{1}{\text{Re}} \left( D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} + \left| \left[ F_{j-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \right) \right\} \Delta V_{u_{i,j}} \quad (3-40)$$

$$\left. \begin{aligned}
 F_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\rho_{i+1,j} u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta x_i} \\
 F_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\rho_{i,j} u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta x_i} \\
 F_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{r_{j+1}^* \rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} v_{i+\frac{1}{2},j}}{r_j \Delta r_j} \\
 F_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{r_j^* \rho_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} v_{i+\frac{1}{2},j-1}}{r_j \Delta r_j}
 \end{aligned} \right\} (3-41)$$

$$\left. \begin{aligned}
 D_{i+1,j} &= \frac{\mu_{i+1,j}}{\delta x_i \Delta x_{i+1}} \\
 D_{i,j} &= \frac{\mu_{i,j}}{\delta x_i \Delta x_i} \\
 D_{i+1,j}^+ &= D_{i+1,j} A(\text{Pe}_{i+1,j}) \\
 D_{i,j}^+ &= D_{i,j} A(\text{Pe}_{i,j}) \\
 \text{Pe}_{i+1,j} &= \frac{F_{i+\frac{1}{2}}}{D_{i+1,j}} \cdot \text{Re} \\
 \text{Pe}_{i,j} &= \frac{F_{i-\frac{1}{2}}}{D_{i,j}} \cdot \text{Re} \\
 A(\text{Pe}) &= \left[ \left[ (1 - 0.1 |\text{Pe}|)^5, 0 \right] \right]
 \end{aligned} \right\} (3-42)$$

$$\left. \begin{aligned}
 D_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{r_{j+1}^* \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{r_j \Delta r_j \delta r_j} \\
 D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} &= \frac{r_j^* \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{r_j \Delta r_j \delta r_{j-1}} \\
 D_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^+ &= D_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} A(\text{Pe}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) \\
 D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^+ &= D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} A(\text{Pe}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}) \\
 \text{Pe}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} &= \frac{F_{j+\frac{1}{2}}}{D_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} \text{Re} \\
 \text{Pe}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} &= \frac{F_{j-\frac{1}{2}}}{D_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}} \cdot \text{Re}
 \end{aligned} \right\} (3-43)$$

$$\begin{aligned}
 b = & \left( \frac{Cx_2}{Re} \frac{1}{\delta x_j r_j \Delta r_j} \left\{ \mu_{i+1,j} \left( r_{j+1}^* v_{i+1,j} - r_j^* \cdot v_{i+1,j-1} \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. - \mu_{i,j} \left( r_{j+1}^* v_{i,j} - r_j^* \cdot v_{i,j-1} \right) \right\} \right. \\
 & + \frac{Cx_3}{Re} \frac{1}{\delta x_j r_j \Delta r_j} \left\{ r_{j+1}^* \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} (v_{i+1,j} - v_{i,j}) \right. \\
 & \left. - r_j^* \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} (v_{i+1,j-1} - v_{i,j-1}) \right\} \\
 & \left. + Cx_4 \frac{Gr}{Re^2} \Delta \rho_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{1}{\Delta t} \rho_{i+\frac{1}{2},j}^{n-1} \cdot u_{i,j}^{n-1} \right\} \Delta V u_{i,j} \quad (3-44)
 \end{aligned}$$

$$e_{i,j} = \frac{1}{a_{i,j} \delta x_i} \Delta V u_{i,j} \quad (3-45)$$

(3-35) 式の右辺の第1項を  $\hat{u}_{i,j}$  と書くと、u速度補正式が得られる。

$$u_{i,j} = \hat{u}_{i,j} + e_{i,j} (p_{i,j} - p_{i+1,j}) \quad (3-46)$$

r方向の運動量保存式(3-28)式をvコントロールボリュームで積分する。

$$\begin{aligned}
 & = \frac{1}{A_{i,j}} \left( A_{i,j}^{\uparrow} \cdot v_{i+1,j} + A_{i,j}^{\downarrow} v_{i-1,j} + A_{i,j}^{\text{右}} v_{i,j+1} + A_{i,j}^{\text{左}} v_{i,j-1} \right. \\
 & \left. + B \right) + E_{i,j} (p_{i,j} - p_{i,j+1}) \quad (3-47)
 \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 A_{i,j} = & \left( \frac{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right) \Delta V v_{i,j} \\
 & + A_{i,j}^{\uparrow} + A_{i,j}^{\downarrow} + A_{i,j}^{\text{右}} + A_{i,j}^{\text{左}} \\
 & + \left[ \frac{1}{Re} \frac{\mu_{i,j+\frac{1}{2}}}{\left( r_{j+1}^* \right)^2} \right. \\
 & + \frac{Cr_2}{Re} \left( \frac{\mu_{i,j}}{r_j \delta r_j} - \frac{\mu_{i,j+1}}{r_{j+1} \delta r_j} \right) \\
 & \left. + \frac{Cr_3}{Re} \frac{\mu_{i,j+1} - \mu_{i,j}}{r_{j+1}^* \delta r_j} \right] \Delta V v_{i,j} \quad (3-48)
 \end{aligned}$$

$$A_{i,j}^{\pm} = \left\{ \left[ -F_{i+\frac{1}{2}}, 0 \right] + \frac{D_{i+\frac{1}{2}}^+}{Re} \right\} \Delta V v_{i,j} \quad (3-49)$$

$$A_{i,j}^{\bar{r}} = \left\{ \left| [F_{i-\frac{1}{2}}, 0] \right| + \frac{D_{i-\frac{1}{2}}^+}{\text{Re}} \right\} \Delta V_{v_{i,j}} \quad (3-50)$$

$$A_{i,j}^{\text{右}} = \left\{ \left| [-F_{j+\frac{1}{2}}, 0] \right| + \frac{D_{j+\frac{1}{2}}^+}{\text{Re}} + \frac{Cr_2}{\text{Re}} \frac{\mu_{i,j+1} r_{j+2}^*}{r_{j+1} \Delta r_{j+1} \delta r_j} \right\} \Delta V_{v_{i,j}} \quad (3-51)$$

$$A_{i,j}^{\text{左}} = \left\{ \left| [F_{j-\frac{1}{2}}, 0] \right| + \frac{C_{j-\frac{1}{2}}^+}{\text{Re}} + \frac{Cr_2}{\text{Re}} \frac{\mu_{i,j} r_j^*}{r_j \Delta r_j \delta r_j} \right\} \Delta V_{v_{i,j}} \quad (3-52)$$

$$\left. \begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \cdot u_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \\ F_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \cdot u_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i} \\ F_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{r_{j+1} \rho_{i,j+1} v_{i,j+\frac{1}{2}}}{r_{j+1}^* \delta r_j} \\ F_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{r_j \rho_{i,j} v_{i,j-\frac{1}{2}}}{r_{j+1}^* \delta r_j} \end{aligned} \right\} \quad (3-53)$$

$$\left. \begin{aligned} D_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i \delta x_i} \\ D_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i \delta x_{i-1}} \\ D_{i+\frac{1}{2}}^+ &= D_{i+\frac{1}{2}} \cdot A(\text{Pe}_{i+\frac{1}{2}}) \\ D_{i-\frac{1}{2}}^+ &= D_{i-\frac{1}{2}} \cdot A(\text{Pe}_{i-\frac{1}{2}}) \\ \text{Pe}_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{F_{i+\frac{1}{2}}}{D_{i+\frac{1}{2}}} \cdot \text{Re} \\ \text{Pe}_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{F_{i-\frac{1}{2}}}{D_{i-\frac{1}{2}}} \cdot \text{Re} \end{aligned} \right\} \quad (3-54)$$

$$\left. \begin{aligned} D_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{r_{j+1} \mu_{i,j+1}}{r_{j+1}^* \delta r_j \Delta r_{j+1}} \\ D_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{r_j \mu_{i,j}}{r_{j+1}^* \delta r_j \Delta r_j} \\ D_{j+\frac{1}{2}}^+ &= D_{j+\frac{1}{2}} A(\text{Pe}_{j+\frac{1}{2}}) \end{aligned} \right\} \quad (3-55)$$

$$\left. \begin{aligned} D_{j-\frac{1}{2}}^+ &= D_{j-\frac{1}{2}} A(\text{Pe}_{j-\frac{1}{2}}) \\ \text{Pe}_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{F_{j+\frac{1}{2}}}{D_{j+\frac{1}{2}}} \cdot \text{Re} \\ \text{Pe}_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{F_{j-\frac{1}{2}}}{D_{j-\frac{1}{2}}} \cdot \text{Re} \end{aligned} \right\} \quad (3-55)$$

$$\begin{aligned} B &= \left[ \frac{1}{\Delta t} \rho_{i,j+\frac{1}{2}}^{n-1} \cdot v_{i,j}^{n-1} \right. \\ &\quad + \frac{Cr_1}{\text{Re}} \left\{ \frac{\mu_{i,j+1}}{\delta r_j \Delta x_i} (u_{i,j+1} - u_{i-1,j+1}) - \frac{\mu_{i,j}}{\delta r_j \Delta x_i} (u_{i,j} - u_{i-1,j}) \right\} \\ &\quad + \frac{Cr_3}{\text{Re}} \left\{ \frac{\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i \delta r_j} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) - \frac{\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta x_i \delta r_j} (u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j}) \right\} \Big] \\ &\quad \times \Delta V v_{i,j} \end{aligned} \quad (3-56)$$

$$E_{i,j} = \frac{1}{A_{i,j} \delta r_j} \Delta V v_{i,j} \quad (3-57)$$

(3-47) 式の右辺第1項を  $\hat{v}_{i,j}$  と書くことによって、次式の  $v$  速度補正式を得る。

$$v_{i,j} = \hat{v}_{i,j} + E_{i,j}(P_{i,j} - P_{i,j+1}) \quad (3-58)$$

運動量保存式の対流項では、1次の風上差分により離散化している。式中の記号  $[[X, Y]]$  は、 $X$  と  $Y$  のうちのより大きな値を採ることを意味する。粘性項については、Patankarのべき乗法<sup>(10)</sup>を用いた。変数の右肩の  $(n-1)$  は、1つ前の時間ステップでの値を示している。式中の添字の  $i$  及び  $j$  に続く「 $+\frac{1}{2}$ 」及び「 $-\frac{1}{2}$ 」は、次のように定義した。「+」記号は、各座標の正方向、「-」記号は、負方向を示す。「 $\frac{1}{2}$ 」は、スカラー量においては、コントロールボリュームの境界面における値を示し、ベクトル量においては、コントロールボリュームのノード点における値を示している。

式中の  $Cx_1, Cx_2, Cx_3, Cx_4, Cr_1, Cr_2, Cr_3$  は定数であり、これらの定数を下表の値に設定することにより、圧縮性などの効果を考慮できるようにした。



表3.1 圧縮性, 粘性, 浮力の計算定数

	$C_{X_1}$	$C_{X_2}$	$C_{X_3}$	$C_{r_1}$	$C_{r_2}$	$C_{r_3}$
圧縮性&粘性可変	$\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	1	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	1
圧縮性&粘性一定	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	0
非圧縮&粘性一定	0	0	0	0	0	0

	$C_{X_4}$
浮力項あり&上向流	-1
浮力項あり&下向流	1
浮力項なし	0

表3.1のあらゆる定数を零にしても, 各ノード点における物性値を繰り返えし計算のなかで計算させることができるようにした。

表3.2に, SIMPLE法, SIMPLER法, SIMPLEST/ANL法のアルゴリズムを比較する<sup>(10)</sup>。

以下に圧力補正方程式を示す。まず, (3-35)式と(3-47)式の運動量保存式と解いて得られた速度場を $u^*_{i,j}$ ,  $v^*_{i,j}$ と表す。一方質量保存式を満たす速度場 $u^*_{i,j}$ を

$$u_{i,j} = u^*_{i,j} + u'_{i,j} \tag{3-59}$$

$$v_{i,j} = v^*_{i,j} + v'_{i,j} \tag{3-60}$$

で表わし, これを(3-35), (3-47)式に代入する。圧力についても,

$$P_{i,j} = P^*_{i,j} + P'_{i,j} \tag{3-61}$$

とする。 $u^*_{i,j}$  と  $v^*_{i,j}$  が(3-35)と(3-47)式の解であることより, (3-59)と(3-61)式を(3-35)式に代入すると,

$$a_{i,j} u'_{i,j} = \overset{\uparrow}{a}_{i,j} u'_{i+1,j} + \overset{\downarrow}{a}_{i,j} u'_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{a}_{i,j} u'_{i,j+1} + \overset{\text{左}}{a}_{i,j} u'_{i,j-1} + a_{i,j}^0 + \frac{\Delta V u_{i,j}}{\delta x_j} (P'_{i,j} - P'_{i+1,j})$$

が得られる。ここで,

$$a_{i,j} u'_{i,j} \simeq \frac{\Delta V u_{i,j}}{\delta x_i} (P'_{i,j} - P'_{i+1,j}) \tag{3-62}$$

表3.2 SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEST/ANL 法の計算手順

SIMPLE法	SIMPLER法	SIMPLEST/ANL法
1. 推測した圧力場 $P_{i,j}^*$ 。 2. $P_{i,j}^*$ を用いて、運動量保存式を解いて、 $u_{i,j}^*, v_{i,j}^*$ を得る。 3. $u_{i,j}^*, v_{i,j}^*$ を用いて圧力補正方程式の係数を算出する。 4. 圧力補正方程式を解き、補正圧力 $P'_{i,j}$ を得る。 5. $P'_{i,j}$ によって、 $u_{i,j}^*, v_{i,j}^*$ を補正し、新しい速度場 $u_{i,j}$ と $v_{i,j}$ を得る。 6. 他のスカラー方程式を解く。 7. $(P_{i,j}^* + P'_{i,j})$ を $P_{i,j}^*$ とし、収束判定。 未収束の場合、2に戻る。	1. 推測した速度場 $\hat{u}_{i,j}, \hat{v}_{i,j}$ 2. $\hat{u}_{i,j}, \hat{v}_{i,j}$ を用いて、圧力方程式の係数を算出。 3. 圧力方程式を解き、圧力場 $P_{i,j}$ を得る。 4. $P_{i,j}$ を用いて、同左。 5. 同左。 6. 同左。 7. 同左。 8. 同左。 9. $u_{i,j}, v_{i,j}$ をそれぞれ、 $\hat{u}_{i,j}, \hat{v}_{i,j}$ とし、収束判定。 未収束の場合、2に戻る。	1. 同左。 2. 同左。 3. 同左。 4. $P'_{i,j}$ によって、 $\hat{u}_{i,j}$ と $\hat{v}_{i,j}$ を補正し、 $u_{i,j}$ と $v_{i,j}$ を得る。 5. 同左。 6. 同左。

と近似し、同様にして、

$$A_{i,j} v_{i,j} \simeq \frac{\Delta V v_{i,j}}{\delta r_j} (P'_{i,j} - P'_{i,j+1}) \quad (3-63)$$

と近似する。質量保存式 (3-34) 式に、(3-59) と (3-60) 式を代入し、 $u_{i,j}$  と  $v_{i,j}$  に、(3-62) と (3-63) 式を代入すると、次式のような圧力補正方程式を得る。

$$h_{i,j} P'_{i,j} = h_{i,j}^{\uparrow} P'_{i+1,j} + h_{i,j}^{\downarrow} P'_{i-1,j} + h_{i,j}^{\text{右}} P'_{i,j+1} + h_{i,j}^{\text{左}} P'_{i,j-1} + h_{i,j}^0 \quad (3-64)$$

ここで、

$$h_{i,j} = h_{i,j}^{\uparrow} + h_{i,j}^{\downarrow} + h_{i,j}^{\text{右}} + h_{i,j}^{\text{左}} \quad (3-65)$$

$$\left. \begin{aligned}
 h_{i,j}^{\uparrow} &= \frac{\rho_{i+\frac{1}{2},j} \Delta V v_{i,j} \Delta V s_{i,j}}{a_{i,j} \delta x_i \Delta x_i} \\
 h_{i,j}^{\downarrow} &= \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j} \Delta V v_{i-1,j} \Delta V s_{i,j}}{a_{i-1,j} \delta x_{i-1} \Delta x_i} \\
 h_{i,j}^{\text{右}} &= \frac{r_{i+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta V v_{i,j} \Delta V s_{i,j}}{A_{i,j} \delta r_j r_j \Delta r_j} \\
 h_{i,j}^{\text{左}} &= \frac{r_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta V v_{i,j-1} \Delta V s_{i,j}}{A_{i,j-1} \delta r_{j-1} r_j \Delta r_j}
 \end{aligned} \right\} \quad (3-66)$$

$$\begin{aligned}
 h_{i,j}^0 &= - \left( \frac{\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} \Delta V s_{i,j} + \frac{\rho_{i+\frac{1}{2},j} \Delta V s_{i,j}}{\Delta x_i} u_{i,j}^* \right. \\
 &\quad - \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j} \Delta V s_{i,j}}{\Delta x_j} u_{i-1,j}^* + \frac{r_{j+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}} \Delta V s_{i,j}}{r_j \Delta r_j} v_{i,j}^* \\
 &\quad \left. - \frac{r_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}} \Delta V s_{i,j-1}}{r_j \Delta r_j} v_{i,j-1}^* \right) \quad (3-67)
 \end{aligned}$$

である。(3-64)式は、 $u_{i,j}^*$  と  $v_{i,j}^*$  がわかると解くことができ、補正圧力  $P'_{i,j}$  を得ることができる。

得られた補正圧力  $P'_{i,j}$  を用いて、(3-62)と(3-63)式から、補正速度

$$u_{i,j}^* = e_{i,j} (P'_{i,j} - P'_{i+1,j}) \quad (3-62)'$$

$$v_{i,j}^* = E_{i,j} (P'_{i,j} - P'_{i,j+1}) \quad (3-63)'$$

が得られ、これらを(3-59)と(3-60)式に代入することにより、新しい速度場  $u_{i,j}$ ,  $v_{i,j}$  を求めることができる。また、圧力に関しても、最初に推測した圧力場  $P^*_{i,j}$  を(3-61)式にしたがい、補正圧力  $P'_{i,j}$  を用いて、新しい圧力場  $P^*_{i,j}$  を求めることができる。表3.2のSIMPLE法の計算手順にしたがって、他のスカラー量、ここでは、各成分気体の質量分率を求め、収束判定を行う。未収束の場合には、上記の新しい圧力場を  $P^*_{i,j}$  として、繰り返し計算を行う。

SIMPLE法では、運動量保存式を解くのに必要な圧力場を推測しているが、SIMPLER法及びSIMPLEST/ANL法では、圧力方程式を解いて、得られた圧力場を用いて運動量保存式を解く。圧力方程式は、(3-46)式と(3-58)式を質量保存式(3-34)式に代入して、

$$\begin{aligned}
 h_{i,j} P_{i,j} &= h_{i,j}^{\uparrow} P_{i+1,j} + h_{i,j}^{\downarrow} P_{i-1,j} + h_{i,j}^{\text{右}} P_{i,j+1} + h_{i,j}^{\text{左}} P_{i,j-1} \\
 &\quad + \hat{h}_{i,j}^0 \quad (3-68)
 \end{aligned}$$

と得られる。ここで、 $h_{i,j}^{\pm}$ ,  $h_{i,j}^{\downarrow}$ ,  $h_{i,j}^{\rightleftarrows}$ ,  $h_{i,j}^{\leftarrow}$  は、(3-65), (3-66) 式から得られる。

$\hat{h}_{i,j}^0$  は、

$$\begin{aligned} \hat{h}_{i,j}^0 = & - \left( \frac{\rho_{i,j} - \rho_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} + \frac{\rho_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta x_i} \hat{u}_{i,j} - \frac{\rho_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x_i} \hat{u}_{i-1,j} \right. \\ & \left. + \frac{r_{j+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}}}{r_j \Delta r_j} \hat{v}_{i,j} - \frac{r_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}}}{r_j \Delta r_j} \hat{v}_{i,j-1} \right) \Delta V S_{i,j} \end{aligned} \quad (3-69)$$

である。

各成分気体の質量保存式 (3-29) 式をスカラーコントロールボリュームで離散化する。

$$\begin{aligned} S_{i,j} \omega_{k_{i,j}} = & S_{i,j}^{\pm} \omega_{k_{i+1,j}} + S_{i,j}^{\downarrow} \omega_{k_{i-1,j}} + S_{i,j}^{\rightleftarrows} \omega_{k_{i,j+1}} + S_{i,j}^{\leftarrow} \omega_{k_{i,j-1}} \\ & + S_{i,j}^0 \end{aligned} \quad (3-70)$$

ここで、

$$\begin{aligned} S_{i,j} = & \left\{ \frac{\rho_{i,j}}{\Delta t} + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right\} \Delta V S_{i,j} \\ & + S_{i,j}^{\pm} + S_{i,j}^{\downarrow} + S_{i,j}^{\rightleftarrows} + S_{i,j}^{\leftarrow} \end{aligned} \quad (3-71)$$

$$\left. \begin{aligned} S_{i,j}^{\pm} &= \left| \left[ -F_{i+\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \Delta V S_{i,j} \\ S_{i,j}^{\downarrow} &= \left| \left[ F_{i-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \Delta V S_{i,j} \\ S_{i,j}^{\rightleftarrows} &= \left| \left[ -F_{j+\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \Delta V S_{i,j} \\ S_{i,j}^{\leftarrow} &= \left| \left[ F_{j-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| \Delta V S_{i,j} \end{aligned} \right\} \quad (3-72)$$

$$\begin{aligned} S_{i,j}^0 = & \left[ \frac{1}{\Delta t} \rho_{i,j}^{n-1} \cdot \omega_{k_{i,j}}^{n-1} \right. \\ & - \frac{1}{\text{ReSc}} \frac{1}{\Delta x_i} \left\{ \rho_{i+\frac{1}{2},j} \frac{M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell_{i+\frac{1}{2},j}} \frac{M\omega_{\ell_{i+1,j}} - M\omega_{\ell_{i,j}}}{\delta x_i} \right) \right. \\ & \left. - \rho_{i-\frac{1}{2},j} \frac{M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell_{i-\frac{1}{2},j}} \frac{M\omega_{\ell_{i,j}} - M\omega_{\ell_{i-1,j}}}{\delta x_{i-1}} \right) \right\} \\ & - \frac{1}{\text{ReSc}} \frac{1}{r_j \Delta r_j} \left\{ r_{j+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell_{i,j+\frac{1}{2}}} \frac{M\omega_{\ell_{i,j+1}} - M\omega_{\ell_{i,j}}}{\delta r_j} \right) \right. \\ & \left. - r_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{M_k}{M^2} \sum_{\ell} \left( D_{k\ell_{i,j-\frac{1}{2}}} \frac{M\omega_{\ell_{i,j}} - M\omega_{\ell_{i,j-1}}}{\delta r_{j-1}} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$+ Da_{k_{i,j}}] \Delta V_{s_{i,j}} \quad (3-73)$$

$$\left. \begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2}} &= \rho_{i+\frac{1}{2},j} u_{i,j} \frac{1}{\Delta x_i} \\ F_{i-\frac{1}{2}} &= \rho_{i-\frac{1}{2},j} u_{i-1,j} \frac{1}{\Delta x_i} \\ F_{j+\frac{1}{2}} &= \rho_{i,j+\frac{1}{2}} v_{i,j} \frac{r_{j+1}^*}{r_j \Delta r_j} \\ F_{j-\frac{1}{2}} &= \rho_{i,j-\frac{1}{2}} v_{i,j-1} \frac{r_j^*}{r_j \Delta r_j} \end{aligned} \right\} \quad (3-74)$$

以上で、解くべき偏微分基礎方程式を離散化することにより代数方程式に変換した。

### 3.5 代数方程式の解法

解くべき代数方程式を再度、以下にまとめて示す。

< x 方向の運動量保存式 >

$$\begin{aligned} u_{i,j} = \frac{1}{a_{i,j}} & (\overset{\pm}{a}_{i,j} u_{i+1,j} + \overset{\mp}{a}_{i,j} u_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{a}_{i,j} u_{i,j+1} + \overset{\text{左}}{a}_{i,j} u_{i,j-1} \\ & + b) + e_{i,j} (p_{i,j} - p_{i+1,j}) \end{aligned} \quad (3-35)$$

< r 方向の運動量保存式 >

$$\begin{aligned} v_{i,j} = \frac{1}{A_{i,j}} & (\overset{\pm}{A}_{i,j} v_{i+1,j} + \overset{\mp}{A}_{i,j} v_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{A}_{i,j} v_{i,j+1} + \overset{\text{左}}{A}_{i,j} v_{i,j-1} \\ & + B) + E_{i,j} (p_{i,j} - p_{i,j+1}) \end{aligned} \quad (3-47)$$

< 圧力補正方程式 >

$$\begin{aligned} h_{i,j} p_{i,j} = \overset{\pm}{h}_{i,j} p_{i+1,j} + \overset{\mp}{h}_{i,j} p_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{h}_{i,j} p_{i,j+1} + \overset{\text{左}}{h}_{i,j} p_{i,j-1} \\ + h_{i,j}^0 \end{aligned} \quad (3-64)$$

SIMPLER 法及びSIMPLEST/ANL法では、(3-35)、(3-47) 式の運動量保存式を解く前に、(3-35)、(3-47) 式で用いる圧力場  $p_{i,j}$  を次の圧力方程式を解いて求める。

< 圧力方程式 >

$$\begin{aligned} h_{i,j} p_{i,j} = \overset{\pm}{h}_{i,j} p_{i+1,j} + \overset{\mp}{h}_{i,j} p_{i-1,j} + \overset{\text{右}}{h}_{i,j} p_{i,j+1} + \overset{\text{左}}{h}_{i,j} p_{i,j-1} \\ + h_{i,j}^0 \end{aligned} \quad (3-68)$$

<各成分気体の質量保存式>

$$S_{i,j} \omega_{k_i,j} = S_{i,j}^{\uparrow} \omega_{k_{i+1},j} + S_{i,j}^{\downarrow} \omega_{k_{i-1},j} + S_{i,j}^{\text{右}} \omega_{k_i,j+1} + S_{i,j}^{\text{左}} \omega_{k_i,j-1} + S_{i,j}^0 \quad (3-70)$$

本解析コードでは、k = 1をヘリウム、k = 2を酸素、k = 3を一酸化炭素、k = 4を二酸化炭素とした。

本解析では、代数方程式の解法として、線順法を用いた<sup>(10)</sup>。ここでいう線順法とは、一次元問題の場合に用いる三重対角行列アルゴリズム (TDMA) とガウス・ザイデル法を組み合わせたものである。即ち、まず、ある格子点列を選び出し、この一次元点列をTDMAによって解く。次に、この点列に隣接する格子点列を解く。これを一方向のすべての格子点列について行う。そして、次の繰り返し計算では、これを別方向について行う。この別方向からの計算により、境界条件伝播を速めるわけである。このように、一次元点列 (線) を順に解いていく。このとき、一次元点列に隣接する両隣の一次元点列は、定数として扱う。そして、既に解いた隣接一次元点列の値には、その新しい値を用いる。

線順法を一般式で以下に示す。まず、解くべき代数方程式を次のように表す。

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (i = 1 \sim I) \quad (3-75)$$

ここでは、i 方向に一次元点列を選んでおり、この一次元点列に隣接する両隣の一次元点列は、(3-75) 式の定数  $d_i$  として、

$$d_i = e_j \phi_{i+1} + f_j \phi_{j-1} + d_i^0 \quad (3-76)$$

のように扱う。(3-75) 式は、TDMAによって、

$$\left. \begin{aligned} P_i &= \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}}, \\ Q_i &= \frac{d_i + c_i Q_{i-1}}{a_i - c_i P_{i-1}}, \\ P_1 &= \frac{b_1}{a_1}, \\ Q_1 &= \frac{d_1}{a_1}, \\ \phi_I &= Q_I \\ \phi_i &= P_i \phi_{i+1} + Q_i \end{aligned} \right\} \quad (3-77)$$

から  $\phi_i$  を求めることができる。このとき、 $i = 1, I$  であり、 $a_1, b_1, d_1$  の値は必要であるが、 $c_1$  の値は必要ではない。また、 $b_1$  の値も必要としないのがわかる。

本解析でTDMAを用いるときには、境界条件をうまく取り入れるため、 $i$ の値を1からIではなく、 $i=2, I-1$ にすると便利である。すると、 $\phi_1$ 及び $\phi_I$ を、境界の値とすることができ、それらの境界値を既知の値として定数項に足し込む。

すなわち、

$$\left. \begin{aligned} a_2 \phi_2 &= b_2 \phi_3 + (d_2 + c_2 \phi_1) \\ a_i \phi_i &= b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \\ a_{I-1} \phi_{I-1} &= c_{I-1} \phi_{I-2} + (d_{I-1} + b_{I-1} \phi_I) \end{aligned} \right\} \quad (3-78)$$

とする。 $c_2$ 及び $b_{I-1}$ は、前述のとおり、 $\phi_i$ を求めるのには必要がないので、(3-78)式によって、境界の値がうまく取り込めるわけである。 $j$ 方向の境界条件は、(3-76)式において、 $\phi_j$  ( $j=1$  or  $j=J$ )として同様に取り込むことができる。

TDMAには、過・不足緩和を組み込むことができる。すなわち、前回の反復計算において得られた $\phi_i^*$ と過・不足緩和係数 $\alpha$ を用いて、(3-75)式を

$$a_i^* \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i^* \quad (3-79)$$

とする。ここで、

$$\left. \begin{aligned} a_i^* &= a_i / \alpha \\ d_i^* &= d_i + (1 - \alpha) \frac{a_i}{\alpha} \phi_i^* \end{aligned} \right\} \quad (3-80)$$

である。ただし、圧力補正式及び圧力方程式を解く場合には、過・不足緩和を行ってはならない。

本解析では、上記の線順法で代数定式を解く際に、 $x$ 方向と $r$ 方向の2方向に走査する。<sup>(10)</sup>このとき、 $x$ 方向から走査し、のちに $r$ 方向を走査するか、もしくはその逆か、そして、 $x, r$ 方向を正方向へ走査するか負方向へ走査するかについては、繰り返し計算の中で、交互に選択している。すなわち、

n回目の繰り返し計算：	r 正方向，	x 正方向
(n+1)	”	: x 正方向， r 正方向
(n+2)	”	: r 負方向， x 負方向
(n+3)	”	: x 負方向， r 負方向

を繰り返す。圧力補正方程式と圧力方程式の代数方程式は、1回の繰返し計算の中で、3回解いている。

## 3.6 境界条件

図3.2に数値計算体系と境界条件を示す。まず、入口における境界条件について、速度に対しては、 $v = 0$ とし、流れ方向速度に対しては、①一様流入速度分布、①層流の発達した速度分布、③速度勾配=0を選択できるようにした。各成分気体の質量分率に対しては、成分毎にある一定値を与える。例えば、 $\omega_{\text{He},\text{in}} = 0.8$ 、 $\omega_{\text{O}_2,\text{in}} = 0.2$ 、 $\omega_{\text{CO},\text{in}} = \omega_{\text{CO}_2,\text{in}} = 0$ という具合である。出口における境界条件については、速度に対して、

$$\partial u / \partial x = 0, \quad v = 0 \quad (3-81)$$

とし、質量分率にたいしては、

$$\partial^2 \omega_k / \partial x^2 = 0 \quad (3-82)$$

とした。中心における境界条件については、速度及び質量分率に対して

$$\partial u / \partial r = 0, \quad v = 0, \quad \partial \omega_k / \partial r = 0 \quad (3-83)$$

とした。

壁面における境界条件については、円管が黒鉛ではない非反応区間では、

$$u = 0, \quad v_w = 0, \quad \partial \omega_k / \partial r = 0 \quad (3-84)$$

とした。円管が黒鉛である反応区間では、流れ方向流速に対しては、やはり、非反応区間と同様に、

$$u = 0 \quad (3-85)$$

とし、 $v_w$ と質量分率に対しては、次式より求めた。

$$-(\rho v)_w \cdot \omega_{k,w} = \frac{1}{\text{ReSc}} \left( \frac{\rho M_k}{M^2} \right)_w \sum_j \left( D_{kj} \frac{\partial M \omega_j}{\partial r} \right)_w + \text{Da}_{k,w} \quad (3-86)$$

$$(\rho v)_w = (m_c^{(1)} + m_c^{(2)}) / (\rho_{\text{in}} \cdot u_{\text{in}}) \quad (3-87)$$

$$\text{Da}_{k,w} = m_k / (\rho_{\text{in}} \cdot u_{\text{in}}) \quad (3-88)$$

ここで、 $m_c$ は黒鉛の腐食速度であり、これらについては次節で述べる。

黒鉛円管壁面において、黒鉛と酸素の反応の結果として、酸素は消失し、一酸化炭素と、もしくは、二酸化炭素が生成され、固体の炭素が気体になった分だけ壁面から質量流入がある。(3-87)式では、この流入質量を壁面に垂直な流速として与えることによって黒鉛の固気反応を模擬している。流入質量を壁面に垂直な流速として与えずに ( $v_w = 0$ )、単に流入質量として与えることも可能であり、この結果については、後述する。

以上が、速度と質量分率に対する境界条件である。圧力については、任意の1点の絶対値を与え



る方式とした。圧力補正方程式と圧力方程式の境界条件については、SIMPLE系のアルゴリズムでは、圧力そのものの境界条件は不要である。たとえば、圧力補正方程式の代数方程式(3-64)式において、 $x$ 座標の入口、すなわち、 $i = 2$ において、右辺第2項の $h_{2,j}^{\downarrow} \cdot p_{1,j}$ がでてくるため、他の変数の場合には、境界値 $\phi_{i,j}$ を定数項に加える操作が必要であるが、圧力の場合には、何もしなくて良い。代数方程式の所で述べたように、代数方程式を解くときには、この係数 $h_{2,j}^{\downarrow}$ も使わない。ただ、(3-67)式の定数値のところ、 $u_{i,j}$ に、 $u$ の境界値である $u_{1,j}$ を代入すれば良い。他の境界においても全く同様であり、結局、各境界における速度が既知であればよい。速度未知境界においても、SIMPLE系アルゴリズムが本来楕円型方程式の解法であるため、あらゆる境界で境界条件を与えなければならないため、境界で速度が未知の場合には、代わりに速度勾配を与えなければならない。速度勾配が与えられていれば、速度場を計算したのち、その結果から境界の速度を求めることができ、この速度の境界値を圧力場を解くときに用いれば良いわけである。

### 3.7 化学反応速度

本解析では、固気化学反応として、



の3種類の総括反応と、気相同士の反応である一酸化炭素の燃焼反応



の合計4種類の総括化学反応を考慮する。(3-A)と(3-B)式の黒鉛の酸化反応は、共に一次反応であると言われている。2000℃以下では、(3-A)、(3-B)、(3-D)式の逆反応を無視することができる。(3-C)式の逆反応については、800℃以下で顕著となるため、ここでは無視する。(3-A)、(3-B)、(3-D)式の反応は発熱反応であり、(3-C)式の反応は吸熱反応である。1300Kの温度において、(3-A)～(3-D)の発・吸熱量は、順に、396.8, 114.0, 281.6, -167.6(吸熱) kJ/moleである。別途報告する実験では、長さ800mm、内径52.9mm、外径90mmの黒鉛円管において、入口レイノルズ数が100、入口での酸素質量分率が0.2、温度が1000℃の場合に、酸素の供給により、黒鉛の温度は約20K上昇した。実験では、すぐに、黒鉛全体及びガス入口温度をこの1020℃に調整し、できる限り化学反応の吸・発熱の影響を受けないように、すなわち、熱伝達が共存しないように制御している。そこで、本解析においても、熱伝達が共存しない物質伝達だけの基本的特性を調べるために、化学反応の吸・発熱の影響を無視した。

黒鉛の酸素及び二酸化炭素による腐食速度を以下に示す<sup>(11)</sup>。これらは、細孔内拡散律速領域に

おける腐食速度である。

$$m_c^{(1)} = -2560 \exp\left(-\frac{142000}{R_g T_k}\right) \cdot \left(\frac{P}{1.013 \times 10^5}\right)^{0.5} \times \left(\frac{M \omega_{O_2, w}}{0.2095 M_{O_2}}\right)^{0.75} \quad (3-89)$$

$$m_c^{(2)} = -44.5 \exp\left(-\frac{162710}{R_g T_k}\right) \cdot \omega_{CO_2, w} \quad (3-90)$$

$$m_{O_2} = m_c^{(1)} \frac{M_{O_2}}{M_c} \frac{2+f}{2+2f} \quad (3-91)$$

$$m_{CO} = -m_c^{(1)} \frac{M_{CO}}{M_c} \frac{f}{1+f} - 2m_c^{(2)} \frac{M_{CO}}{M_c} \quad (3-92)$$

$$m_{CO_2} = -m_c^{(1)} \frac{M_{CO_2}}{M_c} \frac{1}{1+f} + m_c^{(2)} \frac{M_{CO_2}}{M_c} \quad (3-93)$$

$$f = 800 \exp(-6200/T_k) \quad (3-94)$$

ここで、 $m_c^{(1)}$ は、酸素による黒鉛の腐食速度であり、 $m_c^{(2)}$ は、二酸化炭素による黒鉛の腐食速度である。

一酸化炭素の燃焼反応における反応速度は、以下のとおりである<sup>(11)</sup>。

$$R^+ = k_+ \rho \left(\frac{\rho}{M_{O_2}}\right)^{0.5} \omega_{CO} \cdot \omega_{O_2}^{0.5} \quad (3-95)$$

$$k_+ = 7 \times 10^9 \exp\left(-\frac{199720}{R_g T_k}\right) \quad (3-96)$$

$$\left. \begin{aligned} R_{CO} &= -R^+ \\ R_{O_2} &= -0.5R^+ \\ R_{CO_2} &= R^+ \end{aligned} \right\} \quad (3-97)$$

ダムケラ数は、(3-21)式に示した通り、(3-97)式の各成分気体の反応速度を用いて、

$$Da_k = \frac{R_k d}{\rho_{in} u_{in}} \quad (3-98)$$

と表わす。化学反応における質量保存則より、 $\sum_k Da_k = 0$  である。

## 3.8 物質伝達率

本節では、次元量を3.1の表記法にしたがって、また無次元量を3.2の表記法にしたがって記すことにする。

まず、種々のバルク値を計算する。

$$U_b = \frac{u_b}{u_{in}} = \frac{1}{u_{in}} \frac{\int u dv}{\int dv}$$

$$= 8 \int_0^{0.5} R U dR \quad (3-99)$$

$$\rho_b^* = \frac{\rho_b}{\rho_{in}} = \frac{1}{\rho_{in}} \frac{\int \rho u dV}{\int u dV}$$

$$= \frac{8 \int_0^{0.5} (\rho^* U R) dR}{U_b} \quad (3-100)$$

$$\omega_{k,b} = \frac{\int \omega_k \cdot u dV}{\int u dV}$$

$$= \frac{8 \int_0^{0.5} (\omega_k \cdot U R) dR}{U_b} \quad (3-101)$$

$$Re_b = \frac{\rho_b u_b d}{\mu_b}$$

$$= \frac{\rho_b^* \cdot U_b}{\mu_b^*} \cdot Re \quad (3-102)$$

ここで、密度以外の物性値のバルク値も、(3-100)式と同様にして求めることができる。

摩擦係数については、

$$-\frac{dp}{dx} = \frac{4}{d} f^{(1)} \frac{\rho_b u_b^2}{2} \quad (3-103)$$

と、

$$\tau_w = f^{(2)} \frac{\rho_b u_b^2}{2} \quad (3-104)$$

の2種類の定義より、それぞれ、

$$f^{(1)} = -\frac{d}{2\rho_b^* u_b^2} \frac{d}{dx} (P + \rho_b u_b^2) \quad (3-105)$$

$$f^{(2)} = -\frac{1}{Re} \frac{1}{\rho_b^* U_b^2} \left( \mu^* \frac{\partial U}{\partial R} \right) \Big|_w \quad (3-106)$$

とした。壁面における圧力 $P_w$ は、次式より計算した。

$$P_w = P_{i,j-1} + \delta R_{j-1} (\bar{A}_{i,j-1}^+ V_{i+1,j-1} + \bar{A}_{i,j-1}^- V_{i-1,j-1} + \bar{A}_{i,j-1}^{\ddagger} V_{i,j-2})$$

$$-A_{i,J-1}^\# V_{i,J-1} + B_{i,J-1}) \quad (3-107)$$

ここで、

$$\left. \begin{aligned} A_{i,J-1}^\pm &= \left| \left[ -F_{i+\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| + \frac{D_{i+\frac{1}{2}}^+}{\text{Re}} \\ A_{i,J-1}^\mp &= \left| \left[ F_{i-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| + \frac{D_{i-\frac{1}{2}}^+}{\text{Re}} \\ A_{i,J-1}^{\pm\#} &= \left| \left[ F_{j-\frac{1}{2}}, 0 \right] \right| - \frac{1}{\text{Re}} \frac{1}{R_j^* \delta R_{j-1}} (\mu_{i,J}^* \cdot R_j - \mu_{i,J-1}^* R_{j-1}) \frac{1}{\Delta R_j} \\ &\quad - \frac{Cr_2}{\text{Re}} \left( \frac{\mu_{i,J}^*}{R_j} - \frac{\mu_{i,J-1}^*}{R_{j-1}} \right) \frac{R_{j-1}^*}{\delta R_{j-1} \Delta R_{j-1}} \\ A_{i,J-1}^\# &= \frac{1}{\Delta t} \rho_{i,J}^* + \bar{A}_{i,J-1}^\pm + \bar{A}_{i,J-1}^\mp + \bar{A}_{i,J-1}^\# \\ &\quad + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} \\ &\quad + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\mu_{i,J}^*}{(R_j^*)^2} + \frac{Cr_3}{\text{Re}} \frac{\mu_{i,J}^* - \mu_{i,J-1}^*}{R_j^* \delta R_{j-1}} \end{aligned} \right\} \quad (3-108)$$

であり、F、D<sup>+</sup>については、前述のとおりである。

物質伝達率の無次元数であるシャーウッド数を次式で定義する。

$$\begin{aligned} Sh_k &= \frac{\beta_k \cdot d}{D_{\text{He}/k,\text{in}}^{(2)}} \\ \beta_k &= \frac{N_k}{\rho_b(\omega_{k,b} - \omega_{k,w})} \end{aligned} \quad (3-109)$$

ここで、N<sub>k</sub>は、k成分気体の質量流束であり、D<sub>He/k,in</sub><sup>(2)</sup>は、入口での2成分拡散係数であり、ヘリウムとk成分気体に対するものである。質量流束として、次の2種類を考える。1つは、拡散による拡散流束であり、もう1つは、正味の質量流束(以後、これを全質量流束と呼ぶ)である。それぞれ、

$$N_k = J_k = \frac{\rho M_k}{M^2} \sum_j \{ D_{kj} \Delta(M\omega_j) \} \quad (3-111)$$

$$N_k = m_k = J_k + \rho_b V_w \omega_{k,w} \quad (3-112)$$

である。例えば、酸素の場合には、r座標の拡散の方向と対流の方向が逆向きであり、J<sub>O<sub>2</sub></sub> ≥ m<sub>O<sub>2</sub></sub>となる。以下では、拡散流束J<sub>k</sub>に基づく物質伝達率は、β<sub>k</sub>、Sh<sub>k</sub>表し、全質量流束m<sub>k</sub>に基づく物質伝達率は、β<sub>k</sub><sup>\*</sup>、Sh<sub>k</sub><sup>\*</sup>と表すこととする。壁面レイノルズ数を次式で定数する。

$$\text{Re}_w = \frac{\rho_b v_w d}{\mu_b} \quad (3-113)$$

尚、物性値は、文献(12)の値を用いた。

### 3.9 単成分気体のエネルギー保存式

前述のように、本解析では、熱伝達が共存しない場合の物質伝達を扱っている。しかしながら、SIMPLE系のアルゴリズムは、表3-2に示したように、スカラー方程式は、速度場と圧力場の計算のあとに解いており、このとき、例えば、各成分気体の質量保存式を解かずに、単成分気体のエネルギー保存式を解けば、熱伝達特性を知ることができる。また、本解析コードの将来の発展、すなわち、熱伝達と物質伝達の共存場を扱うことを考えて、その前段階として、単成分気体のエネルギー保存式を追加した。

単成分気体のエネルギー保存式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho c_p T) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u c_p T) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho v c_p r T) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) \end{aligned} \quad (3-114)$$

であり、温度を

$$\Theta = \frac{T - T_c}{T_{\text{ref}} - T_c} \quad (3-115)$$

で無次元化し、他の変数については、3.2と同様に無次元化すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* c_p^* \Theta) + \frac{\partial}{\partial X} (\rho^* U c_p^* \Theta) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} (\rho^* V c_p^* R \Theta) + \\ = \frac{1}{\text{RePr}} \left\{ \frac{\partial}{\partial X} \left( \lambda^* \frac{\partial \Theta}{\partial X} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( \lambda^* R \frac{\partial \Theta}{\partial R} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3-116)$$

となる。これをスカラーコントロールボリュームにおいて積分すると、

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{\pm} \Theta_{i,j} = C_{i,j}^{\pm} \Theta_{i+1,j} + C_{i,j}^{\mp} \Theta_{i-1,j} + C_{i,j}^{\pm} \Theta_{i,j+1} + C_{i,j}^{\mp} \Theta_{i,j-1} \\ + C_{i,j}^0 \end{aligned} \quad (3-117)$$

となる。ここで、

$$C_{i,j}^{\pm} = \left( \left| \left[ -F_{i+\frac{1}{2}}, 0 \right] + D_{i+\frac{1}{2}}^{\pm} \right| \Delta V_{S_{i,j}} \right)$$

$$\left. \begin{aligned} C_{i,j}^{\bar{r}} &= \left( \left| [F_{i-\frac{1}{2}}, 0] \right| + D_{i-\frac{1}{2}}^+ \right) \Delta V_{S_{i,j}} \\ C_{i,j}^{\bar{s}} &= \left( \left| [-F_{j+\frac{1}{2}}, 0] \right| + D_{j+\frac{1}{2}}^+ \right) \Delta V_{S_{i,j}} \\ C_{i,j}^{\bar{x}} &= \left( \left| [F_{j-\frac{1}{2}}, 0] \right| + D_{j-\frac{1}{2}}^+ \right) \Delta V_{S_{i,j}} \end{aligned} \right\} \quad (3-118)$$

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= \left( \frac{1}{\Delta \tau} \rho_{i,j}^* c_{P_{i,j}}^* + F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} + F_{j+\frac{1}{2}} - F_{j-\frac{1}{2}} \right) \Delta V_{S_{i,j}} \\ &\quad + C_{i,j}^{\pm} + C_{i,j}^{\bar{r}} + C_{i,j}^{\bar{s}} + C_{i,j}^{\bar{x}} \end{aligned} \quad (3-119)$$

$$C_{i,j}^0 = \frac{1}{\Delta \tau} \rho_{i,j}^{*n-1} \cdot c_{P_{i,j}}^{*n-1} \cdot \textcircled{H}_{i,j}^{n-1} \cdot \Delta V_{S_{i,j}} \quad (3-120)$$

$$\left. \begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2}} &= \rho_{i+\frac{1}{2},j}^* c_{P_{i+\frac{1}{2},j}}^* U_{i,j} \frac{1}{\Delta X_i} \\ F_{i-\frac{1}{2}} &= \rho_{i-\frac{1}{2},j}^* C_{P_{i-\frac{1}{2},j}}^* U_{i-1,j} \frac{1}{\Delta X_i} \\ F_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{R_{j+1}^* \rho_{i,j+\frac{1}{2}} V_{i,j}}{R_j \Delta R_j} \\ F_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{R_j^* \rho_{i,j-\frac{1}{2}} V_{i,j-1}}{R_j \Delta R_j} \end{aligned} \right\} \quad (3-121)$$

$$\left. \begin{aligned} D_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\text{RePr}} \frac{\lambda_{i+\frac{1}{2},j}^*}{\Delta X_i \delta X_i} \\ D_{i-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\text{RePr}} \frac{\lambda_{i-\frac{1}{2},j}^*}{\Delta X_i \delta X_{i-1}} \\ D_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\text{RePr}} \frac{R_{j+1}^* \lambda_{i,j+\frac{1}{2}}^*}{R_j \Delta R_j \delta R_j} \\ D_{j-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\text{RePr}} \frac{R_j^* \lambda_{i,j-\frac{1}{2}}^*}{R_j \Delta R_j \delta R_{j-1}} \end{aligned} \right\} \quad (3-122)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{Pe}_\ell &= \frac{F_\ell}{D_\ell} \\ A(\text{Pe}_\ell) &= \left[ \left[ (1 - 0.1 |\text{Pe}_\ell|)^5, 0 \right] \right] \\ D_\ell^+ &= D_\ell \cdot A(\text{Pe}_\ell) \end{aligned} \right\} \quad (3-123)$$

である。

温度の境界条件は、加熱壁条件の場合については、(3-115)式の $T_c$ を $T_{i_n}$ 、 $T_{ref}$ を $T_w$ として、 $\Theta_w = 1$ 、 $\Theta_{i_n} = 0$ 、冷却壁条件の場合には、 $T_c$ を $T_w$ 、 $T_{ref}$ を $T_{i_n}$ として、 $\Theta_w = 0$ 、 $\Theta_{i_n} = 1$ とする。また、加熱壁、冷却壁条件いずれの場合にも、 $\Theta_w$ を0もしくは1でない値にするには、 $T_{ref}$ を変化させれば良い。温度の入口及び壁面でのこのような境界条件は、いずれも、物質伝達との相似性を念頭に置いている。例えば、酸素の質量分率の入口での境界条件は、 $\omega_{O_2, in} = 0.2$ であり、壁面での境界条件式を解いた結果は、例えば、 $\omega_{O_2, w} = 0.001$ とか、零でない値になる。一酸化炭素や二酸化炭素の壁面における質量分率は、黒鉛壁面で酸素が完全に消費されない限り、決して零とはならない。

温度の中心境界及び出口境界での条件として、

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial R} &= 0 \\ \frac{\partial^2 \Theta}{\partial X^2} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3-124)$$

を与えた。

ヌッセルト数を次式で定義する。

$$Nu = \frac{hd}{\lambda} \quad (3-125)$$

$$h = \frac{q}{(T_w - T_b)} \quad (3-126)$$

ここで、物質伝達率と同様に、壁面からの吹き出し流れがある場合には、2種類の熱流束を採ることが出来る。

1つは、熱伝導による熱流束であり、もう1つは、熱伝導と対流による正味の熱流束である。それぞれ

$$q = q_{con} = -\lambda \left. \frac{dT}{dr} \right|_w \quad (3-127)$$

$$q = q_t = -\lambda \left. \frac{dT}{dr} \right|_w + \rho c_p v T_w \quad (3-128)$$

である。以上より、

$$Nu = -\frac{\lambda_{j-1}^*}{\lambda_b^*} \frac{\Theta_w - \Theta_{j-1}}{\Theta_w - \Theta_b} \frac{1}{\Delta R} \quad (3-129)$$

$$Nu' = -\frac{\lambda_{j-1}^*}{\lambda_b^*} \frac{\Theta_w - \Theta_{j-1}}{\Theta_w - \Theta_b} \frac{1}{\Delta R}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\text{RePr}}{\lambda_b^* (\Theta_w - \Theta_b)} \left\{ |[\mathbf{F}^*, 0]| \left( \Theta_{J-1} + \frac{T_c}{T_{\text{ref}} - T_c} \right) \right. \\
 & \left. - |[\mathbf{F}^*, 0]| \left( \Theta_w + \frac{T_c}{T_{\text{ref}} - T_c} \right) \right\} \quad (3-130)
 \end{aligned}$$

が、それぞれ、熱伝導熱流束、正味の熱流束に基づくヌッセルト数である。ここで、 $\mathbf{F}^* = \rho_{j-1}^* c_{p,j-1}^* V_w$  である。

### 3.10 プログラミング

図3.3に本解析コードのフローチャートを示す。図中の英文字は、その部分の計算を行うサブルーチンプログラム名である。本解析コードのプログラムリストを付録に示す。

本解析コードでは、運動量保存式の非線形項を線形化することによって、1次元連立方程式を得ている。例えば、対流項において、 $\rho uu$ では、 $\rho u$ を定数とみなし、1回前の繰り返し計算の値を使う。すなわち、 $\rho uu \rightarrow c_1 u$ として計算する。そして、この定数 $c_1$ は、その繰り返し計算の中では、新しく計算された変数によって書き換えない。例えば、SIMPLE法では、最初に運動量保存式を解いて新しい速度場を得るが、この新しい速度場を用いて、上記の定数を再計算させる必要はない。むしろ、再計算させると発散してしまうため、再計算させてはいけない。

各成分気体の質量保存式について、本解析コードでは、 $k=2, 3, 4$ 、すなわち、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素についてのみ解き、 $k=1$ のヘリウムについては、各繰り返し計算の中で質量保存させるため、

$$\sum_k \omega_k = 1 \quad (3-131)$$

より、

$$\omega_{\text{He}} = 1 - (\omega_{\text{O}_2} + \omega_{\text{CO}} + \omega_{\text{CO}_2}) \quad (3-132)$$

として、求めている。

各成分気体の質量保存式を解くとき、解こうとする成分気体において、あるコントロールボリュームに隣接するすべてのコントロールボリュームにその成分気体がない場合には、そのコントロールボリュームにおいて拡散流束を強制的に零とし、計算誤差が発生するのを防いだ。

各成分気体の質量保存式における壁面境界条件式(3-86)式より壁面における質量分率の値、すなわち、質量分率の境界値の求め方を以下で述べる。(3-86)式を参考のため再載する。

$$-(\rho^* \mathbf{V})_w \omega_{k,w} = \frac{1}{\text{ReSc}} \left( \frac{\rho^* M_k}{M^2} \right)_w \sum_j \left( D_{kj}^* \frac{\partial (M \omega_j)}{\partial R} \right)_w + \text{Da}_{k,w} \quad (3-86)$$



上式を離散化すると、

$$\rho_w^* V_w \omega_{k,w} + \frac{1}{\text{ReSc}} \left( \frac{\rho_w^*}{M_w^2} \right) \sum_j \left\{ M_k M_j D_{kj}^* \frac{\left( \frac{M\omega_j}{M_j} \right)_w - \left( \frac{M\omega_j}{M_j} \right)_{J-1}}{\frac{\Delta R_{j-1}}{2}} \right\} + \frac{m_k}{\rho_{in} u_{in}} = 0 \quad (3-133)$$

(3-133)式において、質量分率の所の形を若干変えたのは、多成分拡散係数は、モル分率表記されたときに、次式のような性格を持ち、(3-86)式を解くときに、この性格を満たさなければ、質量保存を維持できなくなるので、モル分率表記にするための準備である。

$$\sum_i (M_i M_h D_{ih} - M_i M_k D_{ik}) = 0 \quad (3-134)$$

上式の物理的な意味は、各成分気体の拡散流束の総和が零ということである。すなわち、各成分気体の質量保存式(3-4)式もしくは(3-25)式をすべて足し合わせた式は、(3-1)式もしくは(3-22)式の混合気体の質量保存式に一致するということである。(3-133)式で質量分率からモル分率に書き換えると、

$$\rho_w^* V_w \left( \frac{M_k}{M} \gamma_k \right)_w + \frac{2}{\text{ReSc}} \left( \frac{\rho^*}{M^2} \right)_w \sum_j \left\{ M_k M_j D_{kj}^* \frac{\gamma_{j,w} - \gamma_{j,J-1}}{\Delta R_{j-1}} \right\} + \frac{m_k}{\rho_{in} u_{in}} = 0 \quad (3-135)$$

となる。未知数を鮮明にするため、以下のように各成分ごとに上式を書き下す。

$$\begin{aligned} & C_1 \cdot \gamma_{1,w} + BM_1 M_2 D_{12}^* \gamma_{2,w} + BM_1 M_3 D_{13}^* \gamma_{3,w} + BM_1 M_4 D_{14}^* \gamma_{4,w} \\ & = (BM_1 M_2 D_{12}^* \gamma_{2,J-1} + BM_1 M_3 D_{13}^* \gamma_{3,J-1} + BM_1 M_4 D_{14}^* \gamma_{4,J-1}) \\ & BM_2 M_1 D_{21}^* \gamma_{1,w} + (C_2 + K_2) \gamma_{2,w} + BM_2 M_3 D_{23}^* \gamma_{3,w} + BM_2 M_4 D_{24}^* \gamma_{4,w} \\ & = (BM_2 M_1 D_{21}^* \gamma_{1,J-1} + BM_2 M_3 D_{23}^* \gamma_{3,J-1} + BM_2 M_4 D_{24}^* \gamma_{4,J-1}) \\ & BM_3 M_1 D_{31}^* \gamma_{1,w} + (BM_3 M_2 D_{32}^* + K_{31}) \gamma_{2,w} + C_3 \gamma_{3,w} + (BM_3 M_4 D_{34}^* + K_{32}) \gamma_{4,w} \\ & = (BM_3 M_1 D_{31}^* \gamma_{1,J-1} + BM_3 M_2 D_{32}^* \gamma_{2,J-1} + BM_3 M_4 D_{34}^* \gamma_{4,J-1}) \\ & BM_4 M_1 D_{41}^* \gamma_{1,w} + (BM_4 M_2 D_{42}^* + K_{41}) \gamma_{2,w} + BM_4 M_3 D_{43}^* \gamma_{3,w} + (C_4 + K_{42}) \gamma_{4,w} \\ & = (BM_4 M_1 D_{41}^* \gamma_{1,J-1} + BM_4 M_2 D_{42}^* \gamma_{2,J-1} + BM_4 M_3 D_{43}^* \gamma_{3,J-1}) \end{aligned} \quad (3-136)$$

ここで

$$\left. \begin{aligned}
 C_k &= \rho_w^* V_w \frac{M_k}{m_w} \\
 B &= \frac{2}{\text{ReSc}} \left( \frac{\rho_w^*}{M_w^2} \right) \frac{1}{\Delta R_{J-1}} \\
 K_2 &= \frac{m_c^{(1)}}{\rho_{in} u_{in}} \frac{M_2}{M_c} \frac{2+f}{2+2f+2\varepsilon_1} \frac{1}{\gamma_{2,w}^{n_1}} \\
 K_{31} &= -\frac{m_c^{(1)}}{\rho_{in} u_{in}} \frac{M_3}{M_c} \frac{f+\varepsilon_1}{1+f} \frac{1}{\gamma_{2,w}^{n_1}} \\
 K_{32} &= -2 \frac{m_c^{(2)}}{\rho_{in} u_{in}} \frac{M_3}{M_c} \frac{\varepsilon_2}{\gamma_{4,w}^{n_2}} \\
 K_{41} &= -\frac{m_c^{(1)}}{\rho_{in} u_{in}} \frac{M_4}{M_c} \frac{1-\varepsilon_1}{1+f} \frac{1}{\gamma_{2,w}^{n_1}} \\
 K_{42} &= \frac{m_c^{(2)}}{\rho_{in} u_{in}} \frac{M_4}{M_c} \frac{\varepsilon_2}{\gamma_{4,w}^{n_2}}, \quad n_1=0.25, \quad n_2=0
 \end{aligned} \right\} \quad (3-137)$$

である。上式中の  $\varepsilon_1$  と  $\varepsilon_2$  は、化学反応を起こすか起こさないかを制御するパラメータである。すなわち、 $C + O_2 \rightarrow CO_2$  反応だけのときは、 $f = \varepsilon_1 = 0$  とし、 $C + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$  反応だけのときには、 $f = 0$ 、 $\varepsilon_1 = 1$  とする。また、 $C + CO_2 \rightarrow 2CO$  反応を起こさせないときには、 $\varepsilon_2 = 0$  とする。

前述のように、各成分気体の拡散流束の総和が零の条件と、モル分率の定義から得られる  $\sum_k \gamma_{k,w} = 1$  の条件を満足するような (3-136) 式の解を得るために、(3-136) 式を書き換え、以下に行列で示す。

$$\begin{pmatrix}
 C_1 & (BM_1M_2D_{12}^*) & (BM_1M_3D_{13}^*) & (BM_1M_4D_{14}^*) \\
 0 & (C_2 + K_2 - BM_2M_1D_{21}^*) & (BM_2M_3D_{23}^* - BM_2M_1D_{21}^*) & (BM_2M_4D_{24}^* - BM_2M_1D_{21}^*) \\
 0 & (K_{31} + BM_3M_2D_{32}^* - BM_3M_1D_{31}^*) & (C_3 - BM_3M_1D_{31}^*) & (K_{32} + BM_3M_4D_{34}^* - BM_3M_1D_{31}^*) \\
 0 & (K_{41} + BM_4M_2D_{42}^* - BM_4M_1D_{41}^*) & (BM_4M_3D_{43}^* - BM_4M_1D_{41}^*) & (C_4 + K_{42} - BM_4M_1D_{41}^*)
 \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix}
 \gamma_{1,w} \\
 \gamma_{2,w} \\
 \gamma_{3,w} \\
 \gamma_{4,w}
 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
 BM_1M_2D_{12}^*\gamma_{2,J-1} + BM_1M_3D_{13}^*\gamma_{3,J-1} + BM_1M_4D_{14}^*\gamma_{4,J-1} \\
 BM_2M_3D_{23}^*\gamma_{3,J-1} + BM_2M_4D_{24}^*\gamma_{4,J-1} - BM_2M_1D_{21}^*(\gamma_{2,J-1} + \gamma_{3,J-1} + \gamma_{4,J-1}) \\
 BM_3M_2D_{32}^*\gamma_{2,J-1} + BM_3M_4D_{34}^*\gamma_{4,J-1} - BM_3M_1D_{31}^*(\gamma_{2,J-1} + \gamma_{3,J-1} + \gamma_{4,J-1}) \\
 BM_4M_2D_{42}^*\gamma_{2,J-1} + BM_4M_3D_{43}^*\gamma_{3,J-1} - BM_4M_1D_{41}^*(\gamma_{2,J-1} + \gamma_{3,J-1} + \gamma_{4,J-1})
 \end{pmatrix}$$

(3-138)

係数行列、定数行列の  $\gamma_{1,w}$  及び  $\gamma_{1,J-1}$  を、 $\sum_k \gamma_k = 1$  を用って、

$$1 - (\gamma_{2,w} + \gamma_{3,w} + \gamma_{4,w}) = \gamma_{1,w}$$

$$1 - (\gamma_{2,J-1} + \gamma_{3,J-1} + \gamma_{4,J-1}) = \gamma_{1,J-1}$$

によって変換した結果が (3-138)式である。(3-138)式の係数行列, 定数行列は, (3-134)式を満たしており, (3-138)式の総和は, 混合気体の質量保存式の境界条件式, すなわち,

$$\rho^* V_w = \frac{m_c^{(1)} + m_c^{(2)}}{\rho_{in} u_{in}} \quad (3-87)'$$

となる。例えば, (3-138)式において,  $\gamma_{2,m}$  の各係数のうち, 拡散項の係数の総和をとると,

$$B(M_1 M_2 D_{12}^* + M_3 M_2 D_{32}^* + M_4 M_2 D_{42}^* - M_2 M_1 D_{21}^* - M_3 M_1 D_{31}^* - M_4 M_1 D_{41}^*)$$

となり, (3-134)式において,  $h=2, k=1$  とすると (3-134)式の左辺は, 上の値の ( ) 内と同じになり, 上の値が零であるのがわかる。尚, 本解析コードでは, さらに,  $\sum \gamma_{k,w} = 1$  とするため, (3-138)式の係数行列と定数行列の第1行をすべて1とした。また, (3-137)式中の  $\gamma_{2,w}$  及び  $\gamma_{4,w}$  は, 1回前の値を使い, 線形化した。

各成分気体の質量保存式 (3-70) 式を解くとき, 本解析コードでは, これらを連立させて解かずに, 酸素, 一酸化炭素, 二酸化炭素の順に, しかも独立に解いた。すなわち, 酸素, 一酸化炭素, 二酸化炭素に対するそれぞれの (3-70) 式を解くときに, (3-70) 式中に現れる他の成分気体の質量分率には, すべて1回前の値を用いた。最後に, ヘリウムの質量分率は,  $\omega_{1,i,j} = 1 - (\omega_{2,i,j} + \omega_{3,i,j} + \omega_{4,i,j})$  より求めた。

壁面境界値の扱いについては, (3-133)式でも示したように,  $\partial\phi/\partial r|_{境界} = (\phi_w - \phi_{J-1}) / (\Delta R_{J-1}/2)$  とした。これは, 境界面外のコントロールボリューム (境界コントロールボリュームと呼ぶ) 内では, 変数  $\phi$  を一様分布とし, 境界面と境界面に隣接する流れ場内のコントロールボリュームの値で微分を差分化したためである (図3.4参照)。

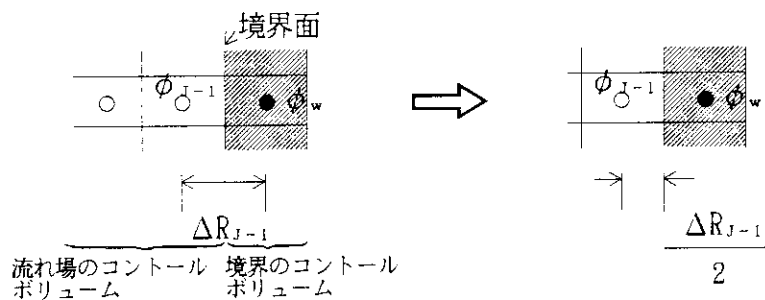


図3.4 壁面境界値の扱い

## 4. 結果と検討

### 4.1 予備計算

本解析コードを用いて以下の計算を行い、その結果が既存の結果<sup>(13)</sup>と一致することを確認した。

- ①  $Re=1000$ , 入口で一様流入条件を与え、速度場と圧力場だけを求め、(i), 中心流速の流れ方向変化, (ii), 摩擦係数の流れ方向変化を得た。
- ②  $Re=1000$ , 入口で発達した層流の速度分布, 壁温一様加熱を与え、速度場, 圧力場, 温度場を求め、熱伝達率(ヌッセルト数)の流れ方向変化を得た。

上記②の既存の結果は、Graetzの解として知られている。このGraetzの解を1%以内の精度で表すことのできる式として、

$$Nu = 1.077(x^*)^{-\frac{1}{3}} - 0.7 \quad (4-1)$$

$$Nu = 3.657 + 6.874(10^3 x^*)^{-0.488} e^{-57.2x^*} \quad (4-2)$$

が報告されている<sup>(13)</sup>。その報告では、(4-1)式から(4-2)式に切り換える $x^*$ を $x^*=0.01$ としているが、Graetz解と(4-1), (4-2)式を比較した結果、 $x^* \leq 8 \times 10^{-4}$ では(4-1)式を、 $x^* < 8 \times 10^{-4}$ では(4-2)式を使う方がGraetz解に近いNuを得られることがわかった。

図4.1に、②の計算結果とGraetz解の比較を示す。図中の実線がGraetz解であり、Nu数の発達値は3.657である。図4.1の「○」は、 $Re=100$ の場合であり、軸方向熱伝導を無視した場合の本計算結果を示している。Graetz解は、軸方向熱伝導を無視したときの解析解であり、本計算結果は、入口付近においてもGraetz解と良く一致している。図4.1の「●」は、 $Re=100$ であり、「○」と同じであるが、軸方向熱伝導を考慮した場合である。 $x^* \leq 10^{-3}$ の入口付近では、本計算結果はGraetz解より大きくなっている。また、軸方向熱伝導を考慮した $Re=100$ でも、 $x^* \leq 2 \times 10^{-4}$ では、本計算結果はGraetz解よりわずかに大きくなっている。なお、 $Re=1000$ の場合の本計算結果は、他の記号と重なるため、図4.1において、 $x^* \leq 10^{-3}$ の所だけプロットした。

流れ方向熱伝導の影響については、熱伝達問題においても、 $Re > 200$ では、ヌッセルト数に及ぼす流れ方向熱伝導の影響をほぼ無視することができ、 $Re \geq 10$ では、ヌッセルト数の発達値さえ、一様壁温に対するGraetz解の発達値3.657より大きくなることわかって<sup>(13)</sup>いる。

以下の数値解析では、別途計画中の物質伝達実験での条件を与え、次の条件を基準条件とした。

入口レイノルズ数	$Re = 100$	}	(4-3)
入口での酸素質量分率	$\omega_{O_2, in} = 0.2$		
温度	$T = 1200^\circ\text{C}$		
反応区間長さ	$x/d = 10$		

パラメータ計算を行う前に、(i), メッシュ数, (ii), 反応区間の上流と下流の非反応区間の長さ, (iii), 出口境界条件, (iv), 緩和係数, などの影響を調べた。(i)~(iv)の項目は、お互いに影響し合うが、最終的には、メッシュ数については、流れ方向×半径方向を $27 \times 25$ メッシュに分割し、反応区間の上、下流の非反応区間の長さをそれぞれ、2, 3直径として、出口境界条件を  $\partial^2 \omega / \partial x^2 |_{x=l} = 0$  とし、計算条件毎に緩和係数を経験的に変化させた。

$40 \times 40$ メッシュに分割した場合のシャーウッド数と $27 \times 25$ メッシュのシャーウッド数は、高々0.1%の差であった。計算時間(原研のVP-2600マシンを用いて、(4-3)式の計算条件でcpuは57分57秒であった。)とシャーウッド数の精度を考えると、本解析では、 $27 \times 25$ メッシュとした。反応区間の上・下流の非反応区間の長さについては、上、下流の非反応区間の長さがそれぞれ1, 2直径以上ではシャーウッド数に変化がなかったため、少し余裕をとって、上流に2直径、下流に3直径の非反応区間を設け、全長を15直径とした。質量分率の出口境界条件として、 $\partial^2 \omega / \partial x^2 |_{x=l} = 0$  もしくは、 $\partial \omega / \partial x |_{x=l} = 0$  を与えた。どちらの場合もシャーウッド数の結果に変化はなかったため、 $\partial^2 \omega / \partial x^2 |_{x=l} = 0$  を用いた。収束回数を少なくするためには、緩和係数をうまく調整すればよい。本解析では、温度が低いほど、入口での酸素質量分率が小さいほど、入口レイノルズ数が大きいほど、緩和係数を大きくとることができた。(4-3)式の基準条件では、圧力、流れ方向速度、半径方向速度、各質量分率の緩和係数は、それぞれ、0.25, 0.3, 0.3, 0.25とした。

#### 4.2 吹き出し流れの数値解析(単成分気体の流れ)

黒鉛と酸素の化学反応によって酸素が消失し、代わりに一酸化炭素と二酸化炭素が発生する。このとき、固体の炭素が気体になった分だけ、黒鉛壁から流体中へ質量流入が生じる。数値計算において、この流入質量を模擬するには、単純な方法としては、各成分の質量保存式の境界条件で流入質量だけを与える方法と、この流入質量を(3-87)式のように壁面に垂直な流束として運動量保存式にも与える方法が考えられる。ここでは、各成分気体の質量保存式に壁面からの質量流入を与え、さらに、壁面に垂直な流速を運動量保存式にも与えることによって黒鉛の固気化学反応を模擬し、物質伝達率に及ぼすこの吹き出し流れの影響を調べる。このため、本解析コードに追加した単成分気体に対するエネルギー保存式を成分気体の質量保存式の代わりに用い、エネルギー保存式と運動量保存式を解く。このとき、物性値は一定とする。物質伝達率を求めるため、エネルギー保存式のPr数に、Sc数の値を与え、得られたNu数をSh数とする。エネルギー保存式の計算では、以下で使う入口での酸素質量分率とは、エネルギー式の入口気体温度(無次元数)、壁面の酸素質量分率とは、壁温(無次元数)である。エネルギー保存式では、固気化学反応条件に対応するのは、酸素の場合には冷却壁条件であり、この冷却壁区間に、一様な吹き出し流れ:  $Re_w = \text{一定値}$  を与えて、固気化学反応を模擬する。実際には、黒鉛と酸素の固気化学反応では、酸素が消失するため、流れ方向に反応量が減少し、壁面からの流入質量も減少する。このため、これに対応させて、本節の計算でも反応区間で流れ方向に吹き出し流れを減少させる必要がある。しかしながら、まず、物質伝達特性に及ぼす吹き出し流れの影響の大略を把握するため、冷却壁区間(すなわち反応区間)に一

様な吹き出し流れ： $Re_w =$ 一定値を与えた。

上述のように、単成分気体に対するエネルギー保存式を用いて、ある成分気体の質量保存式の解を得るため、エネルギー保存式における各値を以下のように読み替える。

- 入口気体無次元温度  $T_{in}$  → 入口酸素質量分率  $\omega_{O_2,w}$
- 無次元壁温  $T_w$  → 壁酸素質量分率  $\omega_{O_2,w}$
- プラントル数  $Pr$  → シュミット数  $Sc$
- ヌッセルト数  $Nu$  → シャーウッド数  $Sh$

したがって、例えば、入口での酸素質量分率と壁酸素質量分率をそれぞれ0.2と0とするには、解析コードでは、 $T_{in}=0.2$ 、 $T_w=0$ とすれば良い。以下の計算では、入口で層流の発達した速度分布を与え、全長15直径、吹き出し区間10直径（1～11直径）とした。

以下に、本数値解析で得られた結果について述べる。

(1) 物質伝達率に及ぼす  $\omega_{O_2,in}$  と  $\omega_{O_2,w}$  の影響、

$Re_w = 0$  として、 $\omega_{O_2,in}$  と  $\omega_{O_2,w}$  の値を

- $\omega_{O_2,in} = 0,$                        $\omega_{O_2,w} = 1$
- $\omega_{O_2,in} = 1,$                        $\omega_{O_2,w} = 0$
- $\omega_{O_2,in} = 0.2$                        $\omega_{O_2,w} = 0$
- $\omega_{O_2,in} = 0.2$                        $\omega_{O_2,w} = 0.1$

と変えて  $Sh$  数を計算した。 $Sh$  数の流れ方向分布に変化はなかった。

(2)  $Re$  数を変化させたときの物質伝達率に及ぼす  $Re_w$  の影響の程度

$\omega_{O_2,in} = 0.2$ 、 $\omega_{O_2,w} = 0$  として、 $Re = 100$  と  $1000$  の場合に対して、 $Re_w$  を、 $Re_w = 0, -1, -2, -5$  を与えたときの  $Sh$  数を計算した。この結果、 $Sh$  数に及ぼす  $Re_w$  の影響の程度は、 $Re$  数に依存しないことがわかった。吹き出し区間の最下流における  $Sh$  数を以下に示す。

Re数 Re <sub>w</sub>	100	1000
0	3.673	3.673
-1	2.980	2.979
-2	2.371	2.370
-5	1.100	1.099

(3)  $Re$  数を変化させたときの全質量流束に基づく物質伝達率に及ぼす  $Re_w$  の影響の程度

$\omega_{O_2,w} = 0.01$  として、(2)と同様の計算を行い、全質量流束に基づく  $Sh^*$  数を計算した。 $Sh^*$  数に及ぼす  $Re_w$  の影響の程度は、 $Re$  数に依存しなかった。 $Sh^*$  数と  $Sh$  数に及ぼす  $\omega_{O_2,w}$  の影響については次項で述べる。

(4) 拡散流束に基づく物質伝達率及び全質量流束に基づく物質伝達率に及ぼす  $\omega_{O_2,w}$  の影響

(3-112)式に示したように、全質量流束は、拡散流束に  $(\rho_b V_w \omega_{k,w})$  分だけ加えたものであり、 $V_w$ が負であるから、この項は負となり、全質量流束は、拡散流束より小さくなる。この小さくなる程度は、 $V_w$  と  $\omega_{k,w}$  の値に依っている。酸素の場合には、もし、完全に物質伝達律速領域であれば、黒鉛と酸素の反応は、ほとんど黒鉛壁面で起こり、 $\omega_{O_2,w} \sim 0$  となる。このときには、 $(\rho_b V_w \omega_{O_2,w})$  の項は、ほとんど零になり、Sh数とSh\*数は同じ値となる。しかしながら、完全に物質伝達律速領域ではない場合には、黒鉛壁面で反応しなかった酸素が黒鉛細孔内に拡散するため、 $\omega_{O_2,w} \neq 0$  となる。このときの  $\omega_{O_2,w}$  の及ぼす影響を調べた結果を以下に示す。例えば、 $Re = 100$ ,  $Re_w = -2$ ,  $\omega_{O_2,in} = 0.2$  では、吹き出し区間の最下流で以下のようになる。

$\omega_{O_2,w}$	Sh数	Sh* 数
0	2.371	2.371
0.001	2.371	2.296
0.002	2.372	2.221
0.005	2.375	1.990
0.01	2.380	1.587
0.04	2.416	- 1.409

図4.2に、Sh数及びSh\*数に及ぼす $Re_w$ の影響と  $\omega_{O_2,w}$  の影響を示す。図中の実線は、Graetz解であり、前述のように  $x^* \leq 1 \times 10^{-3}$  の上流部を除いて、 $Re_w = 0$  の場合のSh数を示していると考えてよい。図中の3本の破線は、 $Re_w = -1, -2, -5$  と変化させた場合のSh数である。 $Re_w$  が小さくなればなる程、Sh数も減少している。図中の一点鎖線と二点鎖線は、 $Re_w = -2$  において、 $\omega_{O_2,w}$  を0.01と0.04と変化させた場合のSh\* 数である。 $\omega_{O_2,w} = 0$  の場合に比べて、 $\omega_{O_2,w}$  を大きくするとSh\* 数は減少しているのがわかる。特に、 $\omega_{O_2,w} = 0.04$  では、下流では大きく減少している。

#### (5) 一酸化炭素と二酸化炭素の全流束に基づく物質伝達率に及ぼす $Re_w$ の影響

酸素のSh数を調べる場合には、エネルギー式において冷却壁（ガス温度>壁温）が成分気体の質量保存式における消失壁（ガス中の成分の質量分率>壁での質量分率）に対応するため、冷却壁条件でエネルギー式を解けば良かった。これに対し、一酸化炭素及び二酸化炭素のSh数を調べる場合には、発生壁となるので、加熱壁条件でエネルギー式を解くことになる。本計算では、成分気体の区別は、Sc数を変えることによってしか行えない。したがって、ここでの計算は、一酸化炭素もしくは二酸化炭素のSh\*数に及ぼす $Re_w$ の影響を定性的に調べるにとどめる。 $\omega_{k,in} = 0$ ,  $\omega_{k,w} = 0.2$ ,  $Re = 100$  として、 $Re_w$ を変化させた。その結果、 $Re_w$ が小さくなると、Sh\* は増加することがわかった。

### 4.3 黒鉛酸化を伴う多成分気体の数値解析

入口レイノルズ数をパラメータとした場合の酸素のSh数の流れ方向分布を図4.3に示す。入口での酸素の質量分率は0.2であり、黒鉛温度は1200°Cである。流れ方向の拡散が影響する管路の入口付近（例えば、 $Re=50$ では、 $x^* \leq 3 \times 10^{-3}$ 、 $Re=100$ では、 $x^* \leq 1 \times 10^{-3}$ ）を除いて、酸素のSh数は、入口レイノルズ数の影響を受けなかった。入口付近では、流れ方向の拡散の影響によって入口レイノルズ数が1000の場合に比べ、入口レイノルズ数が小さくなるに連れ、酸素のSh数は大きくなっている。このような流れ方向の拡散の影響については、熱伝達問題でも見られる。ヌセルト数に及ぼす流れ方向の熱伝導の影響について、 $Re \geq 200$ では、流れ方向の熱伝導の影響をほとんど無視することができ、 $Re \leq 10$ では、ヌセルト数の発達値さえ、一様壁温に対するグレッツ解の発達値3.657より大きくなることわかっていて<sup>(13)</sup>。

図4.4に、基準条件での入口での酸素の質量分率をパラメータとした場合の酸素のSh数の流れ方向分布を示す。図中の破線は、一酸化炭素の燃焼がないとした場合であり、入口での酸素の質量分率が $10^{-6}$ と非常に小さい場合の酸素のSh数は、黒鉛の固気化学反応も一酸化炭素の燃焼反応もない場合であり、 $x^* \leq 10^{-3}$ では、熱伝達問題のグレッツ解（一様壁温条件）のヌセルト数に等しい。図4.4からわかるように、一酸化炭素の燃焼反応が酸素のSh数を小さくしているのがわかる。また、入口での酸素質量分率が大きくなるほど、酸素のSh数は小さくなる。

図4.5に、温度をパラメータとしたときの酸素のSh数の流れ方向分布を示す。図4.4と同様に、図4.5の破線は、一酸化炭素の燃焼がない場合の酸素のSh数であり、 $\omega_{O_2, in} = 10^{-6}$ で示した破線は、化学反応がない場合の酸素のSh数を示している。一酸化炭素の燃焼反応がない場合には、高温になるほど酸素のSh数が小さくなるが、1400°C以上では酸素のSh数はほとんど変化しなくなる。これは、完全な物質伝達律速領域にあり、物質伝達率がほとんど温度の影響を受けないことを示している。一方、一酸化炭素の燃焼反応がある場合でも、高温になればなるほど酸素のSh数の減少のしかたが小さくなっている。しかしながら、一酸化炭素の燃焼がない場合とは違って、一酸化炭素の燃焼反応がある場合の1400°Cと1600°Cの酸素のSh数には少し差がある。これは、高温ほど一酸化炭素の燃焼の反応速度が速くなるためであり、ダムケラ数がほぼ「平衡」と言われるほど大きくなれば、酸素のSh数の減少も止まると考えられる。「平衡」とは、化学反応速度が流れの速度に比べ十分大きく、化学反応がその場で瞬間に起こることを言う。これとは逆に、化学反応速度が流れの速度に比べ十分小さく、化学反応が起こらないまま、流れに運ばれて体系外に出てしまう場合は、「凍結」と呼ばれる。

図4.5では、実線の1400°Cと1600°Cの場合の酸素のSh数の流れ方向分布は同じ形を示しているが、1000°C、1200°Cのそれらは、形が違っている。1000°Cの場合には、下流ほど酸素のSh数の減少が大きい。これは、次のように説明できる。前述のように、一酸化炭素の燃焼反応速度が温度と共に大きくなる、即ち、ダムケラ数が大きくなるが、1000°C付近ではまだダムケラ数がそれほど大きくなく、また、十分小さくもないため、ちょうど「平衡」と「凍結」の間であり、入口付近で発生した一酸化炭素は、すぐにその場で反応せず、少し下流に流されてから反応するため、上流では



酸素のSh数は、破線に比べあまり低下せず、下流では、一酸化炭素の燃焼の影響によって酸素のSh数が低下することになる。

図4.6には、基準条件における黒鉛の壁面ダムケラ数を示す。この黒鉛の壁面ダムケラ数は、黒鉛の腐食速度を無次元化した値である。横軸は、温度の逆数であり、この図4.6は、黒鉛の腐食速度と温度の関係を示している。800℃以下では、入口と出口での黒鉛の腐食速度にほとんど差がなくなっており、黒鉛の腐食速度が、細孔内拡散過程に支配されていることがわかる。全反応領域で黒鉛の腐食速度が温度に依存しなくなるのは、約1200℃以上であり、1200℃以上では、ほぼ物質伝達律速領域と言える。本数値解析で用いた細孔内拡散律速領域の黒鉛の腐食速度は、IG-110黒鉛に対して得られたものであり、IG-110黒鉛では、細孔内拡散律速領域と物質伝達律速領域との境界は、800℃から1200℃の間を持っていることがわかる。

図4.7に、基準条件における酸素、一酸化炭素、二酸化炭素のバルク質量分率の流れ方向変化を示す。横軸は、流れ方向距離であり、 $0 \leq \frac{x}{d} \leq 10$ が反応区間である。図中の破線は、一酸化炭素の燃焼反応がない場合である。この1200℃という温度では、一酸化炭素と二酸化炭素の発生モル分率比は、(3-94)式から、11.9であり、一酸化炭素が圧倒的に多く、この図から反応区間の出口で、一酸化炭素の質量分率は、二酸化炭素のその約8倍となっているのがわかる。しかしながら、一酸化炭素の燃焼反応を考慮すると、反応区間全域にわたってほとんどの一酸化炭素が燃焼しており、反応生成物の二酸化炭素が代りに大きく増加している。

図4.8に、反応開始点から $x/d = 4$ における各成分気体の質量分率の半径方向分布を示す。図4.7と同様の条件であり、破線は、一酸化炭素の燃焼反応がない場合である。一酸化炭素の燃焼反応を考慮した場合の二酸化炭素の質量分率での壁面での勾配は、一酸化炭素の燃焼反応がない場合のそれに比べ、小さくなっており、ほぼ零となっている。壁面近傍を除いて、一酸化炭素は、管断面全域で燃焼している。

図4.9に基準条件における各化学反応が酸素のSh数に及ぼす影響を示す。固・気、気・気相化学反応のすべてを考慮すると、図中の「(1)+(2)+(3)+(4)」の矢印で示した実線の酸素のSh数となる。黒鉛と二酸化炭素の固気化学反応の影響は、「(1)+(2)+(3)+(4)」と「(1)+(2)+(4)」で示した2本の実線を比べればわかるように、下流でわずかに差が見られる程度である。黒鉛の酸化反応では、図4.9の「(1)」の二酸化炭素を生成する反応だけを考慮した酸素のSh数の方が、「(2)」の一酸化炭素を生成する反応だけを考慮したそれよりわずかに大きい。これは、拡散によって黒鉛壁面まで輸送されてきた同じ質量の酸素に対して、(1)の反応より(2)の反応の方が、黒鉛壁面から流体へ多くの流入質量を生じるためである(例えば、16gの酸素に対して、(1)では22gの二酸化炭素が、(2)では28gの一酸化炭素が流入する)。(1)と(2)の両方の反応を考慮した酸素のSh数が(2)だけの反応を考慮したそれにほぼ等しいのは、この温度では、(2)の一酸化炭素生成反応がほとんどだからである。

図4.10には、図4.9と同様に、温度が1000℃の場合の各化学反応の影響を示す。図4.9と図4.10を比較すると、一酸化炭素の燃焼反応による酸素のSh数の減少の程度が高温ほど大きくなっているのが良くわかる。

図4.11に、基準条件における各成分気体のSh数を示す。図中の実線と破線は、拡散流束に基づく

Sh数であり、点線は、全質量流束に基づくSh数であり、 $Sh_k^*$ と表して区別している。また、実線と点線は、一酸化炭素の燃焼反応と考慮した場合であり、破線は、一酸化炭素の燃焼反応を考慮していない場合である。図4.11で、一酸化炭素の燃焼反応は、酸素と二酸化炭素のSh数を減少させ、一酸化炭素のSh数を増加させるのがわかる。 $Sh_k$  (図中の実線)と $Sh_k^*$  (点線)を比較すると、酸素では $Sh_k > Sh_k^*$ であり、一酸化炭素と二酸化炭素では $Sh_k < Sh_k^*$ となっている。

これらの特性は、表4.1のように整理すると容易に理解できる。表4.1中の1つのます目の中の値は、Sh数であり、上・下段は、それぞれ、反応区間の入口・出口における値である。表4.1の上には、黒鉛壁面での各成分気体の固気相化学反応による物質条件を、左側には、流体内部での各成分気体の気・気相化学反応による条件を、右側には、混合気体の壁面条件を示した。黒鉛壁面での各成分気体に対する条件は、生成壁と消失壁の2種類であり、これらは、熱伝達問題では加熱壁と冷却壁に対応する。流体内部の条件では、生成項と消失項の2種類であり、これらは、熱伝達問題では発熱項と吸熱項に対応する。反応に関与する各生成気体、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素を、壁面条件と流体内部の条件によって、表4.1のように点線で囲んだ区域にそれぞれ割りつけることができる。さらに、各成分気体の1区画内を、物質伝達率を求めたときの質量流束の種類(拡散流体と全質量流束)と一酸化炭素の燃焼反応の有無によって、4つに区分した。これらに本解析で得られた値を記入したものが表4.1である。

表中の矢印は、矢印の方向にSh数が大きくなることを示す。水平な矢印の左右の向きは、流体内部で生成するか消失するか、即ち、一酸化炭素の燃焼反応の有無によって決まり、垂直な矢印の上・下の向きは、壁面からの質量流入によって決まる。これらの矢印は、物質伝達特性を定性的に表している。表中の( )内には熱伝達の場合を示しており、熱伝達特性を物質伝達特性と全く同様の特性を示す。

図4.12に、基準条件に対して、混合気体の運動量保存式において、壁面に垂直な速度 $V_w$ を与える場合と与えない場合の酸素のSh数を示す。いずれの場合も、各成分気体の質量保存式において、壁面から流体への質量流入を考慮している。この条件下では、 $V_w$ を与えるか与えないかによる酸素のSh数の差はわずかであるのがわかる。また、その差は、入口付近で大きく、出口付近ではほとんどない。壁面における固気化学反応を流れの数値解析にいかに取り込むかによって物質伝達特性が変わると考えられるが、質量流入を単に質量流入だけとして扱った場合( $V_w$ なし)と質量流入に加えて、混合気体の流れにも $V_w$ として影響を加えた場合では、酸素のSh数に大きな変化は見られなかった。

一酸化炭素の燃焼反応がない場合、図4.5から、温度が1200°C以上の物質伝達律速領域では、酸素のSh数は温度に依存しないことがわかった。また、図4.3から酸素のSh数は、入口レイノルズ数にも依存しないことも明らかになった。したがって、一酸化炭素の燃焼反応がない場合には、酸素のSh数は、入口での酸素質量分率だけの関数である。しかし、酸素のSh数は、入口の条件よりむしろ黒鉛壁面での化学反応速度に関係しているはずである。黒鉛壁面での化学反応速度の無次元数として、壁面ダムケラ数 $Da_{w,k}$ がある。ここでは、 $Da_{w,k}$ の代りに壁面レイノルズ数を用い、一酸化炭素の燃焼反応がない場合の酸素のSh数を図4.13に示す。たて軸には、入口での酸素質量分率を

$10^{-6}$ と非常に小さくした（化学反応がほとんどない）場合の酸素のSh数 $Sh_{O_2,0}$ で、一酸化炭素の燃焼がない場合の酸素のSh数 $Sh_{O_2,0}$ を規格化した値を示した。 $Re_w$ は、(3-113)式によって計算される。図4.13からわかるように、 $|Re_w|$ が大きくなるほど $Sh_{O_2,1}/Sh_{O_2,0}$ は直線的に小さくなっている。その勾配は、入口より出口に行く程大きくなっている。

一酸化炭素の燃焼反応がSh数に及ぼす影響は、ダムケラ数で表わされると考えられる。しかしながら、本解析体系では、流れ方向距離、入口での酸素質量分率、温度が影響しており、ダムケラ数だけでは、うまく一酸化炭素の燃焼反応の影響を表せなかった。そこで、図4.14に、横軸に入口での酸素の質量分率をとった場合と、横軸に温度の逆数をとった場合について、酸素のSh数を示す。たて軸には、酸素のSh数を一酸化炭素の燃焼反応がない場合の $Sh_{O_2,1}$ で規格化した値を示した。

図4.14の上の図から、入口での酸素の質量分率の増加と共に、 $Sh_{O_2}/Sh_{O_2,1}$ が直線的に減少しているのがわかる。また、図4.14の下の図から、高温になるほど、 $Sh_{O_2}/Sh_{O_2,1}$ が減少し、流れ方向距離に関係なく、 $Sh_{O_2}/Sh_{O_2,1}$ の値は一定値に近づいているのがわかる。

## 5. ま と め

高温ガス炉の配管破断事故に関連して、物質伝達律速領域における黒鉛の腐食量や一酸化炭素の発生量を求めるために、ヘリウム、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素の4成分気体系において、流路管壁面での固気化学反応（黒鉛と酸素及び黒鉛と二酸化炭素の化学反応）、ならびに、流体中での気相同士の化学反応（一酸化炭素の燃焼反応）がある場合の円管内層流の数値解析を行った。入口レイノルズ数、入口での酸素質量分率、温度、化学反応の種類をパラメータとして、各成分気体の物質伝達率を計算した。その結果、以下の事が明らかになった。

- (1) 入口レイノルズ数は、物質伝達率に影響を及ぼさない。
- (2) 入口での酸素質量分率、温度の増加は、酸素の物質伝達率を減少させる。
- (3) 一酸化炭素の燃焼反応は、酸素の物質伝達率を減少させる。
- (4) 黒鉛の固気化学反応は、酸素の物質伝達率を減少させる。
- (5) 一酸化炭素の燃焼反応及び固気化学反応が他の成分気体の物質伝達率に及ぼす影響を定性的・定量的に把握した。
- (6) 物質伝達律速領域では、壁面での固気化学反応の結果である壁面から流体への質量流入を、各成分気体の質量保存式の壁面境界で単に流入質量を与えた場合と、それに加えて混合気体の運動量保存式の壁面条件として壁面に垂直な速度を与えた場合とでは、酸素の物質伝達率にそれほど大きな差は見られなかった。
- (7) 黒鉛と二酸化炭素の化学反応が酸素の物質伝達率に及ぼす影響は、ほとんどなかった。

## 参 考 文 献

- (1) Saito, S., Tanaka, T. and Sudo, Y., Nucl. Eng. Des., 132 (1991), 85.
- (2) Hishida, M. and Takeda, T., Nucl. Eng. Des., 126 (1991), 175.
- (3) 原研, 高温ガス炉研究開発の現状, (1989).
- (4) Rossberg, M., Wicke, E., Chemie-Ing-Tech., 28 (1956), 181.
- (5) 今井 久ら, JAERI M82-067 (1982).
- (6) 川上 春雄, FAPIC, 105 (1983), 2.
- (7) Hino, T., J. Nucl. Sci. Technol., 28-1 (1991), 20.
- (8) 小川 益郎, 機論, 53-488 (1987), 1351.
- (9) 甲藤 好郎ら編, 伝熱学特論, 養賢堂, 東京 (1984), 183.
- (10) 水谷 幸夫, 香月 正司訳, S. V. Patankar 原著, コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, 森北出版(株) (1983).
- (11) 小川 益郎, 日本原子力学会誌, 印刷中.
- (12) 武田 哲明, 韓 兵, 小川 益郎, JAERI M 92-131 (1992).
- (13) Shah, R. K. and London, A. L. : "Laminar Flow Forced Convection in Ducts", Academic Press, New York • San Francisco • London (1978), 103.

表 4.1 各成分気体のSh数に及ぼす各条件の影響

$\omega_{O_2,in} = 0.2, T = 1200^\circ C, Re = 100$  上段：反応区間入口，下段：反応区間出口

流体内部での各成分気体の反応条件 (気相化学反応)	黒鉛壁面での各成分気体の固相化学反応の物質条件		物質伝達率の定義	混合気体の壁面条件 質量流入 (吹き出し)
	生成壁 (加熱壁)	消失壁 (冷却壁)		
生成項 (発熱項)	CO <sub>2</sub>		拡散流束	↑
	CO		全流束	
消失項 (発熱項)	CO <sub>2</sub>		拡散流束	↓
	CO		全流束	
一酸化炭素の燃焼	有り	無し	有り	無し

流体内部での各成分気体の反応条件 (気相化学反応)
   
 生成項 (発熱項): CO<sub>2</sub> (3.79, -0.05), CO (5.70, 0.25)
   
 消失項 (発熱項): CO<sub>2</sub> (29.42, 10.77), CO (31.00, 10.85)
   
 生成壁 (加熱壁) での物質条件: CO<sub>2</sub> (22.46, 3.45), CO (24.61, 3.86)
   
 消失壁 (冷却壁) での物質条件: CO<sub>2</sub> (15.98, 2.05), CO (15.73, 2.05)
   
 全流束: CO<sub>2</sub> (18.88, 3.264), CO (18.53, 3.262)

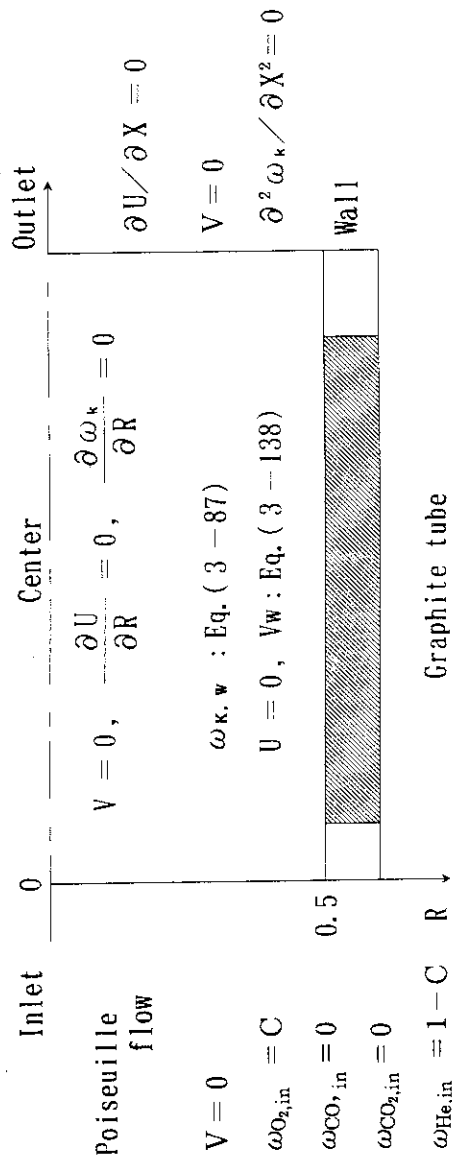


図3.2 計算体系と境界条件

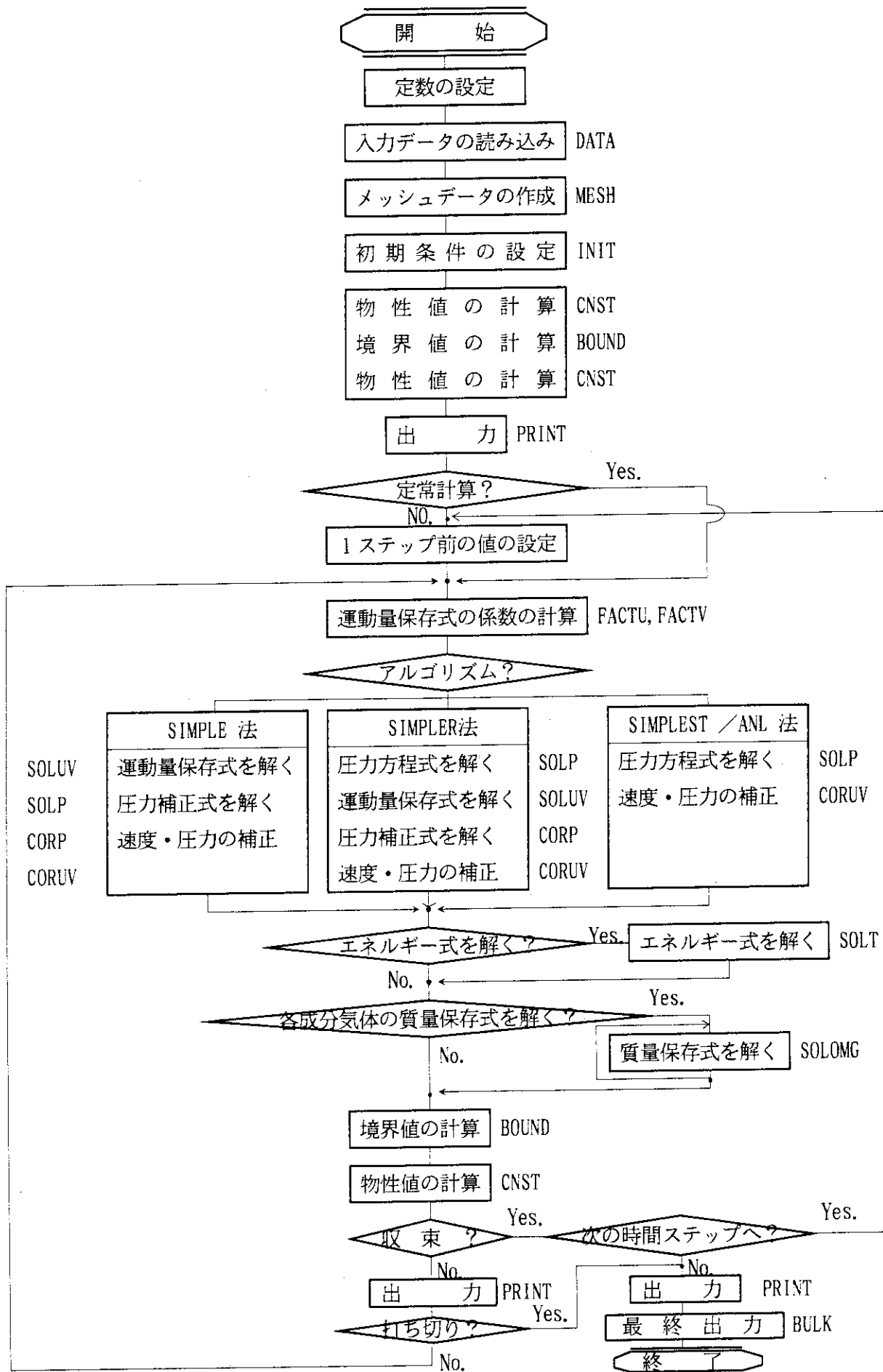


図3.3 フローチャート



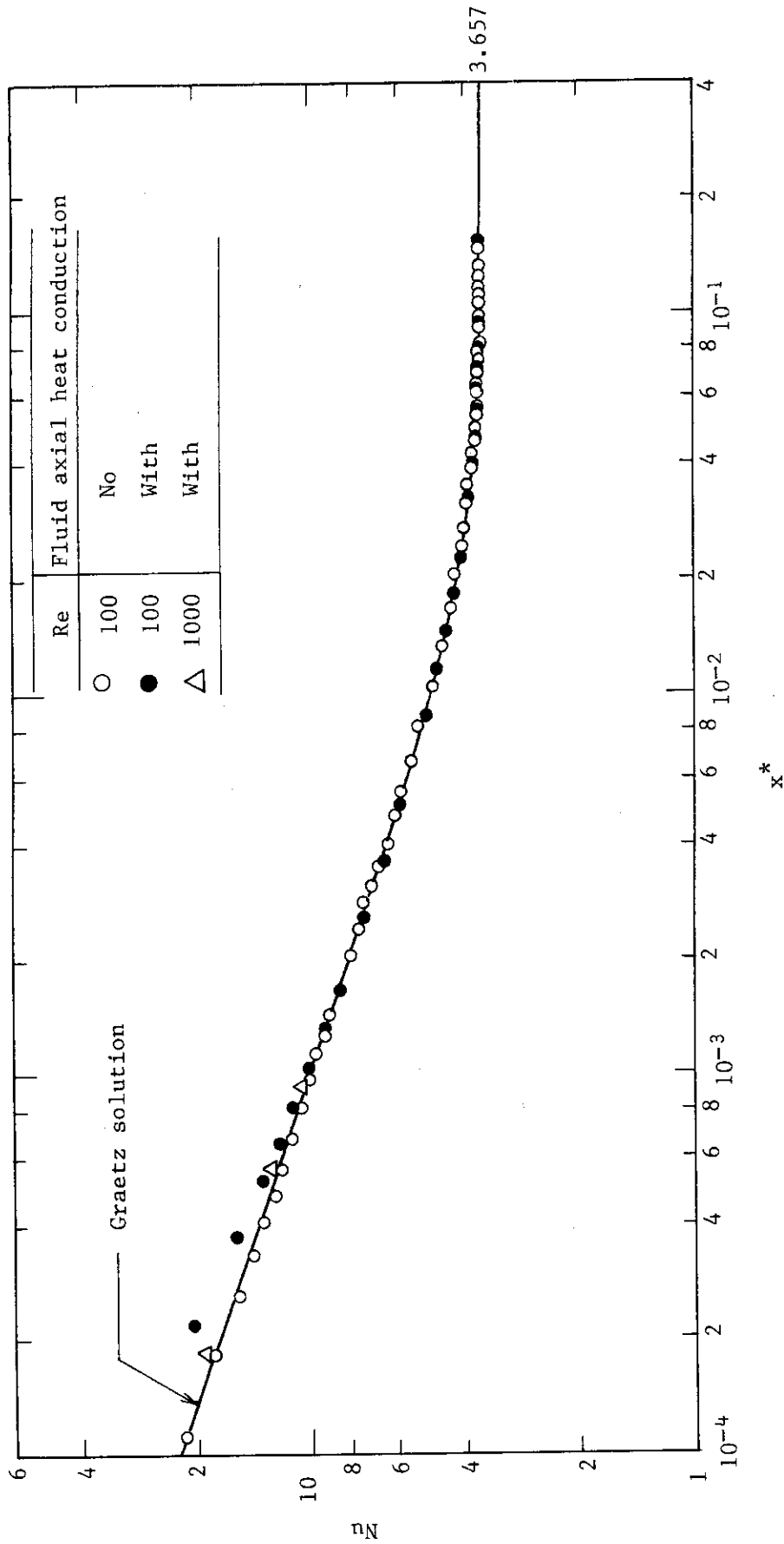


図4.1 一様壁温条件に対するNu数の流れ方向分布

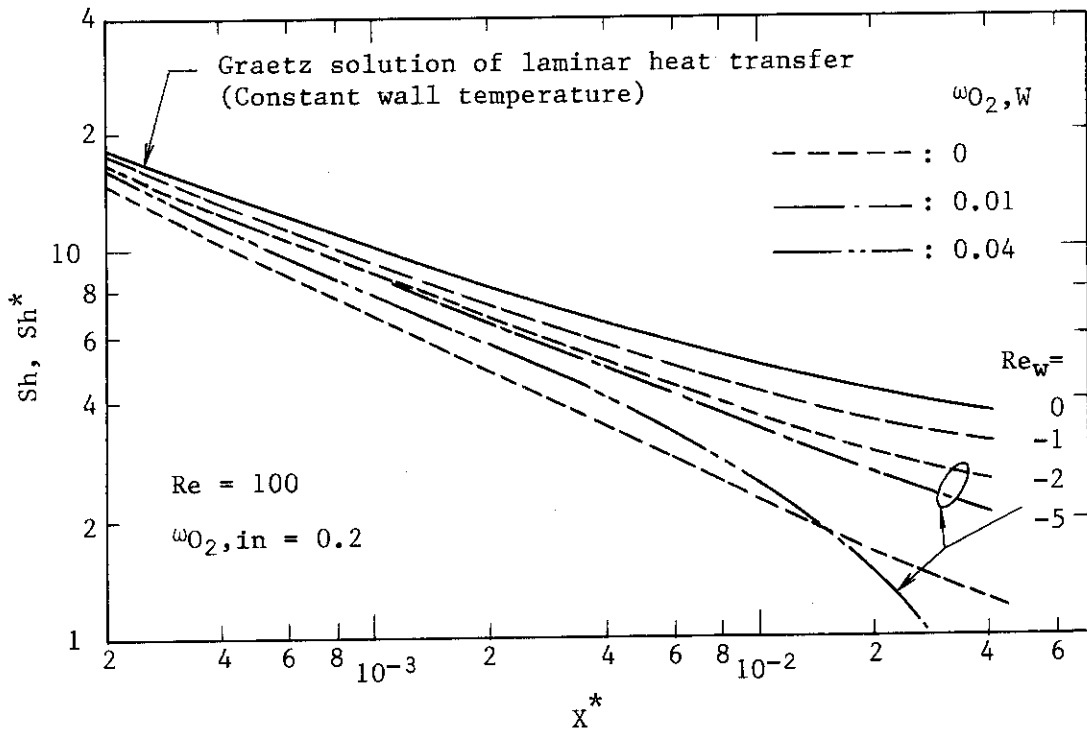


図4.2 Sh数及びSh\*数に及ぼす $Re_w$ と $\omega_{O_2,w}$ の影響

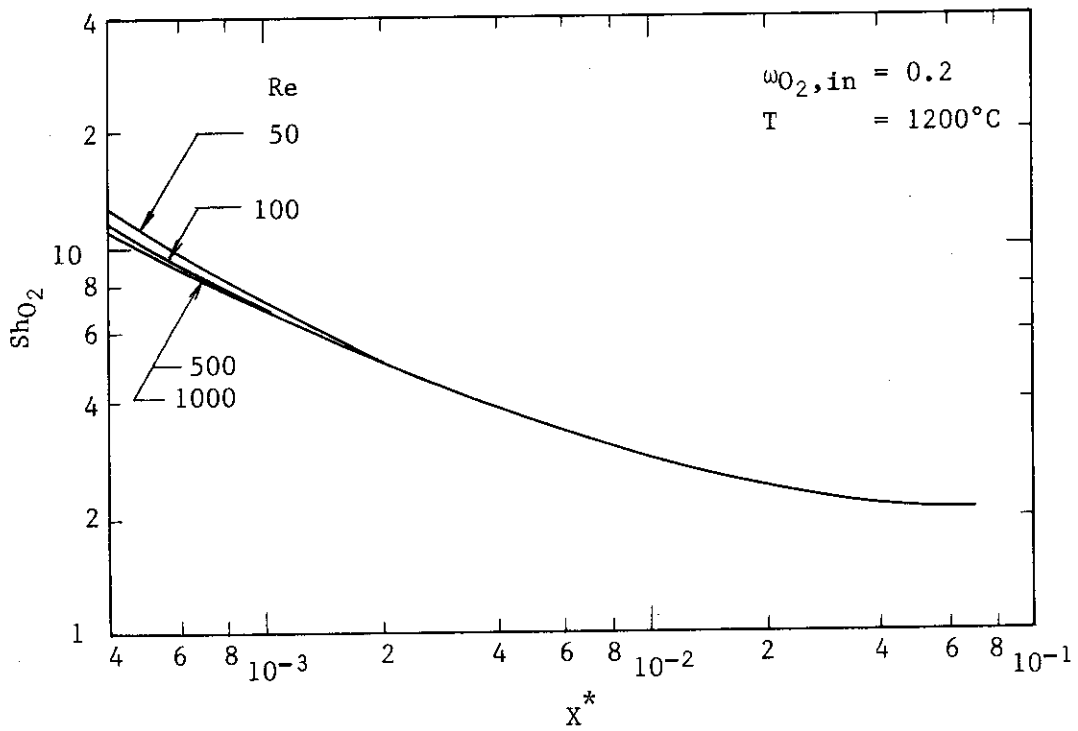


図4.3 酸素のSh数に及ぼす入口Re数の影響

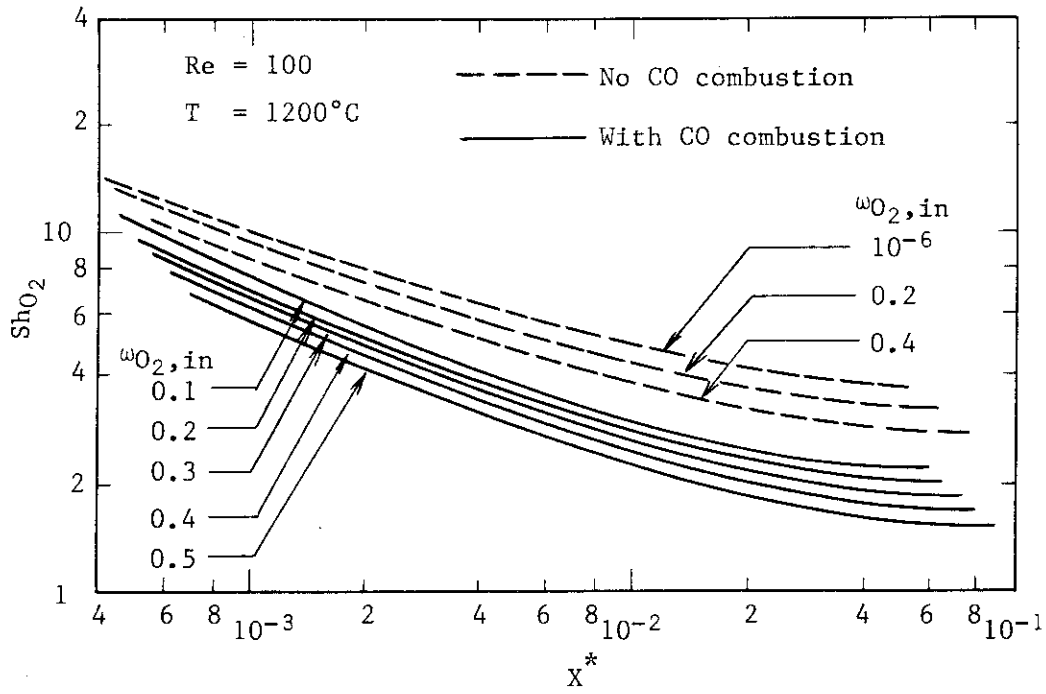


図4.4 酸素のSh数に及ぼす入口での酸素質量分率の影響

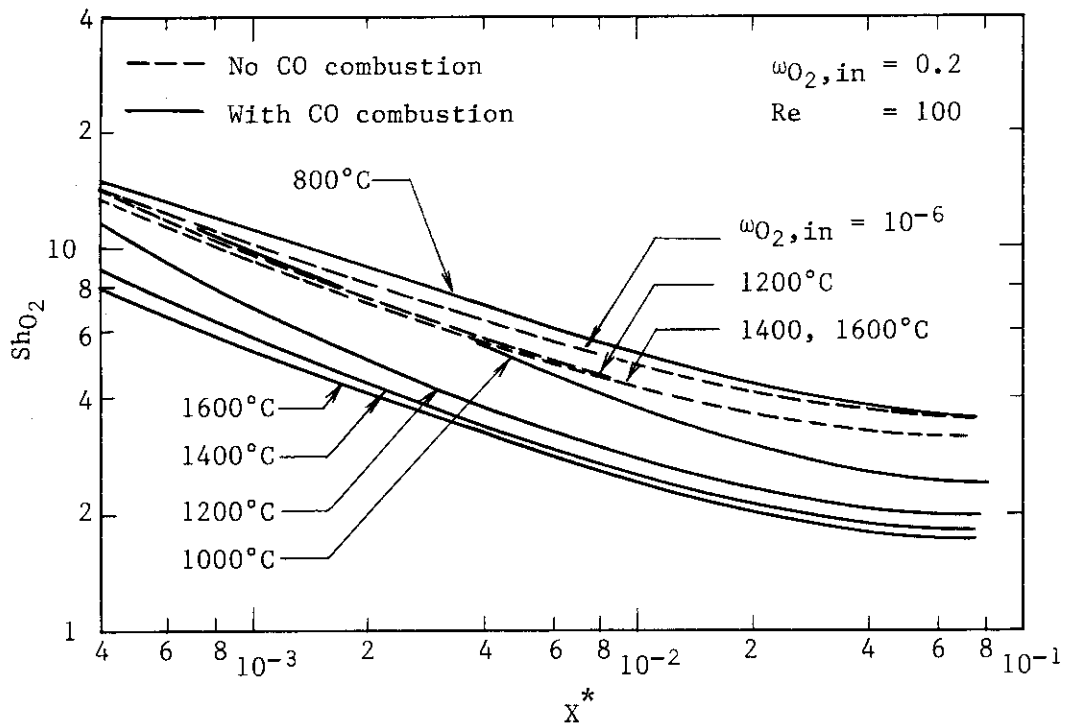


図4.5 酸素のSh数に及ぼす温度の影響

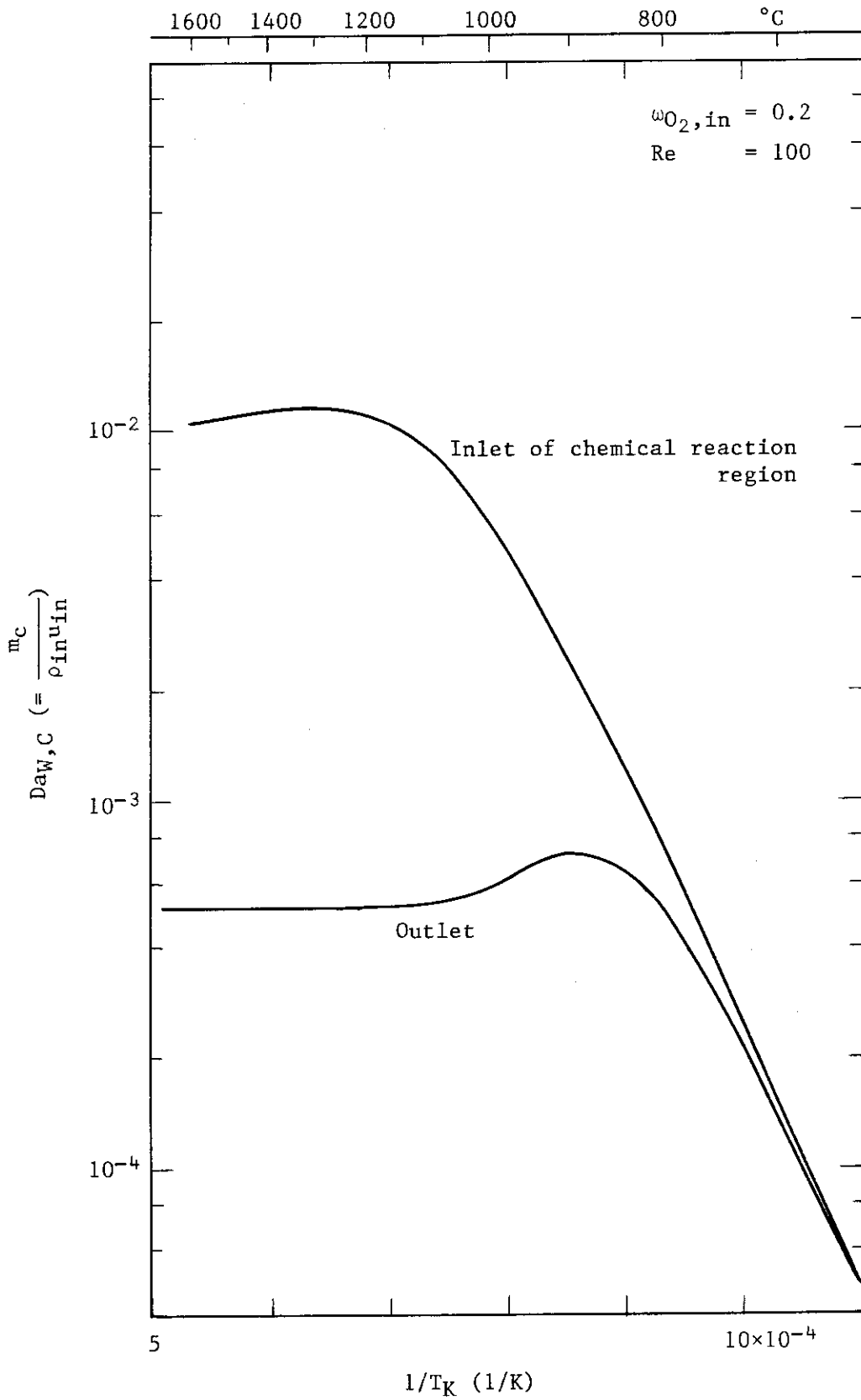


図4.6 黒鉛の腐食速度と温度の関係

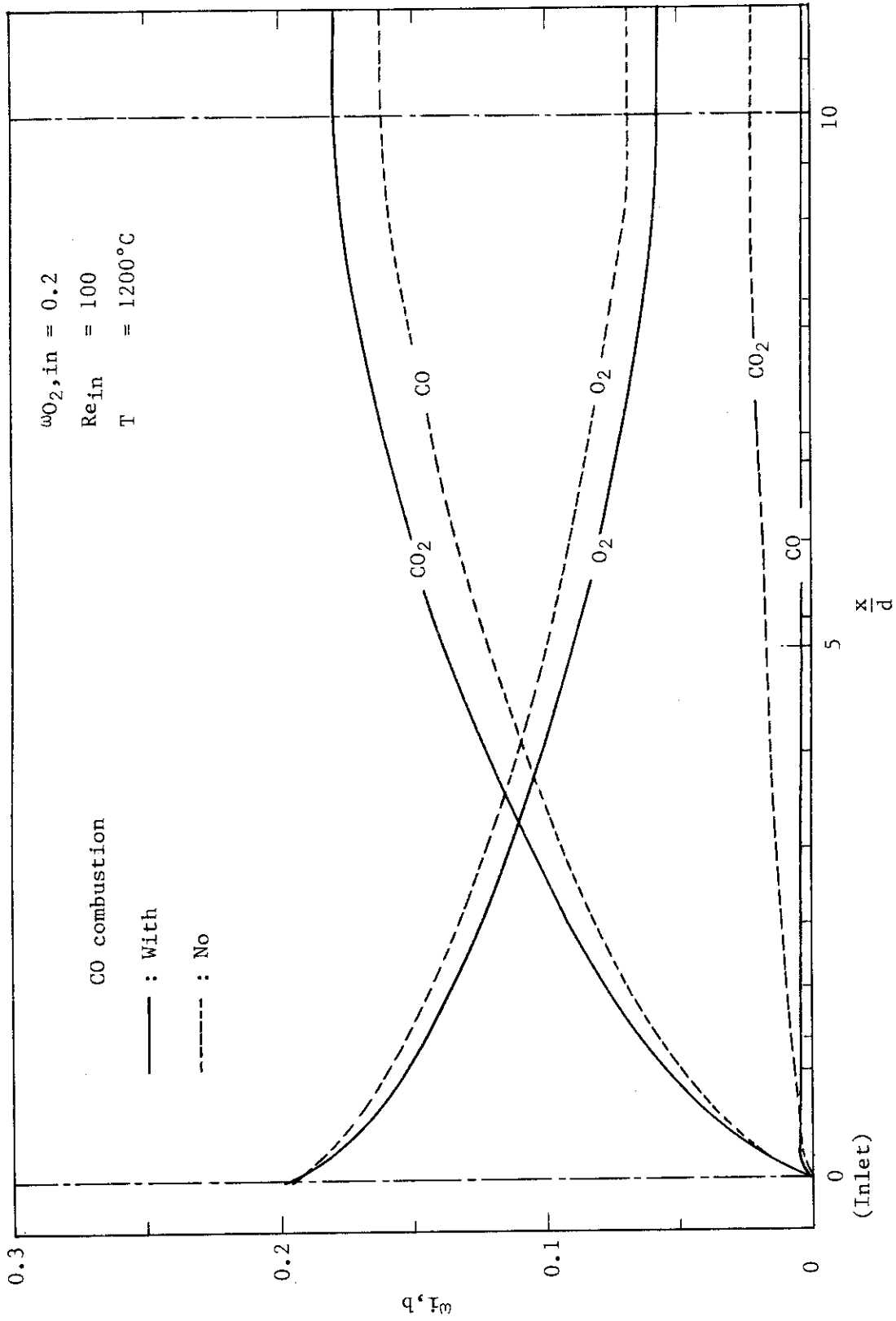


図4.7 酸素, 一酸化炭素, 二酸化炭素のバルク質量分率の流れ方向変化

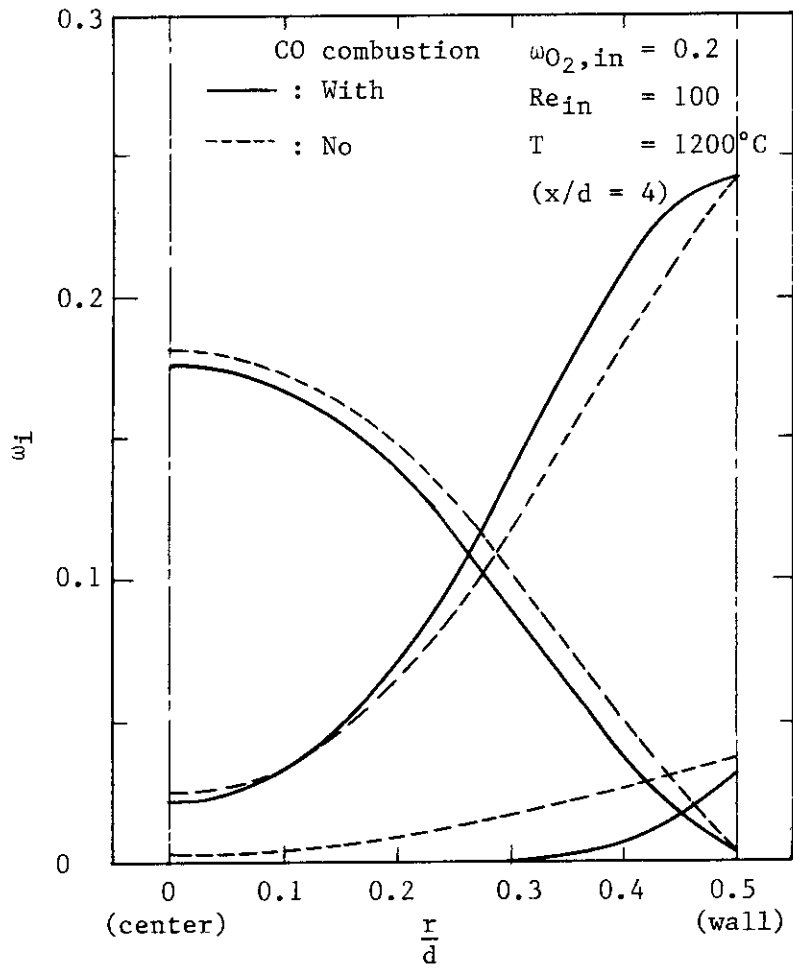


図4.8 各成分気体の質量分率の半径方向分布

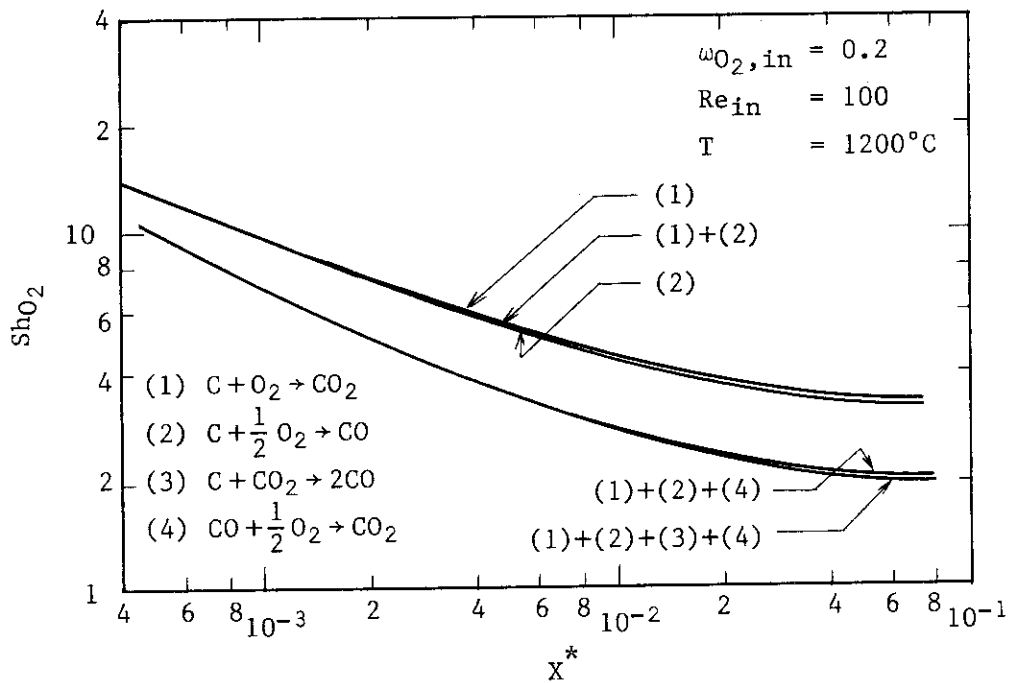


図4.9 各化学反応が酸素のSh数に及ぼす影響

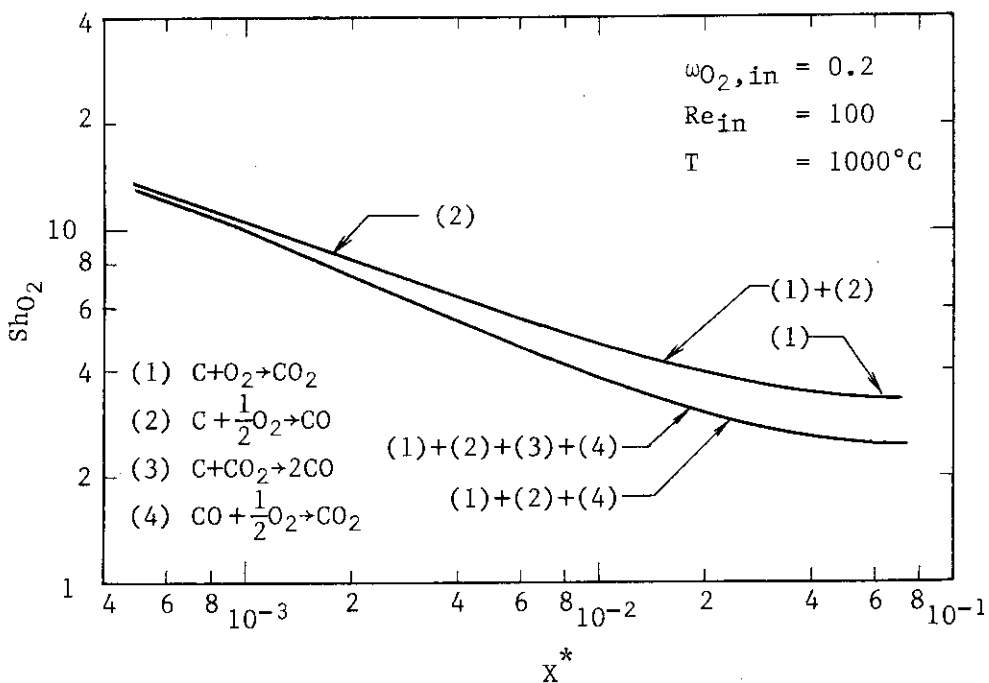


図4.10 酸素のSh数に及ぼす各化学反応の影響

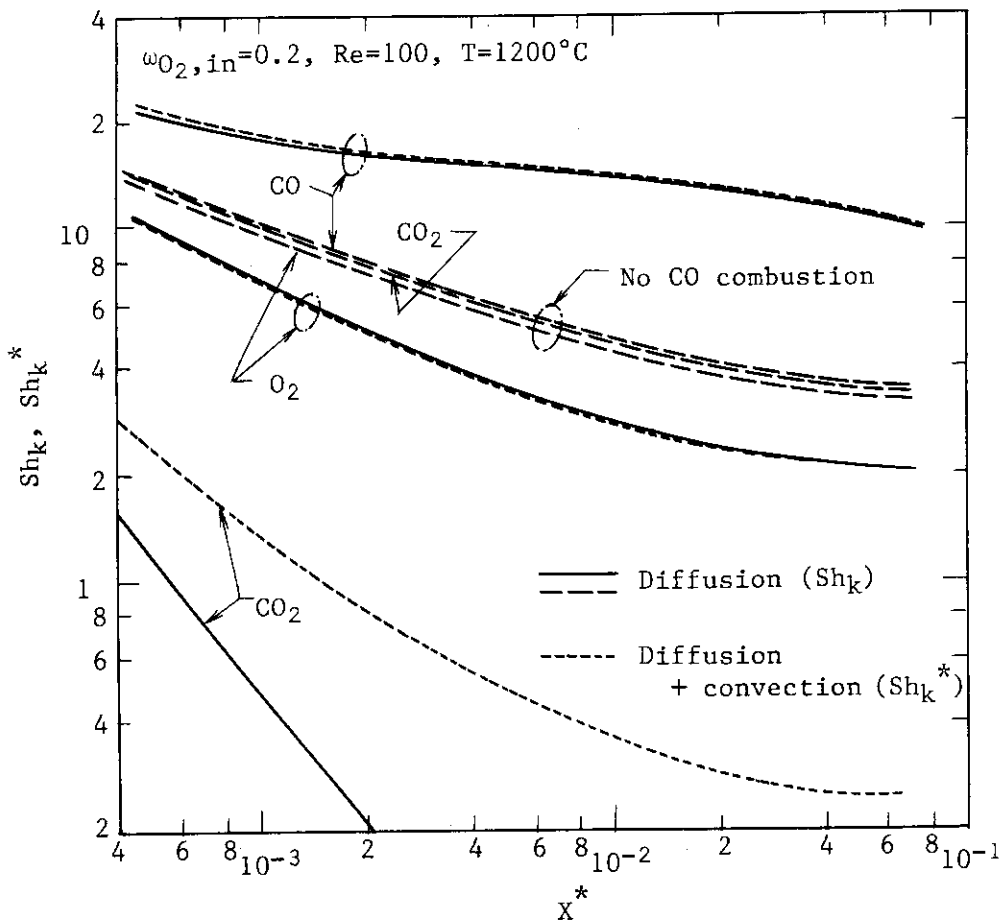


図4.11 各成分気体の物質伝達特性

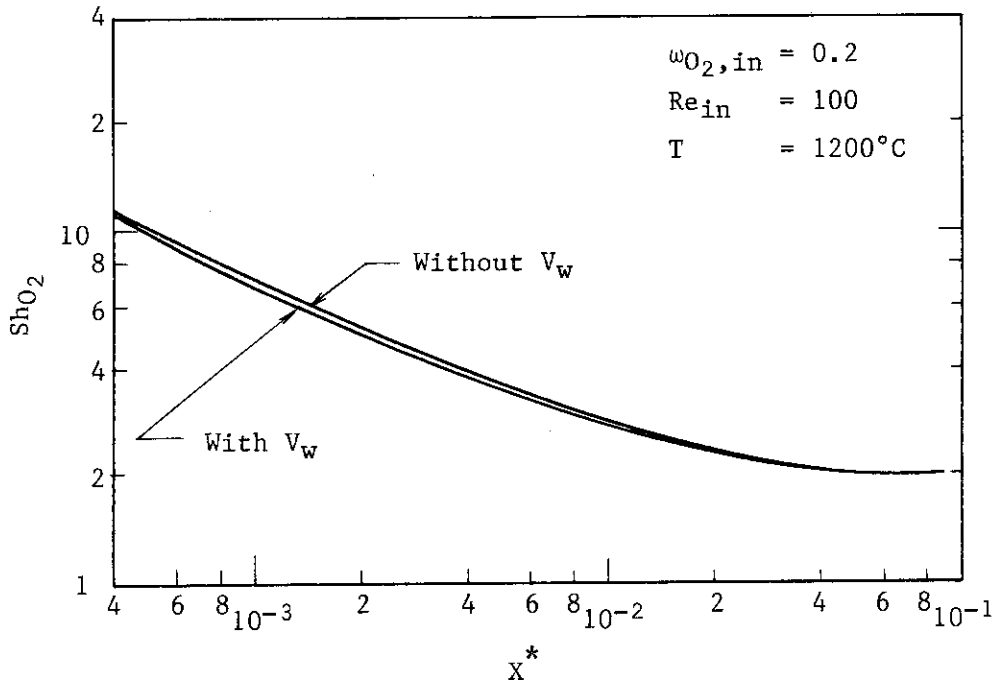


図4.12 酸素のSh数に及ぼす壁面に垂直な速度の影響

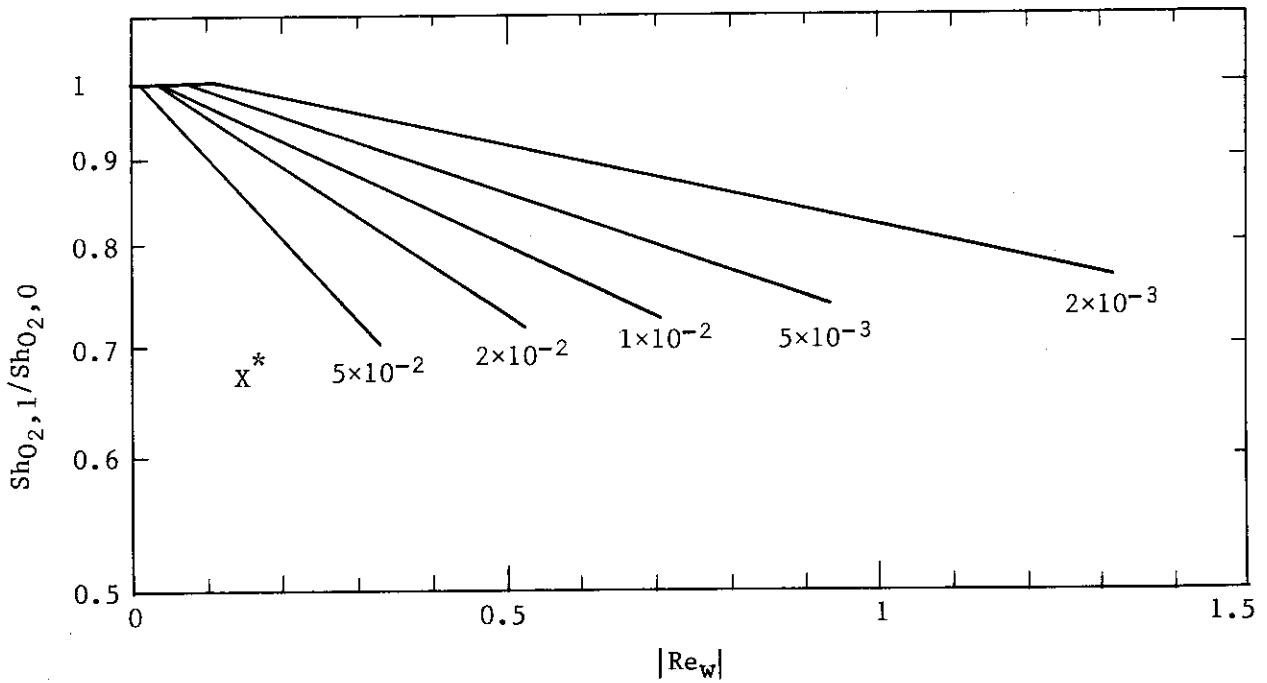


図4.13 一酸化炭素の燃焼反応がない場合の酸素のSh数と壁面レイノルズ数の関係



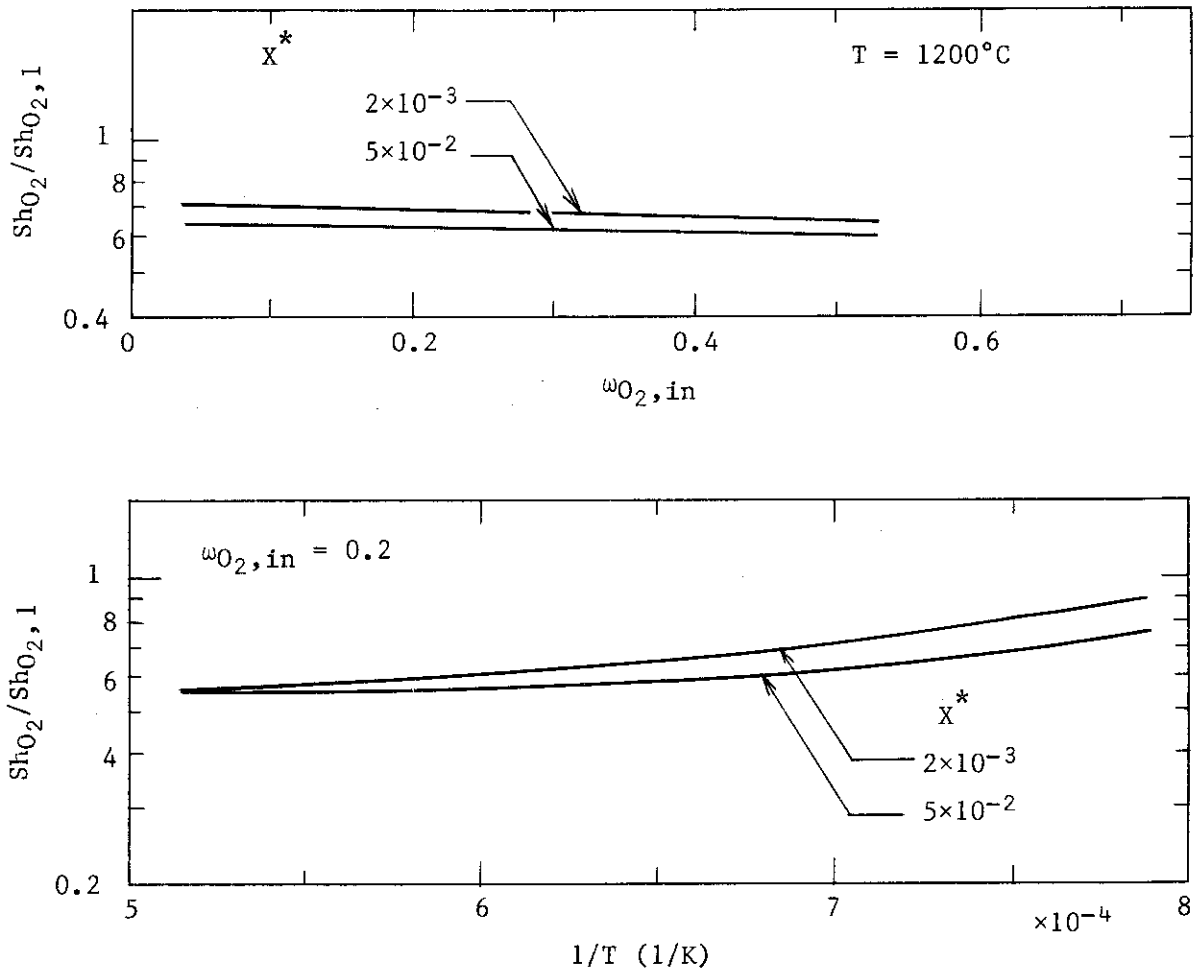


図4.14 酸素のSh数に及ぼす一酸化炭素の燃焼反応の影響

## 付 録

以下に、本数値解析のプログラムを示す。本プログラムは、メインプログラムと以下のサブルーチンプログラムより成る。

- (1) DATA : 入力データを読み込む。
- (2) MESH : メッシュデータを作成する。
- (3) CNST : 物性値, ダムケラ数を算出する。
- (4) BOUND : 境界条件を与える。
- (5) BNDIP : 各成分気体の質量分率の壁面值を計算する。
- (6) CHEMHM : 一酸化炭素の燃焼反応の速度定数を算出する。
- (7) INIT : 初期条件を与える。
- (8) SOLP : 圧力方程式を解く。もしくは, 圧力補正方程式の係数を算出する。
- (9) FACTU : x 方向運動量保存式の係数を算出する。
- (10) FACTV : r 方向運動量保存式の係数を算出する。
- (11) SOLUV : x, r 方向運動量保存式を解く。
- (12) CORP : 圧力補正方程式を解く。
- (13) CORUV : 速度を補正する。
- (14) SOLT : エネルギー方程式を解く。
- (15) SOLOMG : 各成分気体の質量保存式を解く。
- (16) ADI : 線順法により代数方程式を解く。
- (17) TDMA : 三重対角行列アルゴリズムにより 1 元連立方程式を解く。
- (18) CONV : 収束を判定する。
- (19) PRINT : 出力を印刷する。
- (20) PRTMAT : 行列を印刷する。
- (20) BULK : 物質伝達率などを算出し, 印刷する。
- (20) TRICO : 積分計算を行う。
- (20) PRÖP : 物性値を計算する。

本プログラムの最後に、出力の一例を示す。

付表には、本プログラムの主要な変数名とその意味を示す。

## 付 録

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00000100
C *****0000200
C *****0000300
C *****0000400
C *****0000500
C *****0000600
C *****0000700
C *****0000800
C *****0000900
C *****0001000
C *****0001100
C *****0001200
C *****0001300
C *****0001400
00000001  IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00001500
00000002  PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00001600
C
00000003  DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), 00001800
1 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), 00001900
2 U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), UO(IX,JR), VO(IX,JR), 00002000
3 OMEGA(NG,IX,JR), OMEGAO(NG,IX,JR), DA(NG,IX,JR), DAW(NG,IX,JR), 00002100
4 RHO(IX,JR), RHOO(IX,JR), AMU(IX,JR), DIFP(NG,NG,IX,JR), 00002200
5 CON(IX,JR), CP(IX,JR), ALPHAD(NG), ERRO(NG), ALWO(NG), 00002300
6 T(IX,JR), TO(IX,JR), AMF(NG,IX), VWALL(IX), XM(7), XMM(7), 00002400
7 PP(IX,JR), XMA(IX,JR), D21IN(NG), 00002500
8 RESP(3), RESU(3), RESV(3), REST(3), RESO(NG,3), OMGIN(NG), 00002600
9 VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR), VOLS(IX,JR), OMGTMP(NG,IX,JR) 00002700
00000004  DIMENSION ICHM(2), IHOT(2), IVWL(2), 00002800
1 XSIG(7), XEPK(7), XS(7), XC(8), XCVIS(7,2), XCCND(7,2), XCCP(7,4), 00002900
2 SIG(7), EPK(7), S(7), C(8), CVIS(7,2), CCND(7,2), CCP(7,4) 00003000
C
00000005  COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, IVWL, 00003200
1 /ALG / NSIMP, 00003300
2 /GAS / NGAS, 00003400
3 /PRT / NPRTI, NPRTN, 00003500
4 /ITR / DTAU, ITER, IEND, NTIME, NEND, 00003600
5 /SSC / CTIME 00003700
00000006  COMMON /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00003800
1 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00003900
2 /UVP / U, V, P, UO, VO, 00004000
3 /MSFRC / OMEGA, OMEGAO, OMGTMP, 00004100
4 /PRAM / RE, SC, GR, PR, DA, DAW, 00004200
5 /PRP / RHO, RHOO, AMU, DIFP, CON, CP, 00004300
6 /RELX / NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAO, 00004400
7 /ERROR / ERRP, ERRU, ERRV, ERRO, 00004500
8 ALWP, ALWU, ALWV, ALWO, 00004600
9 /EQPRX / CX1, CX2, CX3, CX4 00004700
00000007  COMMON /EQPRR / CR1, CR2, CR3, 00004800
1 /DENS / RHOIN, RHORF, 00004900
2 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00005000
3 /JIKAN / TIME, 00005100
4 /BND / MCUIN, UWALL, OMGIN, VWIN, 00005200
5 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN, 00005300
6 /TEMP / T, TO, 00005400
7 /MOLNO / XM, XMA, 00005500
8 /MFLUX / AMF, VWALL, 00005600
9 /DTUBE / DIAM 00005700
00000008  COMMON /CRPP / PP, 00005800
1 /RESDL / RESP, RESU, RESV, RESO, 00005900
2 /IJPFIX/ IPFIX, JPFIX, PFIX, 00006000

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  MAIN          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19
3          /TCONST/ ALPHAT, ERRT, REST,          00006100
4          /VOLUME/ VOLU, VOLV, VOLS,          00006200
5          /PRPCNS/ XSIG, XEPK, XC, XCVIS, XS, XCCND, XCCP          00006300
C
C          ----- MOLECULAR NUMBER ; HE, O2, CO, CO2, N2, AIR, AR -----          00006400
C
00000009  DATA XMM / 4.003E-3, 3.2000E-2, 2.801E-2, 4.401E-2, 2.8016E-2,          00006500
1          2.8962E-2, 3.9948E-2 /          00006600
C
C          ----- CONSTANTS FOR DIFFUSION COEFFICIENT ; HANDBOOK -----          00006700
C
00000010  DATA SIG / 2.551, 3.467, 3.690, 3.941, 3.798, 3.711, 3.542 /          00006800
00000011  DATA EPK / 10.22, 106.7, 91.7, 195.2, 71.4, 78.6, 93.3 /          00006900
00000012  DATA C / 1.06036, 0.15610, 0.193, 0.47635, 1.03587, 1.52996,          00007000
1          1.76474, 3.89411 /          00007100
C
C          ----- CONSTANTS FOR VISCOSITY -----          00007200
C
00000013  DATA CVIS          00007300
1 / 4.196E-7, 5.969E-7, 4.896E-7, 3.877E-7, 4.266E-7, 4.014E-7, 4.0E-7,          00007400
2 0.6759, 0.6363, 0.6427, 0.6648, 0.6549, 0.6704, 0.6 /          00007500
C
C          ----- CONSTANTS FOR THERMAL CONDUCTIVITY -----          00007600
C
00000014  DATA S          00007700
1 / 81.0, 127.0, 101.0, 253.0, 104.0, 109.0, 100.0 /          00007800
00000015  DATA CCND          00007900
1 / 2.744E-3, 5.078E-4, 3.539E-4, 1.899E-4, 2.901E-4, 2.994E-4, 1.0E-4,          00008000
2 0.7049, 0.7242, 0.7540, 0.8421, 0.7735, 0.7821, 0.7 /          00008100
C
C          ----- CONSTANTS FOR SPECIFIC HEAT -----          00008200
C
00000016  DATA CCP          00008300
1 / 4.964, 6.085, 6.726, 5.316, 6.903, 6.713, 6.0,          00008400
2 0.0, 3.631, 4.001, 14.285, -0.3753, 0.4697, 10.0,          00008500
3 0.0, -1.709, 1.2836, -8.362, 1.930, 1.147, 1.0,          00008600
4 0.0, 0.3133, -0.5307, 1.784, -0.6861, -0.4696, 1.0 /          00008700
C
C          ----- REPLACEMENT OF CONSTANTS -----          00008800
C
00000017  DO 10 I=1,7          00008900
00000018  XM(I) = XMM(I)          00010000
00000019  XSIG(I) = SIG(I)          00010100
00000020  XEPK(I) = EPK(I)          00010200
00000021  XC(I) = C(I)          00010300
00000022  XS(I) = S(I)          00010400
00000023  DO 20 J=1,2          00010500
00000024  XCVIS(I,J) = CVIS(I,J)          00010600
00000025  XCCND(I,J) = CCND(I,J)          00010700
00000026  DO 10 L=1,4          00010800
00000027  XCCP(I,L) = CCP(I,L)          00010900
00000028  10 CONTINUE          00011000
00000029  XC(8) = C(8)          00011100
C
C          ----- INPUT DATA -----          00011200
C
00000030  CALL DATA          00011300
C
C          ----- MESH -----          00011400
C
          00011500
          00011600
          00011700
          00011800
          00011900
          00012000

```

FORTRAN77 EX V12L10 MAIN DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000031      CALL MESH                                00012100
C                                                    00012200
C      ----- INITIAL CONDITION -----            00012300
C                                                    00012400
00000032      CALL INIT                                00012500
C                                                    00012600
C      ----- BOUNDARY CONDITION AND THERMAL PROPERTIES ----- 00012700
C                                                    00012800
00000033      CALL CNST                                00012900
00000034      ITER = 0                                00013000
00000035      CALL BOUND                               00013100
00000036      CALL CNST                                00013200
C                                                    00013300
C      ----- PRINT -----                        00013400
C                                                    00013500
C      CALL PRINT                                     00013600
C                                                    00013700
C      *****00013800
C      *****          TIME ITERATION          *****00013900
C      *****00014000
C                                                    00014100
00000037      TIME = DTAU                               00014200
00000038      NTIME = 1                               00014300
C                                                    00014400
C      ----- STEADY STATE OR TRANSIENT ? ----- 00014500
C                                                    00014600
00000039      IF ( NEND.EQ.1 ) GO TO 1300             00014700
C                                                    00014800
C      ----- VALUES BEFORE ONE TIME STEP ----- 00014900
C                                                    00015000
00000040      1000 CONTINUE                           00015100
C                                                    00015200
00000041      DO 1100 I=1,IN-1                        00015300
00000042      DO 1100 J=1,JN-1                        00015400
00000043      UO(I,J) = U(I,J)                       00015500
00000044      VO(I,J) = V(I,J)                       00015600
00000045      1100 CONTINUE                           00015700
C                                                    00015800
00000046      DO 1200 I=1,IN                          00015900
00000047      DO 1200 J=1,JN                          00016000
00000048      RHO(I,J) = RHO(I,J)                   00016100
00000049      DO 1200 K=1,NGAS                        00016200
00000050      OMEGA(K,I,J) = OMEGA(K,I,J)            00016300
00000051      1200 CONTINUE                           00016400
C                                                    00016500
00000052      1300 CONTINUE                           00016600
C                                                    00016700
C      *****00016800
C      *****          ITERATION AT THE TIME STEP          *****00016900
C      *****00017000
C                                                    00017100
00000053      ITER = 1                                00017200
C                                                    00017300
00000054      2000 CONTINUE                           00017400
C                                                    00017500
C      ----- FACTOR OF MDMENTUM EQUATION ----- 00017600
C                                                    00017700
00000055      CALL FACTU                               00017800
00000056      CALL FACTV                               00017900
C                                                    00018000

```

FORTRAN77 EX V12L10 MAIN DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000057      IF ( NSIMP-2 )      2100, 2200, 2300      00018100
C
C      ----- SIMPLE METHOD -----      00018200
C      00000058 2100 CONTINUE      00018300
00000059          CALL SOLUV      00018400
00000060          CALL SOLP      00018500
00000061          CALL CORP      00018600
00000062          CALL CORUV      00018700
00000063                                GO TO 2400      00018800
C      00000064 2200 CONTINUE      00018900
C      ----- SIMPLER METHOD -----      00019000
C      00000065          CALL SOLP      00019100
00000066          CALL SOLUV      00019200
00000067          CALL CORP      00019300
00000068          CALL CORUV      00019400
00000069                                GO TO 2400      00019500
C      00000070 2300 CONTINUE      00019600
C      ----- SIMPLEST/ANL METHOD -----      00019700
C      00000071          CALL SOLP      00019800
00000072          CALL CORUV      00019900
C      00000073 2400 CONTINUE      00020000
C      SOLUTION OF ENERGY EQUATION FOR ONE COMPONENT      00020100
C      00000074      IF ( TW.NE.TIN )      CALL SOLT      00020200
C      ----- SOLUTION OF MASS CONSERVATION EQUATIONS OF COMPONENTS -----      00020300
C      00000075      IF ( NGAS.EQ.1 )      GO TO 2500      00020400
C      00000076      DO 2600 K=2,NGAS      00020500
00000077          CALL SLOMG ( K )      00020600
00000078 2600 CONTINUE      00020700
C      ----- MASS FRACTION OF HE -----      00020800
C      00000079      DO 2700 I=2,IN-1      00020900
00000080          DO 2700 J=2,JN-1      00021000
00000081              OMEGA(1,I,J) = 1.0      00021100
00000082          DO 2700 K=2,NGAS      00021200
00000083              OMEGA(K,I,J) = OMSGMP(K,I,J)      00021300
00000084              OMEGA(1,I,J) = OMEGA(1,I,J) - OMEGA(K,I,J)      00021400
00000085 2700 CONTINUE      00021500
C      ----- BOUNDARY CONDITON -----      00021600
C      00000086 2500 CONTINUE      00021700
00000087          CALL BOUND      00021800
C      ----- THERMAL PROPERTIES AND CHEMICAL REACTIONS -----      00021900
C      00000088      IF ( NGAS.NE.1.OR.CX1.NE.0.0 )      CALL CNST      00022000
00000089 2800 CONTINUE      00022100
C      00022200
00022300
00022400
00022500
00022600
00022700
00022800
00022900
00023000
00023100
00023200
00023300
00023400
00023500
00023600
00023700
00023800
00023900
00024000

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  MAIN          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19
                                                    00024100
C      ----- JUDGEMENT OF CONVERGENCE ----- 00024200
C
00000090      CALL CONV ( ICONV )                00024400
00000091      IF ( ICONV.EQ.1 )                GO TO 3000 . 00024500
C
C      ----- JUDGEMENT OF ITERATION NUMBER OF TIMES ----- 00024700
C
00000092      IF ( ITER.GE.IEND )              GO TO 3100  00024900
C
C      ----- PRINT ----- 00025100
C
00000093      IF (NPRTI.LT.0) GO TO 2900        00025300
00000094      NPR = MOD ( ITER, NPRTI )         00025400
00000095      IF ( NPR.EQ.0 ) THEN             00025500
00000096      CALL PRINT                       00025600
00000097      ELSE IF ( NPR.EQ.1 ) THEN        00025700
00000098      WRITE(6,6000)                   00025800
00000099      WRITE(6,6100)  NTIME, ITER, (RESP(I),I=1,3),(RESU(I),I=1,3), 00025900
1          (RESV(I),I=1,3),(RESO(2,I),I=1,3), 00026000
2          RESO(3,1), RESO(4,1), REST(1)     00026100
00000100      ELSE                             00026200
00000101      NSKP = MOD( ITER, 50)             00026300
00000102      IF ( NSKP.EQ.0 )                00026400
1          WRITE(6,6100)  NTIME, ITER, (RESP(I),I=1,3),(RESU(I),I=1,3), 00026500
2          (RESV(I),I=1,3),(RESO(2,I),I=1,3), 00026600
3          RESO(3,1), RESO(4,1), REST(1)     00026700
00000103      ENDIF                          00026800
00000104      2900 CONTINUE                   00026900
C
C      ----- NOT CONVERGED ! ; RETURN TO 2000 ----- 00027100
C
00000105      ITER = ITER + 1                  00027300
00000106      GO TO 2000                      00027400
C
C      ----- MESSAGE FOR OVER-TIMES OF ITERATION NUMBER ----- 00027500
C
00000107      3100 CONTINUE                   00027800
C
00000108      IF ( IEND.GT.1 )                WRITE (6,6200) NTIME 00028000
C
C      ++++++ CONVERGED AT THE TIME STEP ++++++ 00028100
C      ++++++ CONVERGED AT THE TIME STEP ++++++ 00028200
C      ++++++ CONVERGED AT THE TIME STEP ++++++ 00028300
C      ++++++ CONVERGED AT THE TIME STEP ++++++ 00028400
C      ++++++ CONVERGED AT THE TIME STEP ++++++ 00028500
00000109      3000 CONTINUE                   00028600
C
00000110      IF ( NTIME.GE.NEND )            GO TO 3200  00028700
C
C      ----- PRINT ----- 00028800
C
00000111      NPR = MOD ( NTIME, NPRTN )       00028900
00000112      IF ( NPR.EQ.0 ) THEN            00029000
00000113      CALL PRINT                       00029100
00000114      CALL BULK                          00029200
00000115      ELSE IF (NPRTI.GE.0) THEN      00029300
00000116      GO TO 3300                      00029400
00000117      ELSE IF ( NPR.EQ.1 ) THEN      00029500
00000118      WRITE(6,6000)                   00029600
00000119      WRITE(6,6100)  NTIME, ITER, (RESP(I),I=1,3),(RESU(I),I=1,3), 00029700
                                                    00029800
                                                    00029900
                                                    00030000

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  MAIN          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

      1          (RESV(I),I=1,3),(RESO(2,I),I=1,3),      00030100
      2          RESO(3,1), RESO(4,1), REST(1)          00030200
00000120      ELSE                                     00030300
00000121      WRITE(6,6100)  NTIME, ITER, (RESP(I),I=1,3),(RESU(I),I=1,3), 00030400
      1          (RESV(I),I=1,3),(RESO(2,I),I=1,3),      00030500
      2          RESO(3,1), RESO(4,1), REST(1)          00030600
00000122      ENDIF                                     00030700
00000123 3300 CONTINUE                                 00030800
C                                                    00030900
C *****00031000
C *****      GO TO NEXT TIME STEP ; RETURN TO 1000 *****00031100
C *****00031200
C *****00031300
00000124      NTIME = NTIME + 1                          00031400
00000125      TIME = TIME + DTAU                          00031500
00000126      GO TO 1000                                  00031600
C                                                    00031700
C -----  END OF CALCULATION  -----00031800
C -----00031900
00000127 3200 CONTINUE                                 00032000
C -----00032100
C -----  PRINT  -----00032200
C -----00032300
00000128      CALL  PRINT                                00032400
00000129      CALL  BULK                                  00032500
C                                                    00032600
C -----  FORMAT  -----00032700
C -----00032800
00000130 6000 FORMAT(1H1,20('*'),' INFORMATION OF CONVERGENCE ',80('*'), 00032900
      1  '//, ' NTIME ITER RES-P I J ', 00033000
      2  'RES-U I J RES-V I J ', 00033100
      3  'RES-O2 I J RES-CO RES-CO2 RES-T ' ) 00033200
00000131 6100 FORMAT(1H ,I4,I6,4(1X,1PE9.2,1X,'( ',OPF4.0,' ':',F4.0,' ')), 00033300
      1 3(1X,1PE9.2) ) 00033400
00000132 6200 FORMAT (1H0, '//,5X, 'NOT CONVERGE AT NTIME =', I5, ' !!',/// ) 00033500
C                                                    00033600
C                                                    00033700
00000133      STOP                                       00033800
00000134      END                                         00033900

```



FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****00034000
C ***** INPUT DATA *****00034100
C *****00034200
C *****00034300
00000001 SUBROUTINE DATA 00034400
C *****00034500
C *****00034600
C *****00034700
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00034800
00000003 PARAMETER ( NG=5, GRAV=9.80665 ) 00034900
C *****00035000
00000004 DIMENSION ERRO(NG), ALWO(NG), ALPHAO(NG), AMSF(7), AMLF(7), 00035100
1 DIFM(7,7), D21IN(NG), D2(NG), OMGIN(NG) 00035200
00000005 COMMON /GAS / NGAS, 00035300
1 /PRT / NPRTI, NPRTN, 00035400
2 /ITR / DTAU, ITER, IEND, NTIME, NEND, 00035500
3 /RELX / NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAO, 00035600
4 /ERROR / ERRP, ERRU, ERVV, ERRO, 00035700
5 ALWP, ALWU, ALWV, ALWO, 00035800
6 /EGPRX / CX1, CX2, CX3, CX4, 00035900
7 /EQPRR / CR1, CR2, CR3, 00036000
8 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00036100
9 /BND / MCUIN, UWALL, OMGIN, VWIN 00036200
00000006 COMMON /PRAM / RE, SC, GR, PR, 00036300
1 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN, 00036400
2 /DTUBE / DIAM, 00036500
3 /DENS / RHOIN, RHORF, 00036600
4 /ALG / NSIMP, 00036700
5 /DIF2 / D2, 00036800
6 /SSC / CTIME, 00036900
7 /IJPFIX/ IPFIX, JPFIX, PFIX, 00037000
8 /TCONST/ ALPHAT, 00037100
9 /REACT/ NCR, NCR1, NCR2, NCR3 00037200
C *****00037300
00000007 READ (5,*) NGAS, NCR, NCR1, NCR2, NCR3 00037400
00000008 READ (5,*) DTAU, NEND, IEND 00037500
00000009 READ (5,*) ALWP, ALWU, ALWV, ( ALWO(I), I=2, NGAS ) 00037600
00000010 READ (5,*) NPRTI, NPRTN 00037700
00000011 READ (5,*) NSETP 00037800
00000012 READ (5,*) ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAT, 00037900
1 (ALPHAO(I), I=1, NGAS ) 00038000
00000013 READ (5,*) ICND, IDIRX 00038100
00000014 READ (5,*) TIN, PIN, TREF, PREF, TW 00038200
00000015 READ (5,*) MCUIN, UWALL, ( OMGIN(I), I=1, NG ) 00038300
00000016 READ (5,*) RE, DIAM, REW 00038400
00000017 READ (5,*) NSIMP 00038500
00000018 READ (5,*) IPFIX, JPFIX, PFIX 00038600
C *****00038700
00000019 CTIME = 1.0 00038800
00000020 IF ( NEND.EQ.1 ) CTIME = 0.0 00038900
C *****00039000
00000021 CX4 = IDIRX 00039100
00000022 IF ( ICND.EQ.1 ) THEN 00039200
00000023 CX1 = 1.0/3.0 00039300
00000024 CX2 = -2.0/3.0 00039400
00000025 CX3 = 1.0 00039500
00000026 CR1 = -2.0/3.0 00039600
00000027 CR2 = 1.0/3.0 00039700
00000028 CR3 = 1.0 00039800
00000029 ELSE IF ( ICND.EQ.2 ) THEN 00039900

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  DATA          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000030      CX1 = 1.0/3.0              00040000
00000031      CX2 = 1.0/3.0              00040100
00000032      CX3 = 0.0                  00040200
00000033      CR1 = 1.0/3.0              00040300
00000034      CR2 = 1.0/3.0              00040400
00000035      CR3 = 0.0                  00040500
00000036      ELSE                      00040600
00000037      CX1 = 0.0                  00040700
00000038      CX2 = 0.0                  00040800
00000039      CX3 = 0.0                  00040900
00000040      CR1 = 0.0                  00041000
00000041      CR2 = 0.0                  00041100
00000042      CR3 = 0.0                  00041200
00000043      END IF                     00041300
C                                           00041400
C      ----- THERMAL PROPERTIES AT INLET ----- 00041500
C                                           00041600
00000044      DO 1000 I=1,7              00041700
00000045      AMSF(I) = 0.0              00041800
00000046  1000 CONTINUE                  00041900
00000047      AMSF(1) = 1.0              00042000
00000048      DO 1010 I=2,NG            00042100
C      IF ( NGAS.EQ.1 )  DMGIN(I) = 0.0  00042200
00000049      AMSF(I) = DMGIN(I)         00042300
00000050      AMSF(1) = AMSF(1) - DMGIN(I) 00042400
00000051  1010 CONTINUE                  00042500
C                                           00042600
00000052      CALL PROP ( PREF, TREF, AMSF, NGAS, 2, RHORF, VISRF, CNDRF, 00042700
1      CPRF, D212IN, DIFM, AMLF, XMM )  00042800
00000053      CALL PROP ( PIN, TIN, AMSF, NGAS, 2, RHOIN, VISIN, CNDIN, 00042900
1      CPIN, D212IN, DIFM, AMLF, XMM )  00043000
C                                           00043100
00000054      DO 1100 N=2,NG              00043200
00000055      D21IN(N) = D2(N)            00043300
00000056  1100 CONTINUE                  00043400
00000057      D21IN(1) = D212IN          00043500
C                                           00043600
C      ----- SCHMIDT NUMBER AND GRASHOF NUMBER ----- 00043700
C                                           00043800
C                                           00043900
00000058      SC = VISIN/RHOIN/D212IN     00044000
00000059      GR = DIAM*DIAM*DIAM*GRAV*RHOIN*RHOIN/VISIN/VISIN 00044100
1      *(RHOIN-RHORF)/RHOIN             00044200
00000060      PR = VISIN*CPIN/CNDIN        00044300
00000061      UIN = RE*VISIN/RHOIN/DIAM    00044400
00000062      VWIN = REW/RE                 00044500
00000063      REALDT = 1.0*DIAM/UIN        00044600
C                                           00044700
00000064      WRITE(6,601) NGAS, NCR, NCR1, NCR2, NCR3 00044800
00000065      WRITE(6,602) DTAU, NEND, IEND 00044900
00000066      WRITE(6,603) ALWP, ALWU, ALWV, (ALWO(I),I=2,NGAS) 00045000
00000067      WRITE(6,604) NPRTI, NPRTN    00045100
00000068      WRITE(6,605) NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAT, 00045200
1      (ALPHAO(I),I=1,NGAS)             00045300
00000069      WRITE(6,606) ICND, IDIRX     00045400
00000070      WRITE(6,607) TIN, PIN, TREF, PREF, TW 00045500
00000071      WRITE(6,608) MCUIN, UWALL, ( DMGIN(I),I=1,NG ) 00045600
00000072      WRITE(6,609) RE, DIAM, REW, VWIN*UIN 00045700
00000073      WRITE(6,610) SC, GR, PR, UIN, REALDT, RHOIN, RHORF, VISIN, 00045800
1      CNDIN, CPIN, D212IN              00045900
00000074      WRITE(6,611) NSIMP

```

```

FORTRAN77 EX   V12L10   DATA           DATE 92-08-10   TIME 14:16:19

00000075      WRITE(6,612) IPFIX, JPFIX, PFIX                                00046000
C
00000076 601 FORMAT(1H1,/,/,2X,20('*')), ' I N P U T   A N D   C O N T R ' , 00046100
1 'L   D A T A   ',55('*'), /,/,6X, 00046200
2 'THE NUMBER OF GAS COMPONENTS      : NGAS   =',/12,/,6X, 00046300
3 'PRESENCE OF CHEMICAL REACTION     :',/6X 00046400
4 '   0 ; WITHOUT                      ',/6X, 00046500
5 '   1 ; WITH                          ',/6X, 00046600
6 '           CO + O2 > CO2           : NCR    =',/12,/,6X, 00046700
7 '           C  + O2 > CO            : NCR1   =',/12,/,6X, 00046800
8 '           C  + O2 > CO2           : NCR2   =',/12,/,6X, 00046900
9 '           C  + CO2 > CO           : NCR3   =',/12,/,6X, 00047000
00000077 602 FORMAT(1H0,5X, 00047100
1 'DIMENSIONLESS TIME STEP          : DTAU   =',/1PE12.5,/,6X, 00047200
2 'THE NUMBER OF TIME STEPS         : NEND   =',/OP15,/,6X, 00047300
3 'THE NUMBER OF ITERATION TIMES    : IEND   =',/15) 00047400
00000078 603 FORMAT(1H0,5X, 00047500
1 'ALLOWABLE ERROR FOR PRESSURE CAL. : ALWP   =',/1PE12.5,/,6X, 00047600
2 '   FOR U VELOCITY CAL.           : ALWU   =',/E12.5,/,6X, 00047700
3 '   FOR V VELOCITY CAL.           : ALWV   =',/E12.5,/,6X, 00047800
4 '   FOR O2 MASS FRAC. CAL.        : ALWO(2) =',/E12.5,/,6X, 00047900
5 '   FOR CO                        : ALWO(3) =',/E12.5,/,6X, 00048000
6 '   FOR CO2                       : ALWO(4) =',/E12.5,/,6X, 00048100
7 '   FOR N2                         : ALWO(5) =',/E12.5) 00048200
00000079 604 FORMAT(1H0,5X, 00048300
1 'THE NUMBER OF PRINTING CYCLES ;   ',/6X, 00048400
2 '   IN THE TIME STEP : NPRTI =',/14,/,6X, 00048500
3 '   IN TIME ITERATION : NPRTN =',/14) 00048600
00000080 605 FORMAT(1H0,5X, 00048700
1 'THE NUMBER OF ITERATION TIMES ;   ',/6X, 00048800
2 '   FOR SOLVING PRESSURE EQUATION : NSETP   =',/12,/,6X, 00048900
3 'RELAXATION FACTOR FOR PRESSURE EQ. : ALPHAP  =',/F6.3,/,6X, 00049000
4 '   FOR U VELOCITY EQ.             : ALPHAU  =',/F6.3,/,6X, 00049100
5 '   FOR V VELOCITY EQ.             : ALPHAV  =',/F6.3,/,6X, 00049200
6 '   FOR T ENERGY EQ.             : ALPHAT  =',/F6.3,/,6X, 00049300
7 '   FOR HE MASS CNS. EQ.           : ALPHAO(1) =',/F6.3,/,6X, 00049400
8 '   FOR O2 MASS CNS. EQ.           : ALPHAO(2) =',/F6.3,/,6X, 00049500
9 '   FOR CO                         : ALPHAO(3) =',/F6.3,/,6X, 00049600
1 '   FOR CO2                       : ALPHAO(4) =',/F6.3,/,6X, 00049700
2 '   FOR N2                         : ALPHAO(5) =',/F6.3) 00049800
00000081 606 FORMAT(1H0,5X, 00049900
1 'FLOW CONDITION                    : ICND    =',/13,/,6X, 00050000
2 '   1 ; COMPRESSIBLE AND VARIABLE VISCOSITY. ',/6X, 00050100
3 '   2 ; NON COMPRESSIBLE AND VARIABLE VISCOSITY. ',/6X, 00050200
4 '   3 ; NON COMPRESSIBLE AND CONSTANT VISCOSITY. ',/6X, 00050300
5 'FLOW DIRECTION                    : IDIRX   =',/13,/,6X, 00050400
6 '   -1 ; UPWARD, 1 ; DOWNWARD, 0 ; NO GRAVITY. ' ) 00050500
00000082 607 FORMAT(1H0,5X, 00050600
1 'TEMPERATURE AT INLET (C)          : TIN    =',/F6.1,/,6X, 00050700
2 'PRESSURE AT INLET (PA)            : PIN    =',/1PE12.5,/,6X, 00050800
3 'REFERENCE TEMPERATURE (C) <.NE.TIN> : TREF   =',/OPF6.1,/,6X, 00050900
4 'REFERENCE PRESSURE (PA)           : PREF   =',/1PE12.5,/,6X, 00051000
5 'WALL TEMPERATURE (C)              : TW     =',/OPF6.1) 00051100
00000083 608 FORMAT(1H0,5X, 00051200
1 'U DISTRIBUTION AT INLET           : MCUIN  =',/13,/,6X, 00051300
2 '   1 ; UNIFORM DISTRIBUTION       ',/6X, 00051400
3 '   2 ; POISEUILLE DISTRIBUTION    ',/6X, 00051500
4 '   3 ; ( U GRADIENT ) = 0         ',/6X, 00051600
5 'VALUE OF U AT WALL (SLIP VELOCITY) M/S : UWALL  =',/F6.3,/,6X, 00051700
6 'MASS FRACTION OF HE AT INLET     : DMGIN1 =',/F6.3,/,6X, 00051800

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  DATA          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

 7 'MASS FRACTION OF OXIGEN AT INLET      : OMGIN2 =',F6.3,/,6X,    00052000
 8 'MASS FRACTION OF CO AT INLET         : OMGIN3 =',F6.3,/,6X,    00052100
 9 'MASS FRACTION OF CO2 AT INLET        : OMGIN4 =',F6.3,/,6X,    00052200
 1 'MASS FRACTION OF NITROGEN AT INLET    : OMGIN5 =',F6.3 )      00052300
00000084 609 FORMAT(1H0,5X,              00052400
 1 'REYNOLDS NUMBER AT INLET              : RE      =',F8.2,/,6X,    00052500
 2 'HYDRAULIC DIAMETER OF CIRCULAR TUBE   : DIAM    =',1PE12.5,/,6X, 00052600
 3 'REYNOLDS NUMBER NORMAL TO WALL        : REW     =',E12.5,/,6X, 00052700
 4 '( VELOCITY NORMAL TO WALL (M/S) )     : VWIN    =',E12.5 )    00052800
00000085 610 FORMAT(1H0,5X,              00052900
 1 'SCHMIDT NUMBER AT INLET                : SC      =',1PE12.5,/,6X, 00053000
 2 'GRASHOF NUMBER AT INLET                : GR      =', E12.5,/,6X, 00053100
 3 'PRANDTL NUMBER AT INLET                : PR      =', E12.5,/,6X, 00053200
 3 'AVERAGE VELOCITY AT INLET              (M/S) : UIN     =', E12.5,/,6X, 00053300
 4 'REAL TIME STEP FOR DTAU=1              (SEC) : REALDT  =', E12.5,/,6X, 00053400
 5 'DENSITY OF GAS MIXTURE AT INLET        KG/M3 : RHOIN   =', E12.5,/,6X, 00053500
 6 'REFERENCE DENSITY                      KG/M3 : RHORF   =', E12.5,/,6X, 00053600
 7 'VISCOSITY OF GAS MIXTURE AT INLET     PAS   : VISIN   =', E12.5,/,6X, 00053700
 8 'CONDUCTIVITY AT INLET                  W/MK   : CNDIN   =', E12.5,/,6X, 00053800
 9 'SPECIFIC HEAT AT INLET                 J/KGK  : CPIN    =', E12.5,/,6X, 00053900
 1 'DIFFUSION COEFFICIENT AT INLET        M2/S  : D212IN =', E12.5 )    00054000
00000086 611 FORMAT(1H0,5X,              00054100
 1 'SOLUTION METHOD                          : NSIMP   =', I2,/,6X,    00054200
 2 ' 1 ; SIMPLE, 2 ; SIMPLER, 3 ; SIMPLEST/ANL.' ) 00054300
00000087 612 FORMAT(1H0,5X,              00054400
 1 'NODE NUMBER OF KNOWN PRESSURE IN X     : IPFIX   =', I2,/,6X,    00054500
 2 'NODE NUMBER OF KNOWN PRESSURE IN R     : JPFIX   =', I2,/,6X,    00054600
 3 'VALUE OF DIMENSIONLESS PRESSURE KNOWN : PFIX    =',1PE12.5,/,6X, 00054700
 4 ' IF NGAS>1, PFIX IS NOT REFERRED BUT IS CALCULATED. ' ) 00054800
C
C
00000088      RETURN                      00054900
00000089      END                        00055000
                                00055100
                                00055200

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****00055300
C *****00055400
C ***** PRODUCTION OF MESH *****00055500
C *****00055600
00000001 SUBROUTINE MESH 00055700
C *****00055800
C *****00055900
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00056000
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, PAI=3.141592654 ) 00056100
C
00000004 DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), 00056200
1 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), 00056300
2 VOLU(IX, JR), VOLV(IX, JR), VOLS(IX, JR), 00056400
3 ICHM(2), IHOT(2), IVWL(2) 00056500
C
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, IVWL, 00056600
1 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00056700
2 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00056800
3 /VOLUME/ VOLU, VOLV, VOLS 00056900
C
C ----- BOUNDARY OF SCALAR NODE ; XA(I), RA(J) -----00057000
C
00000006 IXX = IX/10 + 1 00057100
00000007 DO 100 I=1, IXX 00057200
00000008 IS = (I-1)*10 + 2 00057300
00000009 IE = I *10 + 1 00057400
00000010 READ (5,*) (XA(II), II=IS, IE) 00057500
00000011 IF ( I.EQ.1 ) GO TO 100 00057600
00000012 DO 105 II=IS, IE 00057700
00000013 IF ( XA(II).EQ.0.0 ) GO TO 110 00057800
105 CONTINUE 00057900
00000014 100 CONTINUE 00058000
00000015 110 CONTINUE 00058100
00000016 READ(5,*) XACHM1, XACHM2, XAHOT1, XAHOT2, XAVWL1, XAVWL2 00058200
00000017 IBP = II 00058300
00000018 XA(1) = XA(2)-(XA(3)-XA(2)) 00058400
00000019 XA(IBP) = XA(IBP-1)+XA(IBP-1)-XA(IBP-2) 00058500
00000020
C
00000021 JRR = JR/10 + 1 00058600
00000022 DO 120 J=1, JRR 00058700
00000023 JS = (J-1)*10 + 2 00058800
00000024 JE = J *10 + 1 00058900
00000025 READ (5,*) (RA(JJ), JJ=JS, JE) 00059000
00000026 IF ( J.EQ.1 ) GO TO 120 00059100
00000027 DO 125 JJ=JS, JE 00059200
00000028 IF ( RA(JJ).EQ.0.0 ) GO TO 130 00059300
125 CONTINUE 00059400
00000029 120 CONTINUE 00059500
00000030 130 CONTINUE 00059600
00000031 JBP = JJ 00059700
00000032 RA(1) = -RA(3) 00059800
00000033 RA(JBP) = RA(JBP-1)+RA(JBP-1)-RA(JBP-2) 00059900
00000034 IN = IBP - 1 00060000
00000035 JN = JBP - 1 00060100
00000036 IB = IBP - 2 00060200
00000037 JB = JBP - 2 00060300
00000038
C
C ----- DISTANCE BETWEEN BOUNDARIES OF SCALAR NODE ; DX(I), DR(J) 00060400
C COORDINATE OF SCALAR NODE ; X(I), R(J) -----00060500
C 00060600

```

FORTRAN77 EX V12L10 MESH DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000039      DO 140 I=1,IBP-1                                00061300
00000040          DX(I) = XA(I+1) - XA(I)                00061400
00000041          X(I) = XA(I) + DX(I)*0.5              00061500
00000042              IF ( XACHM1.EQ.XA(I) )              ICHM(1) = I      00061600
00000043              IF ( XACHM2.EQ.XA(I) )              ICHM(2) = I-1    00061700
00000044              IF ( XAHOT1.EQ.XA(I) )              IHOT(1) = I      00061800
00000045              IF ( XAHOT2.EQ.XA(I) )              IHOT(2) = I-1    00061900
00000046              IF ( XAVWL1.EQ.XA(I) )              IVWL(1) = I      00062000
00000047              IF ( XAVWL2.EQ.XA(I) )              IVWL(2) = I-1    00062100
00000048      140 CONTINUE                                  00062200
00000049          DO 150 J=1,JBP-1                        00062300
00000050              DR(J) = RA(J+1) - RA(J)                00062400
00000051              R(J) = RA(J) + DR(J)*0.5             00062500
00000052      150 CONTINUE                                  00062600
C
C      ----- DISTANCE BETWEEN SCALAR NODES ; DXA(I), DRA(J) ----- 00062700
C
00000053      DO 160 I=1,IBP-2                                00062800
00000054          DXA(I) = X(I+1) - X(I)                      00062900
00000055      160 CONTINUE                                  00063000
00000056          DO 170 J=1,JBP-2                        00063100
00000057              DRA(J) = R(J+1) - R(J)                00063200
00000058      170 CONTINUE                                  00063300
C
C      ----- VOLUME ----- 00063400
C
00000059      DO 200 J=1,JN                                    00063500
00000060          RAJP1 = RA(J+1)                              00063600
00000061              IF ( J.EQ.1 ) RAJP1 = DRA(J)/8.0    00063700
00000062          DO 200 I=1,IN                                00063800
00000063              VOLU(I,J) = ABS(R(J))*DR(J)*DXA(I) *PAI 00063900
00000064              VOLV(I,J) = RAJP1*DRA(J)*DX(I) *PAI   00064000
00000065              VOLS(I,J) = ABS(R(J))*DR(J)*DX(I) *PAI 00064100
00000066      200 CONTINUE                                  00064200
C
C      ----- OUTPUT OF MESH ----- 00064300
C
00000067      WRITE(6,6000) IBP, JBP, IN, JN, ICHM(1), ICHM(2), IHOT(1), IHOT(2), 00064400
1          IVWL(1), IVWL(2)                                00064500
00000068 6000 FORMAT(1H1,///,1X,20('*'),' M E S H   D A T A ',80('*'),///,6X, 00064600
1 'THE NUMBER OF BOUNDARIES IN X DIRECTION ; IBP =',I4,/,6X, 00064700
2 '          IN R DIRECTION ; JBP =',I4,/,6X,           00064800
3 'THE NUMBER OF NODE IN X DIRECTION ; IN =',I4,/,6X,  00064900
4 '          IN R DIRECTION ; JN =',I4,/,6X,           00065000
5 'THE NUMBER OF THE NODE OF GRAPHITE ; ICHM=',I4,/,6X, 00065100
6 '          ICHM(1) -- ICHM(2) ; ICHM=',I4,/,6X,     00065200
7 'THE NUMBER OF THE NODE OF HEATING ; IHOT=',I4,/,6X, 00065300
8 '          IHOT(1) -- IHOT(2) ; IHOT=',I4,/,6X,     00065400
9 'THE NUMBER OF THE NODE OF INJECTION ; IVWL=',I4,/,6X, 00065500
1 '          IVWL(1) -- IVWL(2) ; IVWL=',I4,/,6X,     00065600
2 ' ( CALCULATED REGION ; 2 =< X =< IBP-1, 2 =< R =< JBP-1 )',///) 00065700
C
00000069      IXX = (IBP-1)/10 + 1                            00065800
00000070      WRITE(6,600)                                       00065900
00000071      DO 180 I=1,IXX                                    00066000
00000072          IS = (I-1)*10 + 1                            00066100
00000073          IE = I *10                                    00066200
00000074          IEE = IE                                       00066300
00000075              IF ( IE.GE.IBP ) IE = IBP-1           00066400
00000076              IF ( IEE.GE.IBP ) IEE = IBP-2        00066500

```

FORTRAN77 EX V12L10 MESH DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000077      WRITE(6,601) (II,      II=IS,IE+1)      00067300
00000078      WRITE(6,602) (XA(II), II=IS,IE+1)      00067400
00000079      WRITE(6,603) (DX (II), II=IS,IE )      00067500
00000080      WRITE(6,604) (II,      II=IS,IEE+1)      00067600
00000081      WRITE(6,605) (X(II),  II=IS,IEE+1)      00067700
00000082      WRITE(6,606) (DXA(II), II=IS,IEE )      00067800
00000083      180 CONTINUE      00067900
C      00000084      JRR = (JBP-1)/10 + 1      00068000
00000085      WRITE(6,610)      00068100
00000086      DO 190 J=1,JRR      00068200
00000087      JS = (J-1)*10 + 1      00068300
00000088      JE = J *10      00068400
00000089      JEE = JE      00068500
00000090      IF ( JE.GE.JBP )      JE = JBP-1      00068600
00000091      IF ( JEE.GE.JBP )      JEE = JBP-2      00068700
C      00000092      WRITE(6,611) ( JJ,      JJ=JS,JE+1 )      00068800
00000093      WRITE(6,612) ( RA(JJ), JJ=JS,JE+1 )      00068900
00000094      WRITE(6,613) ( DR (JJ), JJ=JS,JE )      00069000
00000095      WRITE(6,614) ( JJ,      JJ=JS,JEE+1)      00069100
00000096      WRITE(6,615) ( R(JJ), JJ=JS,JEE+1)      00069200
00000097      WRITE(6,616) ( DRA(JJ), JJ=JS,JEE )      00069300
00000098      190 CONTINUE      00069400
C      00000099      600 FORMAT(1H0,'----- M E S H ( X DIRECTION ) ',90('-',))      00069500
00000100      601 FORMAT(1H0,' I      :',11(I6,4X),/, 11X,11(5X,'1',4X) )      00069600
00000101      602 FORMAT(1H ,' XA (I) :', 11F10.4)      00069700
00000102      603 FORMAT(1H ,' DX (I) :', 4X, 10F10.4)      00070000
00000103      604 FORMAT(1H0,' I      :', 5X, 11(I6,4X),/, 12X,11(9X,'*') )      00070100
00000104      605 FORMAT(1H ,' X (I) :', 5X, 11F10.4 )      00070200
00000105      606 FORMAT(1H ,' DXA(I) :', 9X, 10F10.4,/)      00070300
C      00000106      610 FORMAT(1H1,/,,' ----- M E S H ( R DIRECTION ) ',90('-',))      00070400
00000107      611 FORMAT(1H0,' J      :',11(I6,4X),/, 11X,11(5X,'1',4X) )      00070500
00000108      612 FORMAT(1H ,' RA (J) :', 11F10.4 )      00070600
00000109      613 FORMAT(1H ,' DR (J) :', 4X, 10F10.4)      00070700
00000110      614 FORMAT(1H0,' J      :', 5X, 11(I6,4X),/, 12X,11(9X,'*') )      00070800
00000111      615 FORMAT(1H ,' R (J) :', 5X, 11F10.4 )      00070900
00000112      616 FORMAT(1H ,' DRA(J) :', 9X, 10F10.4,/)      00071000
C      00000113      RETURN      00071100
00000114      END      00071200
00000113      00071300
00000114      00071400
00000113      00071500
00000114      00071600

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00071700
C *** DIMENSIONLESS THERMAL PROPERTIES AND HOMOGENEOUS *** 00071800
C *** CHMICAL REACTION OF CO COMBUSTION *** 00071900
C *** 00072000
00000001 SUBROUTINE CNST 00072100
C ***** 00072200
C ***** 00072300
C ***** 00072400
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00072500
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00072600
C 00072700
00000004 DIMENSION U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), T(IX,JR), 00072800
1 TT(IX,JR), RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR), AMU(IX,JR), 00072900
2 CON(IX,JR), CP(IX,JR), OMEGA(NG,IX,JR), DA(NG,IX,JR), 00073000
3 DIFP(NG,NG,IX,JR), DAW(NG,IX,JR), D21IN(NG), 00073100
4 AMSF(7), AMLF(7), XM(7), DM(7,7), XMA(IX,JR), 00073200
5 R(JR), RA(JR), ICHM(2) 00073300
C 00073400
00000005 COMMON /UVP / U, V, P, 00073500
1 /NODE / IN, JN, ICHM, 00073600
2 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN, 00073700
3 /TEMP / T, 00073800
4 /PRP / RHO, RHO0, AMU, DIFP, CON, CP, 00073900
5 /GAS / NGAS, 00074000
6 /MOLNO / XM, XMA, 00074100
7 /MSFRC / OMEGA, 00074200
8 /PRAM / RE, SC, GR, PR, DA, DAW 00074300
00000006 COMMON /DENS / RHOIN, RHORF, 00074400
1 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00074500
2 /DTUBE / DIAM 00074600
3 /REACT / NCR, 00074700
4 /DIMR / R, RA 00074800
C 00074900
00000007 DO 1000 I=1,IN 00075000
00000008 DO 1000 J=1,JN 00075100
C 00075200
C ----- DIMENSIONAL PRESSURE AND TEMPERATURE ----- 00075300
C 00075400
00000009 PDIM = P(I,J)*RHOIN*UIN*UIN + PREF 00075500
00000010 DTREF = TW - TIN 00075600
00000011 TT(I,J) = T(I,J)*DTREF + TIN 00075700
C 00075800
C ----- DIMENSIONLESS THERMAL PROPERTIES ----- 00075900
C 00076000
00000012 DO 1100 N=1,NGAS 00076100
00000013 AMSF(N) = OMEGA(N,I,J) 00076200
00000014 1100 CONTINUE 00076300
00000015 CALL PROP ( PDIM, TT(I,J), AMSF, NGAS, 2, 00076400
1 RRIJ, VVIJ, CCIJ, CCPIJ, D212J, DM, AMLF, XMA(I,J) ) 00076500
00000016 ALPRHO = 0.5 00076600
00000017 RHONEW = RRIJ/RHOIN 00076700
00000018 RHO(I,J) = RHO(I,J) + ALPRHO*(RHONEW-RHO(I,J)) 00076800
00000019 AMU(I,J) = VVIJ/VISIN 00076900
00000020 CON(I,J) = CCIJ/CNDIN 00077000
00000021 CP (I,J) = CCPIJ/CPIN 00077100
C 00077200
00000022 DO 1300 N1=1,NGAS 00077300
00000023 DO 1300 N2=1,NGAS 00077400
00000024 DIFP(N1,N2,I,J) = 0.0 00077500
00000025 IF ( N1.NE.N2 ) DIFP(N1,N2,I,J) = DM(N1,N2)/D21IN(1) 00077600

```



```

FORTRAN77 EX   V12L10   CNST           DATE 92-08-10   TIME 14:16:19

00000026 1300 CONTINUE                                00077700
C                                                00077800
00000027 1000 CONTINUE                                00077900
C                                                00078000
00000028          IF ( NGAS.EQ.1 )                   GO TO 3000      00078100
C                                                00078200
C          ----- DAMKOELER NUMBER IN HOMOGENEOUS CHEMICAL REACTION ----- 00078300
C          ----- DA = DA + DAW * OMEGA, B1;+REACTION, B2;-REACTION ----- 00078400
C                                                00078500
00000029          IF (NCR.EQ.1) THEN                 00078600
00000030              EZERO = 1.0E-12                 00078700
00000031              DO 2000 I=2,ICHM(2)             00078800
00000032              DO 2000 J=2,JN-1                00078900
00000033                  CALL CHEMHH ( TT(I,J), XCR4, XEQ4 ) 00079000
00000034                  B1 = DIAM/UIIN*XCR4*RHO(I,J)*(RHO(I,J)*RHOIN/XM(2))*0.5 00079100
C          ----- WITHOUT REVERSE REACTION ----- 00079200
C          B2 = DIAM/UIIN*XCR4/XEQ4/(RGC*(TT(I,J)+273.15))*0.5 00079300
C          *XM(3)/XM(4)*RHO(I,J)                    00079400
00000035          1 B2 = 0.0                          00079500
00000036              DA (1,I,J) = 0.0                00079600
00000037              DAW(1,I,J) = 0.0                00079700
00000038              DA (2,I,J) = XM(2)*B2*OMEGA(4,I,J)/2.0/XM(3) 00079800
00000039              DAW(2,I,J) = 0.0                00079900
00000040              IF ( OMEGA(2,I,J).NE.0.0 )      DAW(2,I,J) = 00080000
00000041          1              XM(2)*B1*OMEGA(3,I,J)/2.0/XM(3)/OMEGA(2,I,J)**0.5 00080100
00000042              DA (3,I,J) = B2*OMEGA(4,I,J)    00080200
00000043              DAW(3,I,J) = B1*OMEGA(2,I,J)**0.5 00080300
00000044              DA (4,I,J) = XM(4)*B1*OMEGA(3,I,J)*OMEGA(2,I,J)**0.5/XM(3) 00080400
00000045              DAW(4,I,J) = XM(4)*B2/XM(3)     00080500
00000045 2000 CONTINUE                                00080600
C                                                00080700
00000046          ELSE                                00080800
00000047              DO 2100 I=2,IN-1                00080900
00000048              DO 2100 J=2,JN-1                00081000
00000049              DO 2100 N=2,4                  00081100
00000050                  DA (N,I,J) = 0.0            00081200
00000051          2100          DAW(N,I,J) = 0.0      00081300
00000052          END IF                                00081400
C                                                00081500
00000053          3000 CONTINUE                        00081600
C                                                00081700
C                                                00081800
00000054          RETURN                                00081900
00000055          END                                  00082000

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****00082100
C ***** BOUNDARY CONDITION *****00082200
C *****00082300
C *****00082400
00000001 SUBROUTINE BOUND 00082500
C *****00082600
C *****00082700
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00082800
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00082900
C *****00083000
00000004 DIMENSION U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), OMEGA(NG,IX,JR), 00083100
1 X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), AMF(NG,IX), 00083200
2 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), VWALL(IX), 00083300
3 RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR), AMU(IX,JR), 00083400
4 DIFP(NG,NG,IX,JR), D21IN(NG), 00083500
5 T(IX,JR), OMGIN(NG), ICHM(2), IHOT(2) 00083600
C *****00083700
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, 00083800
1 /GAS / NGAS, 00083900
2 /UVP / U, V, P, 00084000
3 /MSFRC / OMEGA, 00084100
4 /BND / MCUIN, UWALL, OMGIN, 00084200
5 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00084300
6 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00084400
7 /MFLUX / AMF, VWALL, 00084500
8 /TEMP / T 00084600
00000006 COMMON /PRP / RHO, RHO0, AMU, DIFP, 00084700
1 /PRAM / RE, SC, 00084800
2 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00084900
3 /DENS / RHOIN, 00085000
4 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN, 00085100
5 /ITR / DTAU, ITER, IEND, NTIME 00085200
C *****00085300
C ----- BOUNDARY TEMPERATURE ----- 00085400
C *****00085500
00000007 TINNRM = 0.0 00085600
00000008 TWRM = 1.0 00085700
C *****00085800
C ##### BOUNDARY AT INLET ##### 00085900
C ----- U ----- 00086000
C *****00086100
00000009 IF ( MCUIN.EQ.3 ) THEN 00086200
00000010 DO 1000 J=1,JN 00086300
00000011 U(1,J) = U(2,J) 00086400
00000012 1000 CONTINUE 00086500
00000013 ELSE IF ( MCUIN.EQ.2 ) THEN 00086600
00000014 DO 1100 J=1,JN-1 00086700
00000015 U(1,J) = 2.0*(1.0-4.0*R(J)*R(J)) 00086800
00000016 1100 CONTINUE 00086900
00000017 U(1,JN) = 0.0 00087000
00000018 ELSE 00087100
00000019 DO 1200 J=1,JN 00087200
00000020 U(1,J) = 1.0 00087300
00000021 1200 CONTINUE 00087400
00000022 ENDIF 00087500
C *****00087600
C ----- V ----- 00087700
C *****00087800
00000023 DO 1300 J=1,JN-1 00087900
00000024 V(1,J) = 0.0 00088000

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  BOUND      DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000025 1300 CONTINUE                                00088100
C                                                00088200
C ----- MASS FRACTION -----                    00088300
C                                                00088400
00000026      IF ( NGAS.EQ.1 )                      GO TO 1499    00088500
00000027      DO 1400 J=1,JN                          00088600
00000028      DO 1400 I=1,NG                          00088700
00000029      OMEGA(I,1,J) = DMGIN(I)                00088800
00000030      1400 CONTINUE                            00088900
00000031      1499 CONTINUE                            00089000
C                                                00089100
C ----- P -----                                00089200
C                                                00089300
C                                                00089400
00000032      DO 1500 J=1,JN                          00089500
00000033      P(1,J) = ( PIN - PREF ) / RHOIN/UIIN/UIIN 00089600
00000034      1500 CONTINUE                            00089700
C                                                00089800
C ----- T -----                                00089900
C                                                00090000
00000035      IF ( TW.EQ.TIN )                      GO TO 1700    00090100
00000036      DO 1600 J=1,JN                          00090200
00000037      T(1,J) = TINNRM                        00090300
00000038      1600 CONTINUE                            00090400
00000039      1700 CONTINUE                            00090500
C                                                00090600
C ##### BOUNDARY AT OUTLET #####                    00090700
C ----- U -----                                00090800
C                                                00090900
00000040      DO 2000 J=1,JN                          00091000
00000041      U(IN-1,J) = U(IN-2,J)                  00091100
00000042      2000 CONTINUE                            00091200
C                                                00091300
C ----- V -----                                00091400
C                                                00091500
00000043      DO 2100 J=1,JN-1                        00091600
00000044      V(IN,J) = 0.0                          00091700
00000045      2100 CONTINUE                            00091800
C                                                00091900
C ----- MASS FRACTION -----                    00092000
C                                                00092100
00000046      IF ( NGAS.EQ.1 )                      GO TO 2300    00092200
00000047      DO 2200 N=1,NGAS                       00092300
00000048      DO 2200 J=1,JN                          00092400
00000049      OMEGA(N,IN,J) = ( (DXA(IN-1)+DXA(IN-2))*OMEGA(N,IN-1,J)
1          -DXA(IN-1)*OMEGA(N,IN-2,J) ) / DXA(IN-2) 00092500
C          OMEGA(N,IN,J) = OMEGA(N,IN-1,J)          00092600
00000050      IF ( OMEGA(N,IN,J).LT.0.0 ) OMEGA(N,IN,J) = 0.0 00092700
00000051      2200 CONTINUE                            00092800
00000052      2300 CONTINUE                            00092900
C                                                00093000
C ----- P -----                                00093100
C                                                00093200
C                                                00093300
00000053      DO 2400 J=1,JN                          00093400
00000054      P(IN,J) = P(IN-1,J)+(P(IN-1,J)-P(IN-2,J))*DXA(IN-1)/DXA(IN-2) 00093500
00000055      2400 CONTINUE                            00093600
C                                                00093700
C ----- T -----                                00093800
C                                                00093900
00000056      IF ( TW.EQ.TIN )                      GO TO 2600    00094000
00000057      DO 2500 J=1,JN

```

FORTRAN77 EX V12L10 BOUND DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000058      T(IN,J) = ( (DXA(IN-1)+DXA(IN-2))*T(IN-1,J)-DXA(IN-1) 00094100
1              *T(IN-2,J) ) / DXA(IN-2) 00094200
00000059 2500 CONTINUE 00094300
00000060 2600 CONTINUE 00094400
C 00094500
C ##### BOUNDARY AT CENTER ##### 00094600
C ----- U ----- 00094700
C 00094800
C DO 3000 I=1,IN 00094900
00000061      U(I,1) = U(I,2) 00095000
00000062 3000 CONTINUE 00095100
C 00095200
C ----- V ----- 00095300
C 00095400
C DO 3100 I=1,IN 00095500
00000064      V(I,1) = 0.0 00095600
00000065 3100 CONTINUE 00095700
C 00095800
C ----- MASS FRACTION ----- 00095900
C 00096000
C IF ( NGAS.EQ.1 ) GO TO 3299 00096100
00000067 DO 3200 N=1,NGAS 00096200
00000068 DO 3200 I=1,IN 00096300
00000069      OMEGA(N,I,1) = OMEGA(N,I,2) 00096400
00000070 3200 CONTINUE 00096500
00000071 3299 CONTINUE 00096600
C 00096700
C ----- P ----- 00096800
C 00096900
C DO 3300 I=1,IN 00097000
00000073      P(I,1) = P(I,2) 00097100
00000074 3300 CONTINUE 00097200
C 00097300
C ----- T ----- 00097400
C 00097500
C IF ( TW.EQ.TIN ) GO TO 3500 00097600
00000076 DO 3400 I=1,IN 00097700
00000077      T(I,1) = T(I,2) 00097800
00000078 3400 CONTINUE 00097900
00000079 3500 CONTINUE 00098000
C 00098100
C ##### BOUNDARY AT WALL ##### 00098200
C ----- U ----- 00098300
C 00098400
C DO 4000 I=2,IN-1 00098500
00000081      U(I,JN) = 0.0 00098600
00000082 4000 CONTINUE 00098700
C 00098800
C ----- MASS FRACTION ----- 00098900
C 00099000
C IF ( NGAS.EQ.1 ) GO TO 4300 00099100
00000084 ----- WALL BOUNDARY IS CHEMICAL REACTION OR IN-PORE DISUSION - 00099200
C 00099300
C IF ( ITER.EQ.0 ) GO TO 4010 00099400
00000085 CALL BNDIP 00099500
00000086 4010 CONTINUE 00099600
C 00099700
C DO 4100 I=1,ICHM(1)-1 00099800
00000088 DO 4100 N=1,NGAS 00099900
00000089 00100000

```

FORTRAN77 EX V12L10 BOUND DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

00000090	OMEGA(N,I,JN) = OMEGA(N,I,JN-1)	00100100
00000091	4100 CONTINUE	00100200
00000092	DO 4200 I=ICM(2)+1,IN	00100300
00000093	DO 4200 N=1,NGAS	00100400
00000094	OMEGA(N,I,JN) = OMEGA(N,I,JN-1)	00100500
00000095	4200 CONTINUE	00100600
00000096	4300 CONTINUE	00100700
	C	00100800
	C ----- V -----	00100900
	C	00101000
00000097	DO 4400 I=1,IN	00101100
00000098	V(I,JN-1) = VWALL(I)	00101200
00000099	4400 CONTINUE	00101300
	C	00101400
	C ----- P -----	00101500
	C	00101600
00000100	DO 4500 I=1,IN	00101700
00000101	P(I,JN) = P(I,JN-1)	00101800
00000102	4500 CONTINUE	00101900
	C	00102000
	C ----- T -----	00102100
	C	00102200
00000103	IF ( TW.EQ.TIN )	00102300
	GO TO 4900	00102400
00000104	DO 4600 I=1,IHOT(1)-1	00102500
00000105	T(I,JN) = T(I,JN-1)	00102600
00000106	4600 CONTINUE	00102700
00000107	DO 4700 I=IHOT(1), IHOT(2)	00102800
00000108	T(I,JN) = TWNRM	00102900
00000109	4700 CONTINUE	00103000
00000110	DO 4800 I=IHOT(2)+1, IN	00103100
00000111	T(I,JN) = T(I,JN-1)	00103200
00000112	4800 CONTINUE	00103300
00000113	4900 CONTINUE	00103400
	C	00103500
	C	00103600
00000114	RETURN	00103700
00000115	END	

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00103800
C ***** BOUNDARY CONDITION FOR MASS FRACTION AT WALL ***** 00103900
C ***** 00104000
C ***** 00104100
00000001 SUBROUTINE BNDIP 00104200
C ***** 00104300
C ***** 00104400
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00104500
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5, RGC=8.314 ) 00104600
C ***** 00104700
00000004 DIMENSION T(IX,JR), U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), 00104800
1 RHO(IX,JR), RHOO(IX,JR), AMU(IX,JR), 00104900
2 CON(IX,JR), CP(IX,JR), OMEGA(NG,IX,JR), 00105000
3 DIFP(NG,NG,IX,JR), AMF(NG,IX), VWALL(IX), 00105100
4 XM(7), ALPHAO(NG), 00105200
5 XMA(IX,JR), ACOEF(6,7), GNMF(NG), GNMW(NG), 00105300
6 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), D21IN(NG), ICHM(2) 00105400
C ***** 00105500
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, 00105600
1 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN, 00105700
2 /TEMP / T, 00105800
3 /PRP / RHO, RHOO, AMU, DIFP, CON, CP, 00105900
4 /GAS / NGAS, 00106000
5 /MOLNO / XM, XMA, 00106100
6 /MSFRC / DMEGA, 00106200
7 /PRAM / RE, SC, GR, PR, 00106300
8 /UVP / U, V, P 00106400
00000006 COMMON /MFLUX / AMF, VWALL, 00106500
1 /DENS / RHOIN, RHORF, 00106600
2 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00106700
3 /DTUBE / DIAM, 00106800
4 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00106900
5 /RELX / NSETP, ALPP, ALPU, ALPV, ALPHAO, 00107000
6 /REACT / NCR,NCR1,NCR2,NCR3 00107100
C ***** 00107200
C ----- HETEROGENEOUS CHEMICAL REACTION AT WALL ----- 00107300
C ***** 00107400
00000007 EZERO = 1.0E-13 00107500
00000008 NCRT = NCR + NCR1 + NCR2 + NCR3 00107600
00000009 ALPVW = 1.0 00107700
00000010 ANO2 = 0.75 00107800
00000011 ANCO2 = 1.0 00107900
00000012 XCR1 = 1.0 00108000
00000013 XCR2 = 0.0 00108100
00000014 XCR12 = 1.0 00108200
00000015 XCR3 = 1.0 00108300
00000016 IF ( NCR1.EQ.0 ) XCR1=0.0 00108400
00000017 IF ( NCR2.EQ.0 ) THEN 00108500
00000018 XCR1 = 0.0 00108600
00000019 XCR2 = 1.0 00108700
00000020 ENDIF 00108800
00000021 IF ( NCR3.EQ.0 ) XCR3=0.0 00108900
00000022 IF ( NCR1.EQ.0.AND.NCR2.EQ.0 ) XCR12 =0.0 00109000
00000023 RUIN = 1.0/RHOIN/UIN 00109100
00000024 DTREF = TW - TIN 00109200
C ***** 00109300
00000025 DO 1000 I=ICHM(1), ICHM(2) 00109400
C ***** 00109500
C ***** VELOCITY CONSTANT OF CHEMICAL REACTION ***** 00109600
C ***** 00109700

```

FORTTRAN77 EX V12L10 BNDIP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000026      TDIMK      = T(I,JN)*DTREF + TIN + 273.15      00109800
00000027      PDIM       = P(I,JN)*RH0IN*UIN*UIN + PREF      00109900
C                                                     00110000
00000028      XXO2      = -2560.0*EXP(-142000.0/RGC/TDIMK)*(PDIM/1.013E5) 00110100
1          **0.5*(1.0/0.2095)**ANO2 * XCR12                00110200
00000029      XXCO2     = -44.5*EXP(-162710.0/RGC/TDIMK) * XCR3 00110300
00000030      FCOCO2    = 800.0*EXP(-6200.0/TDIMK) * XCR1      00110400
C                                                     00110500
C          ----- SOLUTION OF MOLE FRACTION AT WALL ----- 00110600
C                                                     00110700
00000031      ZMF       = 0.0                                     00110800
00000032      DO 2000  IGNM=1,NGAS                               00110900
00000033  2000      ZMF = ZMF + OMEGA(IGNM,I,JN-1)/XM(IGNM)    00111000
00000034      ZMF = 1.0/ZMF                                     00111100
00000035      DO 2100  IGNM=1,NGAS                               00111200
00000036      GNMFM(IGNM) = ZMF*OMEGA(IGNM,I,JN-1)/XM(IGNM)  00111300
00000037  2100      GNMW(IGNM) = XMA(I,JN)*OMEGA(IGNM,I,JN)/XM(IGNM) 00111400
C                                                     00111500
00000038      CVT      = RHO(I,JN)*VWALL(I)/XMA(I,JN)         00111600
00000039      GNRO2    = XM(2)/1.2E-2*(2.0+FCOCO2)/2.0/(XCR2+1.0+FCOCO2)*XXO2 00111700
1          *RUIN                                              00111800
00000040      GNRCO    = -XM(3)/1.2E-2*(FCOCO2+XCR2)/(1.0+FCOCO2)*XXO2 *RUIN 00111900
00000041      GNRCO2   = -XM(4)/1.2E-2*(1.0-XCR2)/(1.0+FCOCO2)*XXO2 *RUIN  00112000
00000042      GMRCO    = -2.0*XM(3)/1.2E-2*XXCO2 *RUIN       00112100
00000043      GMRCO2   = XM(4)/1.2E-2*XXCO2 *RUIN            00112200
C                                                     00112300
00000044      CKEISU   = 2.0/RE/SC*RHO(I,JN)/XMA(I,JN)/XMA(I,JN)/DR(JN-1) 00112400
00000045      DO 3100  K=1,NGAS                                  00112500
00000046      DO 3100  J=1,NGAS                                  00112600
00000047  3100      ACOEF(K,J)      = CKEISU * DIFP(K,J,I,JN)*XM(K)*XM(J) 00112700
C                                                     00112800
00000048      ACOEF(1,NGAS+1) = CKEISU*(DIFP(1,2,I,JN-1)*XM(1)*XM(2)*GNMF(2) 00112900
1          + DIFP(1,3,I,JN-1)*XM(1)*XM(3)*GNMF(3)          00113000
2          + DIFP(1,4,I,JN-1)*XM(1)*XM(4)*GNMF(4))          00113100
00000049      DO 3200  K=2,NGAS                                  00113200
00000050      ACOEF(K,NGAS+1) = CKEISU*(DIFP(K,1,I,JN-1)*XM(K)*XM(1)*GNMF(1) 00113300
1          + DIFP(K,2,I,JN-1)*XM(K)*XM(2)*GNMF(2)          00113400
2          + DIFP(K,3,I,JN-1)*XM(K)*XM(3)*GNMF(3)          00113500
3          + DIFP(K,4,I,JN-1)*XM(K)*XM(4)*GNMF(4)          00113600
4          - DIFP(K,1,I,JN-1)*XM(K)*XM(1) )                  00113700
00000051  3200 CONTINUE                                        00113800
C                                                     00113900
00000052      ROMGO2   = 1.0                                     00114000
00000053      ROMGC2   = 1.0                                     00114100
00000054      IF ( GNMW(2).GT.0.0 ) ROMGO2 = GNMW(2)**(ANO2-1.0) 00114200
00000055      IF ( GNMW(4).GT.0.0 ) ROMGC2 = GNMW(4)**(ANCO2-1.0) 00114300
C                                                     00114400
00000056      DO 3300  L=1,NGAS+1                               00114500
00000057  3300      ACOEF(1,L) = 1.0                             00114600
00000058      ACOEF(2,2) = CVT * XM(2) + GNRO2 *ROMGO2 - ACOEF(2,1) 00114700
00000059      ACOEF(2,3) = ACOEF(2,3) - ACOEF(2,1)           00114800
00000060      ACOEF(2,4) = ACOEF(2,4) - ACOEF(2,1)           00114900
00000061      ACOEF(3,2) = ACOEF(3,2) + GNRCO *ROMGO2 - ACOEF(3,1) 00115000
00000062      ACOEF(3,3) = CVT * XM(3) - ACOEF(3,1)          00115100
00000063      ACOEF(3,4) = ACOEF(3,4) + GMRCO *ROMGC2 - ACOEF(3,1) 00115200
00000064      ACOEF(4,2) = ACOEF(4,2) + GNRCO2*ROMGO2 - ACOEF(4,1) 00115300
00000065      ACOEF(4,3) = ACOEF(4,3) - ACOEF(4,1)           00115400
00000066      ACOEF(4,4) = CVT * XM(4) + GMRCO2*ROMGC2 - ACOEF(4,1) 00115500
00000067      ACOEF(2,1) = 0.0                                   00115600
00000068      ACOEF(3,1) = 0.0                                   00115700

```

FORTRAN77 EX V12L10 BNDIP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000069      ACDEF(4,1) = 0.0                                00115800
C                                                    00115900
C      -----  FOR CASE WITHOUT CHEMICAL REACTION  -----  00116000
C                                                    00116100
00000070      IF ( NCR1.EQ.1.AND.NCRT.EQ.1 ) THEN          00116200
00000071          DO 3310 KK=1,NGAS+1                      00116300
00000072      3310      ACDEF(4,KK) = 0.0                  00116400
00000073          ACDEF(4,4) = 1.0                          00116500
00000074          END IF                                    00116600
00000075      IF ( NCR2.EQ.1.AND.NCRT.EQ.1 ) THEN          00116700
00000076          DO 3320 KK=1,NGAS+1                      00116800
00000077      3320      ACDEF(3,KK) = 0.0                  00116900
00000078          ACDEF(3,3) = 1.0                          00117000
00000079          END IF                                    00117100
00000080      IF ( NCR3.EQ.1.AND.NCRT.EQ.1 ) THEN          00117200
00000081          DO 3330 KK=1,NGAS+1                      00117300
00000082      3330      ACDEF(2,KK) = 0.0                  00117400
00000083          ACDEF(2,2) = 1.0                          00117500
00000084          END IF                                    00117600
C                                                    00117700
00000085      CALL GAUELD ( ACDEF, 6, NGAS, NGAS+1, 1.0D-15, ILL ) 00117800
00000086          IF ( ILL.NE.0 ) WRITE(6,600) ILL, I        00117900
00000087      600  FORMAT(1H0,/,1X,100('#'),/, ' ERROR AT GAUELS IN BNDIP !!!', 00118000
1          ' ILL=',I5,' I=',I3,/)                          00118100
C                                                    00118200
C      -----  MOLE FRACTION AT WALL ; ACDEF(K,NGAS+1)  -----  00118300
C                                                    00118400
00000088      DO 3400 K=1,NGAS                               00118500
00000089          ACDEF(K,NGAS+1) = GNMW(K) + ALPHAO(K) * ( ACDEF(K,NGAS+1) 00118600
1          - GNMW(K) )                                       00118700
00000090          IF ( ACDEF(K,NGAS+1).LT.EZERO ) ACDEF(K,NGAS+1) = 0.0    00118800
00000091          IF ( ACDEF(K,NGAS+1).GT.1.0 ) ACDEF(K,NGAS+1) = 1.0    00118900
00000092      3400 CONTINUE                                  00119000
C                                                    00119100
C      *****  DIMENSIONAL MASS FLUX (KG/M**2/S)  *****  00119200
C                                                    00119300
00000093      AMF(2,I) = GNRO2/RUIN * ACDEF(2,NGAS+1)**ANO2 00119400
00000094      AMF(3,I) = GNRCO/RUIN * ACDEF(2,NGAS+1)**ANO2 00119500
1          + GMRCO/RUIN * ACDEF(4,NGAS+1)**ANCO2          00119600
00000095      AMF(4,I) = GNRCO2/RUIN * ACDEF(2,NGAS+1)**ANO2 00119700
1          + GMRCO2/RUIN * ACDEF(4,NGAS+1)**ANCO2          00119800
00000096      AMF(1,I) = - ( AMF(2,I) + AMF(3,I) + AMF(4,I) ) 00119900
C                                                    00120000
C      -----  FROM MOLE FRACTION TO MASS FRACTION AND V-WALL  -----  00120100
C                                                    00120200
00000097      ZMW = 0.0                                     00120300
00000098      DO 3500 K=1,NGAS                               00120400
00000099      3500      ZMW = ZMW + XM(K)*ACDEF(K,NGAS+1) 00120500
00000100          DO 3600 K=1,NGAS                               00120600
00000101          OMEGA(K,I,JN) = ACDEF(K,NGAS+1)*XM(K)/ZMW 00120700
00000102      3600 CONTINUE                                  00120800
C                                                    00120900
00000103      VWALL(I) = VWALL(I) + ALPVW * ( AMF(1,I)*RUIN/RHO(I,JN) 00121000
1          - VWALL(I) )                                       00121100
C                                                    00121200
00000104      1000 CONTINUE                                  00121300
C                                                    00121400
00000105      RETURN                                         00121500
00000106      END                                           00121600

```





FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00121700
C *****00121800
C ***** INITIAL CONDITION *****00121900
C *****00122000
00000001 SUBROUTINE INIT 00122100
C *****00122200
C *****00122300
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00122400
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00122500
C
00000004 DIMENSION T(IX,JR), TO(IX,JR), RHO(IX,JR), RHOO(IX,JR), 00122600
1 OMEGA(NG,IX,JR), OMEGAO(NG,IX,JR), 00122700
2 U(IX,JR), UO(IX,JR), V(IX,JR), VO(IX,JR), P(IX,JR), 00122800
3 AMF(NG,IX), VWALL(IX), ICHM(2), IHOT(2), IVWL(2), 00122900
4 OMGIN(NG), X(IX), XA(IX), DX(IX) 00123000
C
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, IVWL, 00123100
1 /TEMP / T, TO, 00123200
2 /UVP / U, V, P, UO, VO, 00123300
3 /PRP / RHO, RHOO, 00123400
4 /MSFRC / OMEGA, OMEGAO, 00123500
5 /MFLUX / AMF, VWALL, 00123600
6 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00123700
7 /BND / MCUIN, UWALL, OMGIN, VWIN, 00123800
8 /PRAM / RE, 00123900
9 /DIMX / X, XA, DX 00124000
C
C ----- TEMPERATURE AND DENSITY ----- 00124100
C 00124200
00000006 DO 1000 I=1,IN 00124300
00000007 VWALL(I) = 0.0 00124400
00000008 DO 1000 J=1,JN 00124500
C RHO(I,J) = RHO(1,J) 00124600
C RHOO(I,J) = RHOO(1,J) 00124700
00000009 IF ( TW.EQ.TIN ) THEN 00124800
00000010 T(I,J) = 1.0 00124900
00000011 TO(I,J) = 1.0 00125000
00000012 ELSE 00125100
00000013 T(I,J) = 0.0 00125200
00000014 TO(I,J) = 0.0 00125300
00000015 END IF 00125400
00000016 UO(I,J) = 0.0 00125500
00000017 VO(I,J) = 0.0 00125600
00000018 OMEGA(1,I,J) = 1.0 00125700
00000019 DO 1100 K=2,NG 00125800
00000020 OMEGA(K,I,J) = 0.0 00125900
00000021 1100 CONTINUE 00126000
00000022 1000 CONTINUE 00126100
C 00126200
00000023 DO 1200 I=IVWL(1), IVWL(2) 00126300
00000024 VWALL(I) = VWIN 00126400
00000025 1200 CONTINUE 00126500
C 00126600
C 00126700
00000026 RETURN 00126800
00000027 END 00126900
00127000
00127100
00127200

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****
C ***** SOLUTION OF PRESSURE EQUATION *****
C *****
00000001 SUBROUTINE SOLP
C *****
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 )
00000004 DIMENSION U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR),
1 X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX),
2 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR),
3 AH(IX,JR), AHO(IX,JR), AHU(IX,JR), AHD(IX,JR),
4 AHR(IX,JR), AHL(IX,JR), RESP(3),
5 AU(IX,JR), AUU(IX,JR), AUD(IX,JR), AUR(IX,JR), AUL(IX,JR),
6 BU(IX,JR), CU(IX,JR), EU(IX,JR),
7 AV(IX,JR), AVU(IX,JR), AVD(IX,JR), AVR(IX,JR), AVL(IX,JR),
8 BV(IX,JR), CV(IX,JR), EV(IX,JR),
9 VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR), VOLS(IX,JR)
00000005 COMMON /NODE / IN, JN,
1 /ITR / DTAU, ITER,
2 /RELX / NSETP, ALPHAP,
3 /DIMX / X, XA, DX, DXA,
4 /DIMR / R, RA, DR, DRA,
5 /UVP / U, V, P,
6 /PRP / RHO, RHO0,
7 /ERROR / ERRP,
8 /FACTP / AHU, AHD, AHR, AHL, AH,
9 /RESDL / RESP
00000006 COMMON /ALG / NSIMP,
1 /IJPFIX/ IPFIX, JPFIX, PFIX,
2 /FCU / AU, AUU, AUD, AUR, AUL, BU,
3 /FCUD / CU, EU,
4 /FCV / AV, AVU, AVD, AVR, AVL, BV,
5 /FCVD / CV, EV,
6 /VOLUME/ VOLU, VOLV, VOLS,
7 /SSC / CTIME
C
C ----- FACTOR OF PRESSURE EQUATION -----
C : AH, AHU, AHD, AHR, AHL AHO
C
00000007 DO 1000 I=2,IN-1
00000008 DO 1000 J=2,JN-1
C
C ----- X DIRECTION -----
C
00000009 IF ( I.EQ.2 ) THEN
00000010 AHD(I,J) = 0.0
00000011 AHOUD = RHO(1,J)*U(1,J)/DX(I)
00000012 ELSE
00000013 UHIJ = ( AUU(I-1,J)*U(I,J) + AUD(I-1,J)*U(I-2,J)
1 + AUR(I-1,J)*U(I-1,J+1) + AUL(I-1,J)*U(I-1,J-1)
2 + BU(I-1,J) ) / AU(I-1,J)
00000014 AHD(I,J) = CU(I-1,J)/DX(I)*EU(I-1,J) * VOLS(I,J)
00000015 AHOUD = CU(I-1,J)/DX(I)*UHIJ
00000016 ENDIF
C
00000017 IF ( I.EQ.IN-1 ) THEN
00000018 AHU(I,J) = 0.0
00000019 AHOU = RHO(IN,J)/DX(I)* U(I,J)

```

FORTRAN77 EX V12L10 SOLP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000020      ELSE
00000021      UHIJ      = ( AUU(I,J)*U(I+1,J) + AUD(I,J)*U(I-1,J)
1              + AUR(I,J)*U(I,J+1) + AUL(I,J)*U(I,J-1)
2              + BU(I,J) ) / AU(I,J)
00000022      AHU(I,J) = CU(I,J)/DX(I)*EU(I,J) * VOLSL(I,J)
00000023      AHOV      = CU(I,J)/DX(I)*UHIJ
00000024      ENDIF
C
C      ----- R DIRECTION -----
C
00000025      RDR = R(J)*DR(J)
00000026      IF ( J.EQ.2 ) THEN
00000027      AHL(I,J) = 0.0
00000028      AHOVD      = RA(J)*RHO(I,1)*V(I,1)/RDR
00000029      ELSE
00000030      VHIJ      = ( AVU(I,J-1)*V(I+1,J-1) + AVD(I,J-1)*V(I-1,J-1)
1              + AVR(I,J-1)*V(I,J) + AVL(I,J-1)*V(I,J-2)
2              + BV(I,J-1) ) / AV(I,J-1)
00000031      AHL(I,J) = CV(I,J-1)*RA(J)/RDR*EV(I,J-1) * VOLSL(I,J)
00000032      AHOVD      = CV(I,J-1)*RA(J)/RDR*VHIJ
00000033      ENDIF
C
00000034      IF ( J.EQ.JN-1 ) THEN
00000035      AHR(I,J) = 0.0
00000036      AHOV      = RA(J+1)*RHO(I,JN)*V(I,J)/RDR
00000037      ELSE
00000038      VHIJ      = ( AVU(I,J)*V(I+1,J) + AVD(I,J)*V(I-1,J)
1              + AVR(I,J)*V(I,J+1) + AVL(I,J)*V(I,J-1)
2              + BV(I,J) ) / AV(I,J)
00000039      AHR(I,J) = CV(I,J)*RA(J+1)/RDR*EV(I,J) * VOLSL(I,J)
00000040      AHOV      = CV(I,J)*RA(J+1)/RDR*VHIJ
00000041      ENDIF
C
00000042      AH(I,J) = AHU(I,J) + AHD(I,J) + AHR(I,J) + AHL(I,J)
00000043      AHO(I,J) = ( -(RHO(I,J)-RHOO(I,J))/DTAU *CTIME
1              -(AHOV-AHOVD) - (AHOV-AHOVD) ) * VOLSL(I,J)
C
00000044      1000 CONTINUE
C
C      ----- SOLUTION OF PRESSURE -----
C
00000045      IF ( NSIMP.EQ.1 ) RETURN
C
00000046      CALL ADI ( ITER, IN, JN, AH, AHU, AHD, AHR, AHL, AHO,
1              P, ALPHAP, NSETP, ERRP, RESP )
00000047      MI      = RESP(2)
00000048      MJ      = RESP(3)
00000049      RESP(1) = RESP(1)/VOLSL(MI,MJ)
C
C      ----- PRESSURE MODIFICATION BY STANDARD PRESSURE -----
C
00000050      DPCOR = P(IPFIX,JPFIX) - PFIX
00000051      DO 2000 I=2,IN-1
00000052      DO 2000 J=2,JN-1
00000053      P(I,J) = P(I,J) - DPCOR
00000054      2000 CONTINUE
C
C
00000055      RETURN
00000056      END

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00139300
C ***** FACTOR OF X DIRECTION IN PRESSURE EQUATION *****00139400
C *****00139500
C *****00139600
00000001 SUBROUTINE FACTU 00139700
C ***** < FROM I=2 TO I=IN-2 > *****00139800
C *****00139900
C 00140000
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00140100
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 ) 00140200
C 00140300
00000004 DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), 00140400
1 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), 00140500
2 U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), UO(IX,JR), 00140600
3 RHO(IX,JR), RHOO(IX,JR), AMU(IX,JR), 00140700
4 AU(IX,JR), AUU(IX,JR), AUD(IX,JR), AUR(IX,JR), 00140800
5 AUL(IX,JR), BU(IX,JR), CU(IX,JR), EU(IX,JR), 00140900
6 VOLU(IX,JR) 00141000
C 00141100
00000005 COMMON /ITR / DTAU, ITER, 00141200
1 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00141300
2 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00141400
3 /UVP / U, V, P, UO, 00141500
4 /PRP / RHO, RHOO, AMU, 00141600
5 /PRAM / RE, SC, GR, 00141700
6 /EQPRX / CX1, CX2, CX3, CX4, 00141800
7 /DENS / RHOIN, RHORF, 00141900
8 /NODE / IN, JN, 00142000
9 /SSC / CTIME 00142100
00000006 COMMON /FCU / AU, AUU, AUD, AUR, AUL, BU, 00142200
1 /FCUD / CU, EU, 00142300
2 /VOLUME/ VOLU 00142400
C 00142500
00000007 DO 1000 I=2,IN-2 00142600
00000008 DO 1000 J=2,JN-1 00142700
C 00142800
C ----- THERMAL PROPERTIES ----- 00142900
C 00143000
00000009 RPHJ = ( DX(I+1)*RHO(I,J )+DX(I)*RHO(I+1,J ) )/DXA(I)/2.0 00143100
00000010 RMH = ( DX(I+1)*RHO(I,J-1)+DX(I)*RHO(I+1,J-1 ) )/DXA(I)/2.0 00143200
00000011 ROPHJ = ( DX(I+1)*RHOO(I,J) +DX(I)*RHOO(I+1,J ) )/DXA(I)/2.0 00143300
00000012 RPHMH = ( DR(J )*RMH +DR(J-1)*RPHJ )/DRA(J-1)/2.0 00143400
00000013 GMJ = (X(I+1)-X(I))/( ( X (I+1)-XA(I+1))/AMU(I+1,J) 00143500
1 +(XA(I+1)-X ( I))/AMU(I, J) ) 00143600
00000014 GMJP = (X(I+1)-X(I))/( ( X (I+1)-XA(I+1))/AMU(I+1,J+1) 00143700
1 +(XA(I+1)-X ( I))/AMU(I, J+1) ) 00143800
00000015 GMJM = (X(I+1)-X(I))/( ( X (I+1)-XA(I+1))/AMU(I+1,J-1) 00143900
1 +(XA(I+1)-X ( I))/AMU(I, J-1) ) 00144000
C 00144100
C 00144200
C ----- FOR J=2 ----- 00144300
C 00144400
00000016 IF ( J.EQ.2 ) THEN 00144500
00000017 GMPMH = GMJ 00144600
00000018 ELSE 00144700
00000019 GMPMH = ( LOG(R( J))- LOG(R(J-1)) )/ 00144800
1 ( ( LOG(R ( J))- LOG(RA( J)) )/GMJ 00144900
2 +( LOG(RA( J))- LOG(R ( J-1)) )/GMJM ) 00145000
00000020 ENDIF 00145100
C 00145200
C ----- FOR J=JN-1 -----

```

FORTRAN77 EX V12L10 FACTU DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
00000021 IF ( J.EQ.JN-1 ) THEN
00000022 GMPPH = GMJP
00000023 RPPH = ( DX(I+1)*RHO(I,JN )+DX(I)*RHO(I+1,JN ) )/DXA(I)/2.0
00000024 ELSE
00000025 GMPPH = ( LOG(R(J+1))- LOG(R( J)) ) /
1 ( ( LOG(R ( J+1))- LOG(RA(J+1)) )/GMJP
2 + ( LOG(RA(J+1))- LOG(R ( J)) )/GMJ )
00000026 RPHJP = ( DX(I+1)*RHO(I,J+1)+DX(I)*RHO(I+1,J+1) )/DXA(I)/2.0
00000027 RPPH = ( DR(J+1)*RPHJ +DR(J)*RPHJP )/DRA(J)/2.0
00000028 ENDIF
C
C
C ----- FACTOR AT (I+1) ; AUU -----
00000029 UIPH = ( U(I+1,J) + U(I,J) ) * 0.5
00000030 FIPH = RHO(I+1,J)*UIPH/DXA(I)
00000031 DPJ = AMU(I+1,J)/DXA(I)/DX(I+1)
00000032 PEPJ = FIPH/DPJ * RE
00000033 A = (1.0-0.1*ABS(PEPJ))**5
00000034 DPPJ = DPJ*MAX(A,0.0)
00000035 AUU(I,J) = ( (DPPJ+DPJ*CX1)/RE + MAX(-FIPH,0.0) ) * VOLU(I,J)
00000036 IF ( I.EQ.IN-2 ) AUU(I,J) = 0.0
C
C
C ----- FACTOR AT (I-1) ; AUD -----
00000037 UIMH = ( U(I-1,J) + U(I,J) ) * 0.5
00000038 FIMH = RHO( I,J)*UIMH/DXA(I)
00000039 DIJ = AMU( I,J)/DXA(I)/DX( I)
00000040 PEIJ = FIMH/DIJ * RE
00000041 A = (1.0-0.1*ABS(PEIJ))**5
00000042 DPIJ = DIJ*MAX(A,0.0)
00000043 AUD(I,J) = ( (DPIJ+DIJ*CX1)/RE + MAX( FIMH,0.0) ) * VOLU(I,J)
C
C
C ----- FACTOR AT (J-1) ; AUL -----
00000044 IF ( J.EQ.2 ) THEN
00000045 FJMH = 0.0
00000046 AUL(I,J) = 0.0
00000047 ELSE
00000048 VPHM = ( V(I,J-1)*DX(I+1) + V(I+1,J-1)*DX(I) )/DXA(I)/2.0
00000049 FJMH = RA(J)*RPHMH*VPHM/R(J)/DR(J)
00000050 DPHMH = RA( J)*GMPPH/R(J)/DR(J)/DRA(J-1)
00000051 PEPMH = FJMH/DPMH * RE
00000052 A = (1.0-0.1*ABS(PEPMH))**5
00000053 DPPMH = DPMH*MAX(A,0.0)
00000054 AUL(I,J) = ( DPPMH/RE + MAX( FJMH,0.0) ) * VOLU(I,J)
00000055 ENDIF
C
C
C ----- FACTOR AT (J+1) ; AUR -----
00000056 VPHJ = ( V(I,J)*DX(I+1) + V(I+1,J)*DX(I) )/DXA(I)/2.0
00000057 FJPH = RA(J+1)*RPPH*VPHJ/R(J)/DR(J)
00000058 DPHPH = RA(J+1)*GMPPH/R(J)/DR(J)/DRA(J)
00000059 IF ( J.EQ.JN-1 ) DPHPH = DPHPH*2.0*DRA(J)/DR(J)
00000060 PEPHP = FJPH/DPHP * RE
00000061 A = (1.0-0.1*ABS(PEPHP))**5
00000062 DPPHP = DPHPH*MAX(A,0.0)
00000063 AUR(I,J) = ( DPPHP/RE + MAX(-FJPH,0.0) ) * VOLU(I,J)
C
C
C ----- CONSTANT TERM -----

```

FORTRAN77 EX V12L10 FACTU DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
00000064   RMASS = FIPH - FIMH + FJPH - FJMH           00151300
00000065   RMASS = MAX ( RMASS, 0.0 )             00151400
00000066   AU(I,J) = ( CTIME * (RPHJ/DTAU)+ RMASS ) * VOLU(I,J) 00151500
1          + AUU(I,J) + AUD(I,J) + AUR(I,J) + AUL(I,J) 00151600
00000067   BU(I,J) = ( CX2/RE/DXA(I)/R(J)/DR(J)      00151700
1          *( AMU(I+1,J)*( RA(J+1)*V(I+1,J)-RA(J)*V(I+1,J-1) ) 00151800
2          -AMU( I,J)*( RA(J+1)*V( I,J)-RA(J)*V( I,J-1) ) ) 00151900
3          +CX3/RE/DXA(I)/R(J)/DR(J)             00152000
4          *( RA(J+1)*GMPHPP*(V(I+1, J)-V(I, J)) 00152100
5          -RA( J)*GMPHMH*(V(I+1,J-1)-V(I,J-1)) ) 00152200
6          +CX4*GR/RE/RE*(RPHJ-RHORF/RHOIN)/(1.0-RHORF/RHOIN) 00152300
7          +ROPHJ*UO(I,J)/DTAU *CTIME ) * VOLU(I,J) 00152400
C
00000068   EU(I,J) = 1.0/AU(I,J)/DXA(I) * VOLU(I,J) 00152500
00000069   CU(I,J) = RPHJ                           00152600
00000070   1000 CONTINUE                             00152700
C
00000071   DO 1100 J=2,JN-1                           00152800
00000072   CU(1,J) = ( DX(2)*RHO(1,J)+DX(1)*RHO(2,J) )/DXA(1)/2.0 00152900
00000073   1100 CONTINUE                             00153000
C
00000074   RETURN                                     00153100
00000075   END                                       00153200

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00153800
C *****00153900
C ***** FACTOR OF R DIRECTION IN PRESSURE EQUATION *****00154000
C *****00154100
00000001 SUBROUTINE FACTV 00154200
C ***** < FROM J=2 TO J=JN-2 > *****00154300
C *****00154400
C 00154500
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00154600
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 ) 00154700
C 00154800
00000004 DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), 00154900
1 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), 00155000
2 U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), UO(IX,JR), VO(IX,JR), 00155100
3 RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR), AMU(IX,JR), 00155200
4 AV(IX,JR), AVU(IX,JR), AVD(IX,JR), AVR(IX,JR), 00155300
5 AVL(IX,JR), BV(IX,JR), CV(IX,JR), EV(IX,JR), 00155400
6 VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR) 00155500
C 00155600
00000005 COMMON /ITR / DTAU, ITER, 00155700
1 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00155800
2 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00155900
3 /UVP / U, V, P, UO, VO, 00156000
4 /PRP / RHO, RHO0, AMU, 00156100
5 /PRAM / RE, SC, GR, 00156200
6 /EQPRR / CR1, CR2, CR3, 00156300
7 /DENS / RHOIN, RHORF, 00156400
8 /NODE / IN, JN, 00156500
9 /SSC / CTIME 00156600
00000006 COMMON /FCV / AV, AVU, AVD, AVR, AVL, BV, 00156700
1 /FCVD / CV, EV, 00156800
2 /VOLUME/ VOLU, VOLV 00156900
C 00157000
00000007 DO 1000 I=2,IN-1 00157100
00000008 DO 1000 J=2,JN-2 00157200
C 00157300
C ----- THERMAL PROPERTIES ----- 00157400
C 00157500
00000009 GMJ = (X(I+1)-X(I))/( (X(I+1)-XA(I+1))/AMU(I+1,J) 00157600
1 + (XA(I+1)-X(I))/AMU(I,J) ) 00157700
00000010 GMJP = (X(I+1)-X(I))/( (X(I+1)-XA(I+1))/AMU(I+1,J+1) 00157800
1 + (XA(I+1)-X(I))/AMU(I,J+1) ) 00157900
00000011 GMMJ = (X(I)-X(I-1))/( (X(I)-XA(I))/AMU(I,J) 00158000
1 + (XA(I)-X(I-1))/AMU(I-1,J) ) 00158100
00000012 GMMJP = (X(I)-X(I-1))/( (X(I)-XA(I))/AMU(I,J+1) 00158200
1 + (XA(I)-X(I-1))/AMU(I-1,J+1) ) 00158300
00000013 GMIPH = ( LOG(R(J+1))- LOG(R(J)) )/ 00158400
1 ( ( LOG(R(J+1))- LOG(RA(J+1)) )/AMU(I,J+1) 00158500
2 + ( LOG(RA(J+1))- LOG(R(J)) )/AMU(I,J) ) 00158600
00000014 RIPH = ( RHO(I,J)*DR(J+1) + RHO(I,J+1)*DR(J) )/DRA(J)/2.0 00158700
00000015 ROIPH = ( RHO0(I,J)*DR(J+1) + RHO0(I,J+1)*DR(J) )/DRA(J)/2.0 00158800
C 00158900
C ----- THERMAL PROPERTIES ----- 00159000
C ----- FOR I=2 ----- 00159100
C 00159200
00000016 IF ( I.EQ.2 ) THEN 00159300
00000017 GMMHPPH = GMMHPPH 00159400
00000018 RMHPPH = RIPH 00159500
00000019 ELSE 00159600
00000020 RIMPH = ( RHO(I-1,J)*DR(J+1) + RHO(I-1,J+1)*DR(J) )/DRA(J)/2.0 00159700

```



```

FORTRAN77 EX  V12L10  FACTV      DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000021      RMHPH = ( DX(I)*RIMPH + DX(I-1)*RIPH )/DXA(I-1)/2.0      00159800
00000022      GMMHPH = ( LOG(R(J+1))- LOG(R(J)) )/      00159900
1              ( ( LOG(R (J+1))- LOG(RA(J+1)) )/GMMJP      00160000
2              +( LOG(RA(J+1))- LOG(R ( J)) )/GMMJ )      00160100
00000023      ENDIF      00160200
C      00160300
C      ----- FOR I=IN-1 -----      00160400
C      00160500
00000024      RIPPH = ( RHO(I+1,J )*DR(J+1) + RHO(I+1,J+1)*DR(J) )/DRA(J)/2.0      00160600
00000025      IF ( I.EQ.IN-1 ) THEN      00160700
00000026      RPPH = RIPPH      00160800
00000027      GMPHPH = ( LOG(R(J+1))- LOG(R(J)) )/      00160900
1              ( ( LOG(R (J+1))- LOG(RA(J+1)) )/AMU(I+1,J+1)      00161000
2              +( LOG(RA(J+1))- LOG(R ( J)) )/AMU(I+1,J) )      00161100
00000028      ELSE      00161200
00000029      RPPH = ( RIPH*DX(I+1) + RIPPH*DX(I) )/DXA(I)/2.0      00161300
00000030      GMPHPH = ( LOG(R(J+1))- LOG(R( J)) )/      00161400
1              ( ( LOG(R (J+1))- LOG(RA(J+1)) )/GMJP      00161500
2              +( LOG(RA(J+1))- LOG(R ( J)) )/GMJ )      00161600
00000031      ENDIF      00161700
C      00161800
C      ----- FACTOR AT (J-1) ; AVL -----      00161900
C      00162000
00000032      VJMH = (V(I,J) + V(I,J-1))/2.0      00162100
00000033      FIMH = R( J)*RHO(I, J)*VJMH/RA(J+1)/DRA(J)      00162200
00000034      DIMH = R( J)*AMU(I, J)/RA(J+1)/DRA(J)/DR( J)      00162300
00000035      PEIMH = FIMH/DIMH * RE      00162400
00000036      A = (1.0-0.1*ABS(PEIMH))*5      00162500
00000037      DPIMH = DIMH*MAX(A,0.0)      00162600
00000038      AVL(I,J) = ( (DPIMH + CR2*RA(J)*AMU(I,J)/R(J)/DR(J)/DRA(J) )/ RE      00162700
1              + MAX( FIMH, 0.0) ) * VOLV(I,J)      00162800
C      00162900
C      ----- FACTOR AT (J+1) ; AVR -----      00163000
C      00163100
00000039      VJPH = (V(I,J+1) + V(I,J) )/2.0      00163200
00000040      FIPH = R(J+1)*RHO(I,J+1)*VJPH/RA(J+1)/DRA(J)      00163300
00000041      DIPH = R(J+1)*AMU(I,J+1)/RA(J+1)/DRA(J)/DR(J+1)      00163400
00000042      PEIPH = FIPH/DIPH * RE      00163500
00000043      A = (1.0-0.1*ABS(PEIPH))*5      00163600
00000044      DPIPH = DIPH*MAX(A,0.0)      00163700
00000045      AVR(I,J) = ( (DPIPH+CR2*RA(J+2)*AMU(I,J+1)/R(J+1)/DR(J+1)/DRA(J))      00163800
1              / RE + MAX(-FIPH, 0.0) ) * VOLV(I,J)      00163900
C      00164000
C      ----- FACTOR AT (I+1) AND (I-1) ; AVU AND AVD -----      00164100
C      00164200
00000046      UIPH = ( (R(J+1)**2-RA(J+1)**2)*U(I,J+1) +      00164300
1              (RA(J+1)**2-R(J)**2)*U(I,J) ) / (R(J+1)**2-R(J)**2)      00164400
00000047      UMPH = ( (R(J+1)**2-RA(J+1)**2)*U(I-1,J+1) +      00164500
1              (RA(J+1)**2-R(J)**2)*U(I-1,J) ) / (R(J+1)**2-R(J)**2)      00164600
00000048      FPHJ = RPPH*UIPH/DX(I)      00164700
00000049      FMHJ = RMHPH*UMPH/DX(I)      00164800
00000050      DPHJ = GMPHPH/DX(I)/DXA(I)      00164900
00000051      DMHJ = GMMHPH/DX(I)/DXA(I-1)      00165000
00000052      IF ( I.EQ.2 ) DMHJ = DMHJ*2.0*DXA(I-1)/DX(I)      00165100
00000053      PEPHJ = FPHJ/DPHJ * RE      00165200
00000054      PEMHJ = FMHJ/DMHJ * RE      00165300
00000055      A = (1.0-0.1*ABS(PEPHJ))*5      00165400
00000056      DPPHJ = DPHJ*MAX(A,0.0)      00165500
00000057      A = (1.0-0.1*ABS(PEMHJ))*5      00165600
00000058      DPMHJ = DMHJ*MAX(A,0.0)      00165700

```

FORTRAN77 EX V12L10 FACTV DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
00000059 AVU(I,J) = ( DPPHJ/RE + MAX(-FPHJ,0.0) ) * VOLV(I,J) 00165800
00000060 AVD(I,J) = ( DPMHJ/RE + MAX( FMHJ,0.0) ) * VOLV(I,J) 00165900
C 00166000
C ----- CONSTANT TERM ----- 00166100
C 00166200
00000061 RMASS = FIPH - FIMH + FPHJ - FMHJ 00166300
00000062 RMASS = MAX ( RMASS, 0.0 ) 00166400
00000063 AV(I,J) = ( CTIME * (RIPH/DTAU) + RMASS ) * VOLV(I,J) 00166500
1 + AVU(I,J) + AVD(I,J) + AVR(I,J) + AVL(I,J) 00166600
2 + ( CR2/RE*(AMU(I,J)/R(J))/DRA(J) - AMU(I,J+1)/R(J+1) 00166700
3 /DRA(J) ) 00166800
4 + CR3*(AMU(I,J+1)-AMU(I,J))/RE/RA(J+1)/DRA(J) 00166900
5 ) * VOLV(I,J) 00167000
00000064 BV(I,J) = ( CR1/RE*(AMU(I,J+1)*(U(I,J+1)-U(I-1,J+1))/DRA(J)/DX(I) 00167100
1 -AMU(I,J)*(U(I,J)-U(I-1,J))/DRA(J)/DX(I) ) 00167200
2 + CR3/RE*(GMPHPH*(U(I,J+1)-U(I,J))/DRA(J)/DX(I) 00167300
3 -GMMHPH*(U(I-1,J+1)-U(I-1,J))/DRA(J)/DX(I) ) 00167400
4 + ROIPH*VO(I,J)/DTAU *CTIME 00167500
5 - GMIPH/RE/RA(J+1)/RA(J+1)*V(I,J) ) * VOLV(I,J) 00167600
C 00167700
00000065 EV(I,J) = 1.0/AV(I,J)/DRA(J) * VOLV(I,J) 00167800
00000066 CV(I,J) = RIPH 00167900
00000067 1000 CONTINUE 00168000
C 00168100
00000068 DO 1100 I=2,IN-1 00168200
00000069 CV(I,1) = RHO(I,2) 00168300
00000070 CV(I,JN-1) = ( RHO(I,JN-1)*DR(JN) + RHO(I,JN)*DR(JN-1) ) 00168400
1 /DRA(JN-1)/2.0 00168500
00000071 1100 CONTINUE 00168600
C 00168700
C 00168800
00000072 RETURN 00168900
00000073 END 00169000
00169100

```

FORTRAN77 EX V12L10

DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****
C ***** SOLUTION OF MOMENTUM EQUATIONS *****
C *****
00000001          SUBROUTINE SOLUV
C *****
C
00000002  IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )
00000003  PARAMETER ( IX=101, JR=51 )
C
00000004  DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX),
1             R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR),
2             U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR),
3             AU(IX,JR), AUU(IX,JR), AUD(IX,JR), AUR(IX,JR),
4             AUL(IX,JR), BU(IX,JR),
5             AV(IX,JR), AVU(IX,JR), AVD(IX,JR), AVR(IX,JR),
6             AVL(IX,JR), BV(IX,JR),
7             RESP(3), RESU(3), RESV(3), VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR)
C
00000005  COMMON /NODE / IN, JN,
1             /ITR / DTAU, ITER,
2             /DIMX / X, XA, DX, DXA,
3             /DIMR / R, RA, DR, DRA,
4             /UVP / U, V, P,
5             /RELX / NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV,
6             /FCU / AU, AUU, AUD, AUR, AUL, BU,
7             /FCV / AV, AVU, AVD, AVR, AVL, BV,
8             /RESDL / RESP, RESU, RESV,
9             /VOLUME/ VOLU, VOLV
C
C ----- SOLUTION OF MOMENTUM EQUATION IN X DIRECTION -----
C
00000006  DO 1000 I=2,IN-2
00000007  DO 1000 J=2,JN-1
00000008  BU (I,J) = BU(I,J) + ( P(I,J) - P(I+1,J) )/DXA(I) * VOLU(I,J)
00000009  1000 CONTINUE
C
00000010  CALL ADI ( ITER, IN-1, JN, AU, AUU, AUD, AUR, AUL, BU,
1             U, ALPHAU, 1, ERRU, RESU )
00000011  MI = RESU(2)
00000012  MJ = RESU(3)
00000013  RESU(1) = RESU(1)/VOLU(MI,MJ)
C
C ----- SOLUTION OF MOMENTUM EQUATION IN R DIRECTION -----
C
00000014  DO 2000 J=2,JN-2
00000015  DO 2000 I=2,IN-1
00000016  BV (I,J) = BV(I,J) + ( P(I,J) - P(I,J+1) )/DRA(J) * VOLV(I,J)
00000017  2000 CONTINUE
C
00000018  CALL ADI ( ITER, IN, JN-1, AV, AVU, AVD, AVR, AVL, BV,
1             V, ALPHAV, 1, ERRV, RESV )
00000019  MI = RESV(2)
00000020  MJ = RESV(3)
00000021  RESV(1) = RESV(1)/VOLV(MI,MJ)
C
C
00000022  RETURN
00000023  END

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00175100
C ***** SOLUTION OF PRESSURE EQUATION FOR CORRECTING U AND V ***** 00175200
C ***** 00175300
C ***** 00175400
00000001 SUBROUTINE CORP 00175500
C ***** 00175600
C ***** 00175700
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00175800
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 ) 00175900
C 00176000
00000004 DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), R(JR), RA(JR), DR(JR), 00176100
1 U(IX,JR), V(IX,JR), PP(IX,JR), RHO(IX,JR), 00176200
2 RHO0(IX,JR), AH(IX,JR), AHU(IX,JR), AHD(IX,JR), 00176300
3 AHR(IX,JR), AHL(IX,JR), AHO(IX,JR), 00176400
4 P(IX,JR), DXA(IX), DRA(JR), RESPP(3), RESP(3), 00176500
5 CU(IX,JR), CV(IX,JR), 00176600
6 VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR), VOLS(IX,JR) 00176700
C 00176800
00000005 COMMON /ITR / DTAU, ITER, 00176900
1 /NODE / IN, JN, 00177000
2 /PRP / RHO, RHO0, 00177100
3 /UVP / U, V, P, 00177200
4 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00177300
5 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00177400
6 /FACTP / AHU, AHD, AHR, AHL, AH, 00177500
7 /CRPP / PP, 00177600
8 /RELX / NSETP, ALPHAP, 00177700
9 /ALG / NSIMP 00177800
00000006 COMMON /IJPPFIX/ IPFIX, JPFIX, PFIX, 00177900
1 /FCUD / CU, 00178000
2 /FCVD / CV, 00178100
3 /RESDL / RESP, 00178200
4 /VOLUME/ VOLU, VOLV, VOLS, 00178300
5 /SSC / CTIME 00178400
C 00178500
00000007 DO 1000 I=1,IN 00178600
00000008 DO 1000 J=1,JN 00178700
00000009 PP(I,J) = 0.0 00178800
00000010 1000 CONTINUE 00178900
C 00179000
00000011 DO 1100 J=2, JN-1 00179100
00000012 DO 1200 I=2, IN-2 00179200
00000013 AHO(I,J) = ( -(RHO(I,J)-RHO0(I,J))/DTAU * CTIME 00179300
1 -(CU(I,J)*U(I,J)-CU(I-1,J)*U(I-1,J))/DX(I) 00179400
2 -(RA(J+1)*CV(I,J)*V(I,J)-RA(J) 00179500
3 *CV(I,J-1)*V(I,J-1))/R(J)/DR(J) ) *VOLS(I,J) 00179600
00000014 1200 CONTINUE 00179700
00000015 AHO(IN-1,J) = ( -(RHO(IN-1,J)-RHO0(IN-1,J))/DTAU * CTIME 00179800
1 -(RA(J+1)*CV(IN-1,J)*V(IN-1,J)-RA(J) 00179900
2 *CV(IN-1,J-1)*V(IN-1,J-1))/R(J)/DR(J) ) *VOLS(IN-1,J) 00180000
00000016 1100 CONTINUE 00180100
C 00180200
C ----- SOLUTION ----- 00180300
C 00180400
00000017 CALL ADI ( ITER, IN, JN, AH, AHU, AHD, AHR, AHL, AHO, PP, 00180500
1 1.0, NSETP, ERRPP, RESPP ) 00180600
C 00180700
C ----- CORRECTION OF PRESSURE ----- 00180800
C 00180900
00000018 IF ( NSIMP.NE.1 ) RETURN 00181000

```

FORTRAN77 EX V12L10 CORP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

00000019	DO 2000 I=2,IN-1	00181100
00000020	DO 2000 J=2,JN-1	00181200
00000021	P(I,J) = P(I,J) + ALPHAP * PP(I,J)	00181300
00000022	2000 CONTINUE	00181400
	C	00181500
00000023	DPCOR = P(IPFIX,JPFIX) - PFIX	00181600
00000024	DO 2100 I=2,IN-1	00181700
00000025	DO 2100 J=2,JN-1	00181800
00000026	P(I,J) = P(I,J) - DPCOR	00181900
00000027	2100 CONTINUE	00182000
	C	00182100
00000028	DO 2200 I=1,3	00182200
00000029	RESP(I) = RESPP(I)	00182300
00000030	2200 CONTINUE	00182400
00000031	MI = RESP(2)	00182500
00000032	MJ = RESP(3)	00182600
00000033	RESP(1) = RESP(1)/VOLS(MI,MJ)	00182700
	C	00182800
	C	00182900
00000034	RETURN	00183000
00000035	END	00183100

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00183200
C *****00183300
C ***** CORRECTION OF VELOCITY ; U AND V *****00183400
C *****00183500
00000001 SUBROUTINE CORUV 00183600
C *****00183700
C *****00183800
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00183900
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 ) 00184000
C
00000004 DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), R(JR), RA(JR), DR(JR), 00184100
1 U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), PP(IX,JR), 00184200
2 CU(IX,JR), CV(IX,JR), EU(IX,JR), EV(IX,JR) 00184300
C
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, 00184400
1 /RELX / NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, 00184500
2 /DIMX / X, XA, DX, 00184600
3 /DIMR / R, RA, DR, 00184700
4 /UVP / U, V, P, 00184800
5 /ERROR / ERRP, ERMXU, ERMXV, 00184900
6 /CRPP / PP, 00185000
7 /ALG / NSIMP, 00185100
8 /FCUD / CU, EU, 00185200
9 /FCVD / CV, EV 00185300
C
00000006 ERRUO = 0.0 00185400
00000007 ERRVO = 0.0 00185500
00000008 ALPU = 1.0 00185600
00000009 ALPV = 1.0 00185700
C
C ----- U ----- 00185800
C 00185900
00000010 DO 100 IP=2,IN-2 00186000
00000011 DO 100 JP=2,JN-1 00186100
00000012 IF ( NSIMP.NE.3 ) THEN 00186200
00000013 UNEW = U(IP,JP) + EU(IP,JP)*(PP(IP,JP)-PP(IP+1,JP))*ALPHAU 00186300
00000014 ELSE 00186400
00000015 UNEW = U(IP,JP) + EU(IP,JP)*( P(IP,JP)-P(IP+1,JP) ) 00186500
00000016 ENDIF 00186600
C
C ----- ERROR ----- 00186700
C 00186800
00000017 ERRU = 0.0 00186900
00000018 IF ( UNEW.NE.0.0 ) ERRU = ( UNEW-U(IP,JP) )/ UNEW 00187000
00000019 ERRU = ABS( ERRU ) 00187100
00000020 ERMXU = MAX( ERRU, ERRUO ) 00187200
00000021 IF ( ERMXU.NE.ERRUO ) ERRUO = ERRU 00187300
C
C ----- UNDER RELAXATION ----- 00187400
C 00187500
00000022 U(IP,JP) = U(IP,JP) + ALPU * ( UNEW-U(IP,JP) ) 00187600
C
00000023 100 CONTINUE 00187700
C
C ----- V ----- 00187800
C 00187900
00000024 DO 200 IP=2,IN-1 00188000
00000025 DO 200 JP=2,JN-2 00188100
00000026 IF ( NSIMP.NE.3 ) THEN 00188200
00000027 VNEW = V(IP,JP) + EV(IP,JP)*(PP(IP,JP)-PP(IP,JP+1))*ALPHAV 00188300

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  CORUV          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000028      ELSE                                00189200
00000029      VNEW = V(IP,JP) + EV(IP,JP)*( P(IP,JP)-P(IP,JP+1) ) 00189300
00000030      ENDIF                                00189400
C                                                     00189500
C ----- ERROR -----                                00189600
C                                                     00189700
00000031      ERRV = VNEW                            00189800
00000032      IF ( ABS(VNEW).GE.1.OE-8 )  ERRV = ( VNEW-V(IP,JP) ) / VNEW 00189900
00000033      ERRV = ABS( ERRV )                    00190000
00000034      ERMXV = MAX( ERRV, ERRVO )           00190100
00000035      IF ( ERMXV.NE.ERRVO )  ERRVO = ERRV  00190200
C                                                     00190300
C ----- UNDER RELAXATION -----                    00190400
C                                                     00190500
00000036      V(IP,JP) = V(IP,JP) + ALPV * ( VNEW-V(IP,JP) ) 00190600
C                                                     00190700
00000037  200 CONTINUE                            00190800
C                                                     00190900
C                                                     00191000
00000038      RETURN                              00191100
00000039      END                                00191200

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00191300
C ***** SOLUTION OF ENERGY EQUATION FOR ONE COMPONENT *****00191400
C *****00191500
C *****00191600
00000001 SUBROUTINE SOLT 00191700
C *****00191800
C *****00191900
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00192000
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00192100
C
00000004 DIMENSION U(IX,JR), V(IX,JR), T(IX,JR), TO(IX,JR), 00192200
1 RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR), CON(IX,JR), AMU(IX,JR), 00192300
2 CP(IX,JR), DIFP(NG,NG,IX,JR), 00192400
3 X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX), 00192500
4 R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR), 00192600
5 AT(IX,JR), ATU(IX,JR), ATD(IX,JR), ATR(IX,JR), 00192700
6 ATL(IX,JR), ATO(IX,JR), REST(3), 00192800
7 VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR), VOLS(IX,JR) 00192900
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, 00193000
1 /ITR / DTAU, ITER, 00193100
2 /SSC / CTIME, 00193200
3 /UVP / U, V, 00193300
4 /TEMP / T, TO, 00193400
5 /PRP / RHO, RHO0, AMU, DIFP, CON, CP, 00193500
6 /DIMX / X, XA, DX, DXA, 00193600
7 /DIMR / R, RA, DR, DRA, 00193700
8 /PRAM / RE, SC, GR, PR, 00193800
9 /TCONST/ ALPHAT, ERRT, REST 00193900
00000006 COMMON /VOLUME/ VOLU, VOLV, VOLS 00194000
C
00000007 PRSC = PR 00194100
00000008 DO 1000 I=2,IN-1 00194200
00000009 DO 1000 J=2,JN-1 00194300
C
00000010 RIP = ( RHO(I+1,J)*DX(I) + RHO(I,J)*DX(I+1) )/DXA(I)/2.0 00194400
00000011 RIM = ( RHO(I-1,J)*DX(I) + RHO(I,J)*DX(I-1) )/DXA(I-1)/2.0 00194500
00000012 RJP = ( RHO(I,J+1)*DR(J) + RHO(I,J)*DR(J+1) )/DRA(J)/2.0 00194600
00000013 RJM = ( RHO(I,J-1)*DR(J) + RHO(I,J)*DR(J-1) )/DRA(J-1)/2.0 00194700
00000014 IF ( J.EQ.2 ) THEN 00194800
00000015 CONJM = CON(I,2) 00194900
00000016 ELSE 00195000
00000017 CONJM = LOG(R(J)/R(J-1))/( LOG(R(J)/RA(J))/CON(I,J) 00195100
1 + LOG(RA(J)/R(J-1))/CON(I,J-1) ) 00195200
00000018 ENDIF 00195300
00000019 CONJP = LOG(R(J+1)/R(J))/( LOG(R(J+1)/RA(J+1))/CON(I,J+1) 00195400
1 + LOG(RA(J+1)/R(J))/CON(I,J) ) 00195500
00000020 IF ( J.EQ.JN-1 ) CONJP = CON(I,JN-1) 00195600
00000021 CONIP = (X(I+1)-X(I))/( X(I+1)-XA(I+1) )/CON(I+1,J) 00195700
1 + (XA(I+1)-X(I))/CON(I,J) ) 00195800
00000022 CONIM = (X(I)-X(I-1))/( X(I)-XA(I) )/CON(I,J) 00195900
1 + (XA(I)-X(I-1))/CON(I-1,J) ) 00196000
C
00000023 FIP = RIP*U(I,J)/DX(I) 00196100
00000024 DIP = CONIP/RE/PRSC/DX(I)/DXA(I) 00196200
00000025 PEIP = FIP/DIP 00196300
00000026 A = (1.0-0.1*ABS(PEIP))**5 00196400
00000027 A = MAX(A,0.0) 00196500
00000028 DDIP = DIP*A 00196600
00000029 ATU(I,J) = ( CP(I,J)*MAX(-FIP,0.0) + DDIP ) * VOLS(I,J) 00196700
C 00197000
00197100
00197200

```



```

FORTRAN77 EX  V12L10  SOLT          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000030      FIM      = RIM*U(I-1,J)/DX(I)          00197300
00000031      DIM      = CONIM/RE/PRSC/DX(I)/DXA(I-1) 00197400
00000032      IF ( I.EQ.2 ) DIM = DIM*2.0*DXA(I-1)/DX(I) 00197500
00000033      PEIM     = FIM/DIM                    00197600
00000034      A        = (1.0-0.1*ABS(PEIM))**5      00197700
00000035      A        = MAX(A,0.0)                 00197800
00000036      DDIM     = DIM*A                      00197900
00000037      ATD(I,J) = ( CP(I,J)*MAX(FIM,0.0) + DDIM ) * VOLS(I,J) 00198000
C
00000038      FJP      = RJP*V(I,J)*RA(J+1)/R(J)/DR(J) 00198100
00000039      DJP      = CONJP*RA(J+1)/RE/PRSC/R(J)/DR(J)/DRA(J) 00198200
00000040      IF ( J.EQ.JN-1 ) DJP = DJP*2.0*DRA(J)/DR(J) 00198300
00000041      PEJP     = FJP/DJP                    00198400
00000042      A        = (1.0-0.1*ABS(PEJP))**5      00198500
00000043      A        = MAX(A,0.0)                 00198600
00000044      DDJP     = DJP*A                      00198700
00000045      ATR(I,J) = ( CP(I,J)*MAX(-FJP,0.0) + DDJP ) * VOLS(I,J) 00198800
C
00000046      IF ( J.EQ.2 ) THEN                    00198900
00000047      FJM      = 0.0                        00199000
00000048      ATL(I,J) = 0.0                        00199100
00000049      ELSE
00000050      FJM      = RJM*V(I,J-1)*RA(J)/R(J)/DR(J) 00199200
00000051      DJM      = CONJM*RA(J)/RE/PRSC/R(J)/DR(J)/DRA(J-1) 00199300
00000052      PEJM     = FJM/DJM                    00199400
00000053      A        = (1.0-0.1*ABS(PEJM))**5      00199500
00000054      A        = MAX(A,0.0)                 00199600
00000055      DDJM     = DJM*A                      00199700
00000056      ATL(I,J) = ( CP(I,J)*MAX(FJM,0.0) + DDJM ) * VOLS(I,J) 00199800
00000057      ENDIF                                00199900
C
00000058      ATO(I,J) = RHO0(I,J)*TO(I,J)*CP(I,J)/DTAU * VOLS(I,J)* CTIME 00200000
C
00000059      RES      = ABS(FIP-FIM+FJP-FJM)        00200100
00000060      RES      = MAX(RES,0.0)                  00200200
00000061      AT(I,J)  = ( CTIME*RHO(I,J)*CP(I,J)/DTAU + RES ) * VOLS(I,J) 00200300
1          + ATU(I,J) + ATD(I,J) + ATR(I,J) + ATL(I,J) 00200400
C
00000062      1000 CONTINUE                        00200500
C
00000063      1 CALL ADI ( ITER, IN, JN, AT, ATU, ATD, ATR, ATL, ATO, 00200600
1          T, ALPHAT, 1, ERRT, REST )            00200700
C
00000064      RETURN                                00200800
00000065      END                                  00200900

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C ***** SOLUTION OF MASS CONSERVATION EQUATION FOR COMPONENTS *****
C *****
00000001 C          SUBROUTINE SOLOMG ( KGAS )
C          *****
00000002 C          IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )
00000003 C          PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 )
C
00000004 C          DIMENSION A(IX,JR), B(IX,JR), AU(IX,JR), AD(IX,JR),
1          AR(IX,JR), AL(IX,JR),
2          OMEGA(NG,IX,JR), OMEGAK(IX,JR), OMTMP(NG,IX,JR),
3          ALPHA0(NG), ERRO(NG), RESD(NG,3), RESO3(3),
4          RESP(3), RESU(3), RESV(3)
00000005 C          DIMENSION X(IX), XA(IX), DX(IX), DXA(IX),
1          R(JR), RA(JR), DR(JR), DRA(JR),
2          U(IX,JR), V(IX,JR),
3          RHO(IX,JR), RHO0(IX,JR), AMU(IX,JR), DIFP(NG,NG,IX,JR),
4          OMEGA0(NG,IX,JR), DA(NG,IX,JR), DAW(NG,IX,JR),
5          XM(7), XMA(IX,JR), AMF(NG,IX),
6          VOLU(IX,JR), VOLV(IX,JR), VOLS(IX,JR)
C
00000006 C          COMMON /NODE / IN, JN,
1          /MSFR / OMEGA, OMEGA0, OMTMP,
2          /RELX / N1, A1, A2, A3, ALPHA0,
3          /ERROR / E1, E2, E3, ERRO,
4          /ITR / DTAU, ITER,
5          /RESDL / RESP, RESU, RESV, RESO
00000007 C          COMMON /GAS / NGAS,
1          /DIMX / X, XA, DX, DXA,
2          /DIMR / R, RA, DR, DRA,
3          /UVP / U, V,
4          /PRP / RHO, RHO0, AMU, DIFP,
5          /PRAM / RE, SC, GR, PR, DA, DAW,
6          /MOLNO / XM, XMA,
7          /SSC / CTIME,
8          /VOLUME / VOLU, VOLV, VOLS,
9          /MFLUX / AMF
C
C          ----- FACTOR -----
00000008 C          EZERO = 1.0E-12
00000009 C          DO 1000 I=2,IN-1
00000010 C          DO 1000 J=2,JN-1
C
C          ***** CONVECTIVE TERM *****
00000011 C          RIPH = ( RHO(I+1,J)*DX(I) + RHO(I,J)*DX(I+1) )/DXA(I)/2.0
00000012 C          RIPM = ( RHO(I-1,J)*DX(I) + RHO(I,J)*DX(I-1) )/DXA(I-1)/2.0
00000013 C          RJPH = ( RHO(I,J+1)*DR(J) + RHO(I,J)*DR(J+1) )/DRA(J)/2.0
00000014 C          RJPM = ( RHO(I,J-1)*DR(J) + RHO(I,J)*DR(J-1) )/DRA(J-1)/2.0
C
00000015 C          XIPH = ( XMA(I+1,J)*DX(I) + XMA(I,J)*DX(I+1) )/DXA(I)/2.0
00000016 C          XIPM = ( XMA(I-1,J)*DX(I) + XMA(I,J)*DX(I-1) )/DXA(I-1)/2.0
00000017 C          XJPH = ( XMA(I,J+1)*DR(J) + XMA(I,J)*DR(J+1) )/DRA(J)/2.0
00000018 C          XJPM = ( XMA(I,J-1)*DR(J) + XMA(I,J)*DR(J-1) )/DRA(J-1)/2.0
00000019 C          IF ( J.NE.JN-1 ) GO TO 1010
00000020 C          RJPH = RHO(I,JN)
00000021 C          XJPH = XMA(I,JN)

```

FORTRAN77 EX V12L10 SOLDMG DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000022 1010 CONTINUE
C
00000023 FIPH = RIPH*U(I,J)/DX(I)
00000024 FIPM = RIPM*U(I-1,J)/DX(I)
00000025 FJPH = RJPH*V(I,J)*RA(J+1)/R(J)/DR(J)
00000026 FJPM = RJPM*V(I,J-1)*RA(J)/R(J)/DR(J)
C
C ***** DIFFUSIVE TERMS *****
C
00000027 ALG11 = LOG(R(J+1))- LOG(R(J))
00000028 ALG12 = LOG(R(J+1))- LOG(RA(J+1))
00000029 ALG13 = LOG(RA(J+1))- LOG(R(J))
00000030 IF ( J.EQ.2 ) GO TO 1100
00000031 ALG21 = LOG(R(J))- LOG(R(J-1))
00000032 ALG22 = LOG(R(J)) - LOG(RA(J))
00000033 ALG23 = LOG(RA(J))- LOG(R(J-1))
00000034 1100 CONTINUE
00000035 DOMGU = 0.0
00000036 DOMGD = 0.0
00000037 DOMGR = 0.0
00000038 DOMGL = 0.0
00000039 DD 1200 L=1,NGAS
00000040 DU = 0.0
00000041 DD = 0.0
00000042 DDR = 0.0
00000043 DL = 0.0
00000044 IF ( L.EQ.KGAS ) GO TO 1300
00000045 DU = (X(I+1)-X(I))/(X(I+1)-XA(I+1))/DIFP(KGAS,L,I+1,J)
1 DD = (X(I)-X(I-1))/(X(I)-XA(I))/DIFP(KGAS,L,I,J)
1 DD = (X(I)-X(I-1))/(X(I)-XA(I))/DIFP(KGAS,L,I,J)
1 DD = (X(I)-X(I-1))/DIFP(KGAS,L,I-1,J)
IF ( J.EQ.JN-1 ) THEN
00000047 DDR = DIFP(KGAS,L,I,JN)
00000048 ELSE
00000049 DDR = ALG11 / ( ALG12/DIFP(KGAS,L,I,J+1)
00000050 + ALG13/DIFP(KGAS,L,I,J) )
1
00000051 ENDF
00000052 IF ( J.EQ.2 ) THEN
00000053 DL = ( DIFP(KGAS,L,I,J-1) + DIFP(KGAS,L,I,J) ) * 0.5
00000054 ELSE
00000055 DL = ALG21 / ( ALG22/DIFP(KGAS,L,I,J)
1 + ALG23/DIFP(KGAS,L,I,J-1) )
1
00000056 ENDF
00000057 GROMGU = OMEGA(L,I+1,J)*XMA(I+1,J)-OMEGA(L,I,J)*XMA(I,J)
00000058 GROMGD = OMEGA(L,I,J)*XMA(I,J)-OMEGA(L,I-1,J)*XMA(I-1,J)
00000059 GROMGR = OMEGA(L,I,J+1)*XMA(I,J+1)-OMEGA(L,I,J)*XMA(I,J)
00000060 GROMGL = OMEGA(L,I,J)*XMA(I,J)-OMEGA(L,I,J-1)*XMA(I,J-1)
00000061 1300 CONTINUE
00000062 DOMGU = DOMGU + DU *GROMGU/DXA(I)
00000063 DOMGD = DOMGD + DD *GROMGD/DXA(I-1)
00000064 DOMGR = DOMGR + DDR *GROMGR/DRA(J)
00000065 DOMGL = DOMGL + DL *GROMGL/DRA(J-1)
00000066 1200 CONTINUE
C
C ***** MODIFIED DIFFUSIVE TERMS *****
C
00000067 B3 = 0.0
00000068 DIFU = 0.0
00000069 IF ( DOMGU.EQ.0.0 ) GO TO 1400
00000070 GRDU = OMEGA(KGAS,I+1,J)-OMEGA(KGAS,I,J)

```

FORTRAN77 EX V12L10 SOLOMG DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000071      DDIFU = RIPH/XIPH/XIPH*DOMGU*XM(KGAS)/RE/SC/DX(I)      00213900
00000072      IF ( ABS(GRDU).GT.EZERO )      GO TO 1405      00214000
00000073      IF ( OMEGA(KGAS,I,J).LE.EZERO ) GO TO 1400      00214100
00000074      B3 = B3 + DDIFU      00214200
00000075      GO TO 1400      00214300
00000076 1405 PEU = (MAX(FIPH,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J)      00214400
1      +MAX(-FIPH,0.0)*OMEGA(KGAS,I+1,J))/DDIFU      00214500
00000077      AA = 0.0      00214600
00000078      IF ( ABS(PEU).LE.10.0 )      AA = (1.0-0.1*ABS(PEU))*5      00214700
00000079      DIFU = ABS(DDIFU*AA/GRDU)      00214800
00000080 1400 CONTINUE      00214900
C      00215000
00000081      DIFD = 0.0      00215100
00000082      IF ( DOMGD.EQ.0.0 )      GO TO 1410      00215200
00000083      GRDD = OMEGA(KGAS,I,J)-OMEGA(KGAS,I-1,J)      00215300
00000084      DDIFD = RIPM/XIPM/XIPM*DOMGD*XM(KGAS)/RE/SC/DX(I)      00215400
00000085      IF ( I.EQ.2 )      DDIFD = DDIFD*2.0*DX(I-1)/DX(I)      00215500
00000086      IF ( ABS(GRDD).GT.EZERO )      GO TO 1415      00215600
00000087      IF ( OMEGA(KGAS,I,J).LE.EZERO ) GO TO 1410      00215700
00000088      B3 = B3 + DDIFD      00215800
00000089      GO TO 1410      00215900
00000090 1415 PED = (MAX(FIPM,0.0)*OMEGA(KGAS,I-1,J)      00216000
1      +MAX(-FIPM,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J))/DDIFD      00216100
00000091      AA = 0.0      00216200
00000092      IF ( ABS(PED).LE.10.0 )      AA = (1.0-0.1*ABS(PED))*5      00216300
00000093      DIFD = ABS(DDIFD*AA/GRDD)      00216400
00000094 1410 CONTINUE      00216500
C      00216600
00000095      DIFR = 0.0      00216700
00000096      IF ( DOMGR.EQ.0.0 )      GO TO 1420      00216800
00000097      GRDR = OMEGA(KGAS,I,J+1)-OMEGA(KGAS,I,J)      00216900
00000098      DDIFR = RA(J+1)*RJPH/XJPH/XJPH*DOMGR*XM(KGAS)/RE/SC/R(J)/DR(J)      00217000
00000099      IF ( J.EQ.JN-1 )      DDIFR = DDIFR*2.0*DRA(J)/DR(J)      00217100
00000100      IF ( ABS(GRDR).GT.EZERO )      GO TO 1425      00217200
00000101      IF ( OMEGA(KGAS,I,J).LE.EZERO ) GO TO 1420      00217300
00000102      B3 = B3 + DDIFR      00217400
00000103      GO TO 1420      00217500
00000104 1425 PER = (MAX(FJPH,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J)      00217600
1      +MAX(-FJPH,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J+1))/DDIFR      00217700
00000105      AA = 0.0      00217800
00000106      IF ( ABS(PER).LE.10.0 )      AA = (1.0-0.1*ABS(PER))*5      00217900
00000107      DIFR = ABS(DDIFR*AA/GRDR)      00218000
00000108 1420 CONTINUE      00218100
C      00218200
00000109      DIFL = 0.0      00218300
00000110      IF ( J.EQ.2 )      GO TO 1430      00218400
00000111      IF ( DOMGL.EQ.0.0 )      GO TO 1430      00218500
00000112      GRDL = OMEGA(KGAS,I,J)-OMEGA(KGAS,I,J-1)      00218600
00000113      DDIFL = RA(J)*RJPM/XJPM/XJPM*DOMGL*XM(KGAS)/RE/SC/R(J)/DR(J)      00218700
00000114      IF ( ABS(GRDL).GT.EZERO )      GO TO 1435      00218800
00000115      IF ( OMEGA(KGAS,I,J).LE.EZERO ) GO TO 1430      00218900
00000116      B3 = B3 + DDIFL      00219000
00000117      GO TO 1430      00219100
00000118 1435 PEL = (MAX(FJPM,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J-1)      00219200
1      +MAX(-FJPM,0.0)*OMEGA(KGAS,I,J))/DDIFL      00219300
00000119      AA = 0.0      00219400
00000120      IF ( ABS(PEL).LE.10.0 )      AA = (1.0-0.1*ABS(PEL))*5      00219500
00000121      DIFL = ABS(DDIFL*AA/GRDL)      00219600
00000122 1430 CONTINUE      00219700
C      00219800

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  SOLOMG      DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000123      AU(I,J) = ( MAX(-FIPH,0.0) + DIFU ) * VOLS(I,J)      00219900
00000124      AD(I,J) = ( MAX( FIPM,0.0) + DIFD ) * VOLS(I,J)      00220000
00000125      AR(I,J) = ( MAX(-FJPH,0.0) + DIFR ) * VOLS(I,J)      00220100
00000126      AL(I,J) = ( MAX( FJPM,0.0) + DIFL ) * VOLS(I,J)      00220200
00000127      RSMASS = FIPH - FIPM + FJPH - FJPM                    00220300
00000128      RSMASS = MAX( RSMASS, 0.0 )                          00220400
00000129      A(I,J) = ( CTIME * RHO(I,J)/DTAU + RSMASS ) * VOLS(I,J) 00220500
1              + AU(I,J) + AD(I,J) + AR(I,J) + AL(I,J)            00220600
00000130      A(I,J) = A(I,J) + DAW(KGAS,I,J) * VOLS(I,J)          00220700
00000131      B1 = RHO(I,J)*OMEGAO(KGAS,I,J)/DTAU * CTIME        00220800
00000132      B2 = DA(KGAS,I,J)                                    00220900
00000133      SHUUI = OMEGA(KGAS,I+1,J) + OMEGA(KGAS,I-1,J)      00221000
1              + OMEGA(KGAS,I,J+1) + OMEGA(KGAS,I,J-1)          00221100
00000134      IF ( SHUUI.LE.EZERO ) B3 = 0.0                      00221200
00000135      B(I,J) = ( B1 + B2 + B3 ) * VOLS(I,J)                00221300
C
C      -----  LINEARIZATION OF GENERATION TERM ; B=BC+BP*OMEGA  ----- 00221400
C
C      OBJ = OMEGA(KGAS,I,J)*0.5                                  00221500
C      IF ( B(I,J).GE.0.0 ) OBJ = ( OMEGA(KGAS,I,J) + 1.0 ) * 0.5 00221600
C      BP = -B(I,J) / ( OBJ - OMEGA(KGAS,I,J) - 1.0E-5 )          00221700
C      B(I,J) = B(I,J)*OBJ / ( OBJ - OMEGA(KGAS,I,J) - 1.0E-5 )   00221800
C      A(I,J) = A(I,J) - BP                                        00221900
C
00000136      1000 CONTINUE                                       00222000
C
C      -----  SOLUTION BY ADI METHOD  -----                      00222100
C
00000137      DO 2200 I=1,IN                                       00222200
00000138      DO 2200 J=1,JN                                       00222300
00000139      OMEGAK(I,J) = OMEGA(KGAS,I,J)                        00222400
00000140      2200 CONTINUE                                       00222500
C
00000141      CALL ADI ( ITER, IN, JN, A, AU, AD, AR, AL, B,      00222600
1              OMEGAK, ALPHAO(KGAS), 1, ERRO(KGAS), RESO3 )      00222700
00000142      MI = RESO3(2)                                         00222800
00000143      MJ = RESO3(3)                                         00222900
00000144      RESO(KGAS,1) = RESO3(1)/VOLS(MI,MJ)                00223000
00000145      RESO(KGAS,2) = RESO3(2)                              00223100
00000146      RESO(KGAS,3) = RESO3(3)                              00223200
00000147      DD 2400 I=1,IN                                       00223300
00000148      DO 2400 J=1,JN-1                                       00223400
00000149      IF ( OMEGAK(I,J).LT.1.0E-24 ) OMEGAK(I,J) = 0.0   00223500
00000150      IF ( OMEGAK(I,J).GT.1.0 ) OMEGAK(I,J) = 1.0       00223600
00000151      OMGTMP(KGAS,I,J) = OMEGAK(I,J)                      00223700
00000152      2400 CONTINUE                                       00223800
C
C
00000153      RETURN                                             00223900
00000154      END                                               00224000

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****00224900
C *****00225000
C ***** ALTERNATING DIRECTION IMPLICIT METHOD *****00225100
C ***** BY LINE-BY-LINE ITERATION *****00225200
C *****00225300
00000001 SUBROUTINE ADI 00225400
1 ( ITER, IN, JN, AIJ, AIP, AIM, AJP, AJM, BIJ, X, 00225500
2 ALPHA, NSET, ERRMAX, RESMAX ) 00225600
C ***** < IN, JN ; INCLUDING VALUES AT BOUNDARY > *****00225700
C *****00225800
C *****00225900
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, D-Z ) 00226000
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 ) 00226100
C 00226200
00000004 DIMENSION AIJ(IX,JR), AIP(IX,JR), AIM(IX,JR), AJP(IX,JR), 00226300
1 AJM(IX,JR), BIJ(IX,JR), X(IX,JR), XOLD(IX,JR), 00226400
2 A(IX), B(IX), C(IX), D(IX), XX(IX), RESMAX(3) 00226500
C 00226600
C ----- TURNOUT OF OLD VALUE ----- 00226700
C 00226800
C 00226900
00000005 DO 100 I=1,IN 00227000
00000006 DO 100 J=1,JN 00227100
00000007 XOLD(I,J) = X(I,J) 00227200
00000008 100 CONTINUE 00227300
C 00227400
C ----- CONTROL PARAMETER FOR SWEEP DIRECTION ----- 00227500
C 00227600
00000009 IDIR = MOD( ITER, 2 ) 00227700
00000010 JDIR = (ITER+IDIR)*0.5 00227800
00000011 JDIR = MOD ( JDIR, 2 ) 00227900
C 00228000
C ----- ONE SET OF SWEEP ----- 00228100
C 00228200
00000012 DO 1000 ISET = 1, NSET 00228300
C 00228400
00000013 IF ( IDIR.EQ.0 ) GO TO 1100 00228500
C 00228600
C ----- R DIRECTION ----- 00228700
C 00228800
00000014 1200 CONTINUE 00228900
C 00229000
00000015 DO 1300 I=2,IN-1 00229100
00000016 II = I 00229200
00000017 IF ( JDIR.EQ.0 ) II = IN-1-I+2 00229300
00000018 DO 1400 J=2,JN-1 00229400
00000019 A(J-1) = AIJ(II,J)/ALPHA 00229500
00000020 B(J-1) = AJP(II,J) 00229600
00000021 C(J-1) = AJM(II,J) 00229700
00000022 D(J-1) = AIP(II,J)*X(II+1,J) + AIM(II,J)*X(II-1,J) 00229800
1 + BIJ(II,J) + AIJ(II,J)*(1.0/ALPHA-1.0)*X(II,J) 00229900
00000023 1400 CONTINUE 00230000
00000024 D(1) = D(1) + AJM(II,2)*X(II,1) 00230100
00000025 D(JN-2) = D(JN-2) + AJP(II,JN-1)*X(II,JN) 00230200
C 00230300
00000026 CALL TDMA ( JN-2, A, B, C, D, XX ) 00230400
C 00230500
00000027 DO 1500 J=2,JN-1 00230600
00000028 X(II,J) = XX(J-1) 00230700
00000029 1500 CONTINUE 00230800
C

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  ADI          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000030 1300  CONTINUE                                00230900
C                                                00231000
00000031      IF ( IDIR.EQ.0 )                        GO TO 1000      00231100
C                                                00231200
C ----- X DIRECTION ----- 00231300
C                                                00231400
00000032 1100 CONTINUE                                00231500
C                                                00231600
00000033      DO 2000 J=2,JN-1                        00231700
00000034          JJ = J                               00231800
00000035          IF ( JDIR.EQ.0 )      JJ = JN-1-J+2  00231900
00000036          DO 2100 I=2,IN-1                    00232000
00000037              A(I-1) = AIJ(I,JJ)/ALPHA        00232100
00000038              B(I-1) = AIP(I,JJ)              00232200
00000039              C(I-1) = AIM(I,JJ)              00232300
00000040              D(I-1) = AJP(I,JJ)*X(I,JJ+1) + AJM(I,JJ)*X(I,JJ-1)
                  + BIJ(I,JJ) + AIJ(I,JJ)*(1.0/ALPHA-1.0)*X(I,JJ)  00232400
1
00000041 2100  CONTINUE                                00232500
00000042          D(1) = D(1) + AIM(2,JJ)*X(1,JJ)    00232600
00000043          D(IN-2) = D(IN-2) + AIP(IN-1,JJ)*X(IN,JJ)  00232700
C                                                00232800
00000044      CALL TDMA ( IN-2, A, B, C, D, XX )      00232900
C                                                00233000
C                                                00233100
00000045      DO 2200 I=2,IN-1                        00233200
00000046          X(I,JJ) = XX(I-1)                   00233300
00000047 2200  CONTINUE                                00233400
C                                                00233500
00000048 2000  CONTINUE                                00233600
00000049      IF ( IDIR.EQ.0 )                        GO TO 1200      00233700
C                                                00233800
00000050 1000 CONTINUE                                00233900
C                                                00234000
C ----- ERROR AND RESIDUAL DIFFERENCE ----- 00234100
C                                                00234200
00000051      ERRMAX = 0.0                              00234300
00000052      RESMAX(1) = 0.0                          00234400
00000053      DO 3000 I=2,IN-1                        00234500
00000054          DO 3000 J=2,JN-1                      00234600
00000055              ERR = X(I,J)                     00234700
00000056              IF ( ABS(XOLD(I,J)).GE.1.0E-8 ) ERR = (X(I,J)-XOLD(I,J))
                  / XOLD(I,J)                          00234800
1
00000057          ERR = ABS(ERR)                        00234900
00000058          ERRMAX = MAX(ERR,ERRMAX)              00235000
C                                                00235100
00000059      RES = AIJ(I,J)*X(I,J) - ( AIP(I,J)*X(I+1,J) + AIM(I,J)*
1              X(I-1,J) + AJP(I,J)*X(I,J+1) + AJM(I,J)*X(I,J-1)
2              + BIJ(I,J) )                          00235200
00000060      RES = ABS(RES)                              00235300
00000061      IF ( RES.LT.RESMAX(1) )      GO TO 3100  00235400
00000062      RESMAX(1) = RES                            00235500
00000063      RESMAX(2) = I                             00235600
00000064      RESMAX(3) = J                             00235700
00000065 3100  CONTINUE                                00235800
00000066 3000 CONTINUE                                00235900
C                                                00236000
C                                                00236100
00000067      RETURN                                  00236200
00000068      END                                    00236300
                                                00236400
                                                00236500
                                                00236600

```

FORTRAN77 EX V12L10

DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00236700
C ***** TRI-DIAGONAL MATRIX ALGORITHM ***** 00236800
C ***** 00236900
C ***** SUBROUTINE TDMA ( N, A, B, C, D, X ) ***** 00237000
00000001 ***** 00237100
C ***** 00237200
C ***** 00237300
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00237400
00000003 PARAMETER ( IX=101 ) 00237500
C ***** 00237600
00000004 DIMENSION A(IX), B(IX), C(IX), D(IX), P(IX), Q(IX), X(IX) 00237700
C ***** 00237800
00000005 P(1) = 0.0 00237900
00000006 Q(1) = 0.0 00238000
00000007 IF ( A(1).EQ.0.0 ) GO TO 10 00238100
00000008 P(1) = B(1)/A(1) 00238200
00000009 Q(1) = D(1)/A(1) 00238300
00000010 10 B(N) = 0.0 00238400
C ***** 00238500
00000011 DO 100 I=2,N 00238600
00000012 DET = A(I) - C(I)*P(I-1) 00238700
00000013 IF ( DET.EQ.0.0 ) GO TO 999 00238800
00000014 P(I) = B(I)/DET 00238900
00000015 Q(I) = ( D(I)+C(I)*Q(I-1) )/DET 00239000
00000016 100 CONTINUE 00239100
C ***** 00239200
00000017 X(N) = Q(N) 00239300
00000018 DO 200 I=N-1,1,-1 00239400
00000019 X(I) = P(I)*X(I+1) + Q(I) 00239500
00000020 200 CONTINUE 00239600
00000021 GO TO 900 00239700
C ***** 00239800
00000022 999 CONTINUE 00239900
00000023 WRITE(6,601) N, I, A(I), B(I), C(I), D(I), P(I-1), DET 00240000
00000024 601 FORMAT(1H0,5X,'DET=', AT TDMA !!!',/, 00240100
1 6X,'N=',I4,3X,'I=',I4,3X,'A=',1PE10.3,3X, 00240200
2 'B=',E10.3,3X,'C=',E10.3,3X,'D=',E10.3,3X, 00240300
3 'P=',E10.3,3X,'DET=',E12.5 ) 00240400
C ***** 00240500
00000025 900 CONTINUE 00240600
C ***** 00240700
C ***** 00240800
00000026 RETURN 00240900
00000027 END 00241000

```



FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00241100
C ***** JUDGEMENT OF CONVERGENCE ***** 00241200
C ***** 00241300
C ***** 00241400
00000001 SUBROUTINE CONV ( I ) 00241500
C ***** 00241600
C ***** 00241700
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z ) 00241800
00000003 PARAMETER ( NG=5 ) 00241900
C 00242000
00000004 DIMENSION OJ(NG),RESP(3),RESU(3),RESV(3),RESO(NG,3) 00242100
C 00242200
00000005 COMMON /ERROR/ ERRP, ERRO, ERRO(NG), 00242300
1 ALWP, ALWU, ALWV, ALWO(NG), 00242400
2 /GAS / NGAS, 00242500
3 /RESDL/ RESP,RESU,RESV,RESO 00242600
C 00242700
00000006 PJ=RESP(1)-ALWP 00242800
00000007 UJ=RESU(1)-ALWU 00242900
00000008 VJ=RESV(1)-ALWV 00243000
00000009 I = 1 00243100
00000010 IF ( PJ.GT.0.0 ) I = 0 00243200
00000011 IF ( UJ.GT.0.0 ) I = 0 00243300
00000012 IF ( VJ.GT.0.0 ) I = 0 00243400
C 00243500
00000013 IF ( NGAS.EQ.1 ) GO TO 199 00243600
00000014 DO 100 J=2,NGAS 00243700
C 00243800
00000015 OJ(J) = ERRO(J)-ALWO(J) 00243900
00000016 OJ(J) = RESO(J,1)-ALWO(J) 00244000
00000017 IF ( OJ(J).GT.0.0 ) I = 0 00244100
00000017 100 CONTINUE 00244200
00000018 199 CONTINUE 00244300
C 00244400
C 00244500
00000019 RETURN 00244600
00000020 END

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C ***** 00244700
C ***** PRINT ***** 00244800
C ***** 00244900
00000001 SUBROUTINE PRINT ***** 00245000
C ***** 00245100
C ***** 00245200
C ***** 00245300
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-B, D-H, O-Z ) 00245400
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5 ) 00245500
C ***** 00245600
00000004 DIMENSION U(IX,JR), V(IX,JR), P(IX,JR), OMEGA(NG,IX,JR), 00245700
1 FAI(IX,JR), ERD(NG), RHO(IX,JR), 00245800
2 X(IX), XA(IX), R(JR), RA(JR), UCENT(IX), 00245900
3 UO(IX,JR), VO(IX,JR), PP(IX,JR), T(IX,JR), 00246000
4 RESP(3), RESU(3), RESV(3), RESO(NG,3), REST(3), 00246100
5 ARES(3), XM(7), XMA(IX,JR), ICHM(2), IHOT(2), 00246200
6 DA(NG,IX,JR), DAW(NG,IX,JR), DAM(IX,JR) 00246300
C ***** 00246400
00000005 COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, 00246500
1 /GAS / NGAS, 00246600
2 /ITR / DTAU, ITER, IEND, NTIME, NEND, 00246700
3 /DIMX / X, XA, 00246800
4 /DIMR / R, RA, 00246900
5 /UVP / U, V, P, UO, VO, 00247000
6 /MSFRC / OMEGA, 00247100
7 /JIKAN / TIME, 00247200
8 /ERROR / ERRP, ERRU, ERRV, ERRO, 00247300
9 /UCNTR / UCENT 00247400
00000006 COMMON /PRP / RHO, 00247500
1 /RESDL / RESP, RESU, RESV, RESO, 00247600
2 /CRPP / PP, 00247700
3 /TCONST/ ALPHAT, ERRT, REST, 00247800
4 /TEMP / T, 00247900
5 /MOLNO / XM, XMA, 00248000
6 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW, 00248100
7 /PRAM / RE, SC, GR, PR, DA, DAW, 00248200
8 /REACT / NCR 00248300
C ***** 00248400
00000007 CHARACTER*4 CHAR 00248500
C ***** 00248600
C ----- PRINT OF U ----- 00248700
C ***** 00248800
00000008 IBP = IN+1 00248900
00000009 JBP = JN+1 00249000
00000010 CALL PRTMAT ( IBP-2, JBP-1, 1, XA, R, U, ERRU, RESU, 00249100
1 NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' U ' ) 00249200
C ***** 00249300
C ----- PRINT OF V ----- 00249400
C ***** 00249500
00000011 CALL PRTMAT ( IBP-1, JBP-2, 2, X, RA, V, ERRV, RESV, 00249600
1 NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' V ' ) 00249700
C ***** 00249800
C CALL PRTMAT ( IBP-1, JBP-2, 2, X, RA, VO, ERRV, RESV, 00249900
1 NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' VO ' ) 00250000
C ***** 00250100
C ----- PRINT OF P AND PP ----- 00250200
C ***** 00250300
00000012 CALL PRTMAT ( IBP-1, JBP-1, 0, X, R, P, ERRP, RESP, 00250400
1 NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' P ' ) 00250500
00000013 CALL PRTMAT ( IBP-1, JBP-1, 0, X, R, PP, ERRP, RESP, 00250600

```

```

FORTRAN77 EX   V12L10   PRINT           DATE 92-08-10   TIME 14:16:19

1           NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' PP ' )           00250700
C
C   ----- PRINT OF T -----                               00250800
C   -----                               00250900
00000014   IF ( TW.NE.TIN )                                   00251000
1           CALL PRMAT ( IBP-1, JBP-1, O, X, R, T, ERRT, REST, 00251100
2           NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, ' T ' )           00251200
C   ----- PRINT OF MASS FRACTION -----                   00251300
C   -----                               00251400
00000015   IF ( NGAS.EQ.1 ) RETURN                          00251500
00000016   DO 1000 N=1,NGAS                                  00251600
00000017       IF ( N.EQ.1 ) CHAR = ' HE '                   00251700
00000018       IF ( N.EQ.2 ) CHAR = ' O2 '                   00251800
00000019       IF ( N.EQ.3 ) CHAR = ' CO '                   00251900
00000020       IF ( N.EQ.4 ) CHAR = ' CO2 '                  00252000
00000021       IF ( N.EQ.5 ) CHAR = ' N2 '                   00252100
00000022       DO 1100 I=1, IBP-1                             00252200
00000023       DO 1100 J=1, JBP-1                             00252300
00000024           FAI(I,J) = OMEGA(N,I,J)                    00252400
00000025   1100 CONTINUE                                     00252500
00000026       DO 1200 I=1,3                                  00252600
00000027           ARES(I) = RESO(N,I)                         00252700
00000028   1200 CONTINUE                                     00252800
C   CALL PRMAT ( IBP-1, JBP-1, O, X, R, FAI, ERRO(N), ARES, 00252900
1           NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, CHAR )           00253000
00000029   1000 CONTINUE                                     00253100
C   ----- PRINT OF DENSITY, MOLAR NUMBER AND DAMKOHLER NUMBER - 00253200
C   -----                               00253300
C   -----                               00253400
00000031       DO 2000 I=1,3                                  00253500
00000032           ARES(I) = 0.0                               00253600
00000033   2000 CONTINUE                                     00253700
00000034       CALL PRMAT ( IN, JN, O, X, R, RHO, O.O, ARES, NTIME, 00253800
1           NEND, TIME, ITER, IEND, ' DENS' )                 00253900
00000035       CALL PRMAT ( IN, JN, O, X, R, XMA, O.O, ARES, NTIME, 00254000
1           NEND, TIME, ITER, IEND, ' MOLN' )                 00254100
C   IF ( NCR.EQ.0 ) RETURN                                   00254200
00000036       DO 2100 N=2,4                                  00254300
00000037           DO 2200 I=1,IN                              00254400
00000038               DO 2200 J=1,JN                          00254500
00000039                   DAM(I,J) = DA(N,I,J) + DAW(N,I,J)*OMEGA(N,I,J) 00254600
00000040   2200 CONTINUE                                     00254700
00000041       IF ( N.EQ.2 ) CHAR = ' DAO2 '                  00254800
00000042       IF ( N.EQ.3 ) CHAR = ' DACO '                  00254900
00000043       IF ( N.EQ.4 ) CHAR = ' DAC2 '                  00255000
00000044       CALL PRMAT ( IN, JN, O, X, R, DAM, O.O, ARES, NTIME, 00255100
1           NEND, TIME, ITER, IEND, CHAR )                     00255200
00000045   2100 CONTINUE                                     00255300
C   RETURN                                                  00255400
C   END                                                      00255500
00000047   RETURN                                           00255600
00000048   END                                               00255700

```

FORTRAN77 EX V12L10

DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****
C ***** PRINT OF MATRIX *****
C *****
00000001 SUBROUTINE PRMAT ( IE, JE, ICN, X, R, A, ERR, RES,
1          NTIME, NEND, TIME, ITER, IEND, CHAR )
C *****
00000002 IMPLICIT REAL * 8 ( A-B, D-H, O-Z )
00000003 PARAMETER ( IX=101, JR=51 )
C
00000004 DIMENSION X(IX), R(JR), A(IX,JR), RES(3)
00000005 CHARACTER*4 CHAR
C
00000006 ILEND = (IE-1)/10+1
00000007 JW = 1
00000008 IF ( JE.LE.30 ) JW = 2
00000009 IF ( JE.LE.10 ) JW = 3
C
00000010 DO 1000 IL=1,ILEND
00000011 JWW = MOD(IL,JW)
00000012 IST = (IL-1)*10+1
00000013 IED = IL*10
00000014 IF ( IED.GE.IE ) IED = IE
00000015 IF ( JW.EQ.1.OR.JWW.EQ.1 ) THEN
00000016 WRITE(6,6000) CHAR, IL, ILEND, NTIME, NEND, TIME, ITER,
1          IEND, ERR, (RES(I),I=1,3)
00000017 ELSE
00000018 WRITE(6,6100) CHAR, IL, ILEND, NTIME, NEND, TIME, ITER,
2          IEND, ERR, (RES(I),I=1,3)
00000019 ENDDIF
00000020 IP = 0
00000021 IF ( ICN.EQ.1 ) IP = 1
00000022 WRITE(6,6200) (I, X(I+IP), I=IST,IED )
00000023 WRITE(6,6400)
C
00000024 DO 2000 J=1,JE
00000025 JP = 0
00000026 JSKIP = MOD(J,10)
00000027 IF ( ICN.EQ.2 ) JP = 1
00000028 WRITE(6,6300) J, R(J+JP), ( A(I,J), I=IST,IED )
00000029 IF (JSKIP.EQ.0 ) WRITE(6,6400)
00000030 2000 CONTINUE
00000031 1000 CONTINUE
C
00000032 6000 FORMAT(1H1,/,/, ' ***** < ',A4,' >',2X,'PART : ',I1,/,',I2,
1          2X,'NTIME=',I4,/,',I5,1X,'TIME=',1PE12.5,2X,'ITER=',OPI4,
2          '/',I5,2X,'ERR=',1PE11.4,2X,
3          'RES,I,J=',E11.4,2(OPF4.0), /)
00000033 6100 FORMAT(1H0,/,/, ' ***** < ',A4,' >',2X,'PART : ',I1,/,',I2,
1          2X,'NTIME=',I4,/,',I5,1X,'TIME=',1PE12.5,2X,'ITER=',OPI4,
2          '/',I5,2X,'ERR=',1PE11.4,2X,
3          'RES,I,J=',E11.4,2(OPF4.0), /)
00000034 6200 FORMAT(1H0,14X,10(I4,':',F7.3) )
00000035 6300 FORMAT(1H ,I4,':',F7.4,2X,10(2X,1PE10.3) )
00000036 6400 FORMAT(1H )
C
C
00000037 RETURN
00000038 END

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C *****
C ***** BULK VALUES ; UB, RHOB, GB, OMEGAB, AMUB, REB, *****
C ***** SHB, FRIC *****
00000001 SUBROUTINE BULK
C *****
C
C IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )
00000002 PARAMETER ( IX=101, JR=51, NG=5, PAI=3.141592654 )
00000003
C
C DIMENSION RINTG(JR), YINTG(JR), UB(IX), RHOB(IX), GB(IX),
1 OMEGAB(NG,IX), AMUB(IX), REB(IX), SHB(NG,IX),
2 FRIC(IX), DXA(IX), FGRT(IX), FTAU(IX),
3 X(IX), XA(IX), DX(IX), R(JR), U(IX,JR), V(IX,JR),
4 P(IX,JR), OMEGA(NG,IX,JR), AMF(NG,IX), RHO(IX,JR),
5 RHOO(IX,JR), AMU(IX,JR), D21IN(NG),
6 XREPR(IX), XRE(IX), PRB(IX), ANUB(IX), CONB(IX),
7 TB(IX), T(IX,JR), CON(IX,JR), DIFP(NG,NG,IX,JR),
8 RA(JR), DR(JR), DRA(JR), DM(7,7), GNM(7), OMG(7),
9 R4(4),RU4(4), VWALL(IX),UBN(IX),GBN(IX),DGBN(IX)
00000005 DIMENSION ERGBN(IX), REW(IX), XM(7), XMA(IX,JR), SHBT(NG,IX),
1 SCB(NG,IX), D2(NG), XRESC(NG,IX), ICHM(2), IHOT(2),
2 IVWL(2), UCENT(IX), ALPHAO(NG), ERRO(NG),
3 RESP(3), RESU(3), RESV(3), REST(3), RESO(NG,3),
4 ANUT(IX)
C
C COMMON /NODE / IN, JN, ICHM, IHOT, IVWL,
1 /DIMX / X, XA, DX, DXA,
2 /DIMR / R, RA, DR, DRA,
3 /UVP / U, V, P,
4 /PRP / RHO, RHOO, AMU, DIFP, CON,
5 /DTUBE / DIAM,
6 /NOND / VISIN, CNDIN, CPIN, D21IN, UIN,
7 /DENS / RHOIN,
8 /MSFRC / OMEGA,
9 /PRAM / RE, SC, GR, PR
00000007 COMMON /MFLUX / AMF, VWALL,
1 /TEMP / T,
2 /REF / TIN, PIN, TREF, PREF, TW,
3 /GAS / NGAS,
4 /MOLNO / XM, XMA,
5 /DIF2 / D2,
6 /BND / MCUIN,
7 /EQPRX / CX1,
8 /REACT / NCR, NCR1, NCR2, NCR3,
9 /ITR / DTAU, ITER
00000008 COMMON /TCONST/ ALPHAT, ERRT, REST,
1 /RELX / NSETP, ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAO,
2 /ERROR / ERRP, ERRU, ERRV, ERRO,
3 /RESDL / RESP, RESU, RESV, RESO
C
C ----- PRINT OF CONDITIONS -----
C
00000009 WRITE(6,7000) IN, JN, XA(IN), XA(ICHM(1)), XA(ICHM(2)+1),
1 XA(IHOT(1)), XA(IHOT(2)+1), XA(IVWL(1)), XA(IVWL(2)+1),
2 RE, RE*VWALL(IVWL(1)+1), PR, SC, TIN, T(1,2), TW,
3 T(IHOT(1)+1,JN), ITER, NCR, NCR1, NCR2, NCR3,
4 ALPHAP, ALPHAU, ALPHAV, ALPHAT, (ALPHAO(I),I=2,4),
5 ERRP, ERRU, ERRV, ERRT, (ERRO(I),I=2,4),
6 RESP(1), RESU(1), RESV(1), REST(1), (RESO(I,1),I=2,4)

```

FORTRAN77 EX V12L10 BULK DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000010 WRITE(6,7010) ( XA(I),I=1,IN ) 00268200
00000011 WRITE(6,7020) ( RA(I),I=1,JN ) 00268300
00000012 WRITE(6,7030) 00268400
00000013 7000 FORMAT(1H1, 120('*'),//5X,( 'I3,' X 'I2,' ), 0 - ',F6.1, 00268500
1 3X,'REACTION ;',F6.1,' - ',F6.1,'', 00268600
2 3X,'HEATING ;',F6.1,' - ',F6.1,'', 00268700
3 3X,'INJECTION ;',F6.1,' - ',F6.1,'',//5X, 00268800
4 'RE=',F8.2,3X,'RE-W=',F8.3,3X,'PR=',F8.5,3X, 00268900
5 'SC=',F8.5,3X,'T-IN=',F6.1,' (C) (',F8.5,')', 00269000
6 3X,'T-W=',F6.1,' (C) (',F8.5,')', 00269100
7 //5X,'ITER=',I5,3X,'CO-BURN/CO/CO2/C-CO2 ; ',I1,' / ', 00269200
8 I1,' / ',I1,' / ',I1,'// 00269300
9 5X,'ALPHA-P/U/V/T/D ; ',7(F5.2,' '),//5X,'ERR ; ', 00269400
1 7(1PE9.2,' '),//5X,'RES ; ',7(E9.2,' ') ) 00269500
00000014 7010 FORMAT(1H ' XA ; ',10(F10.5,2X) ) 00269600
00000015 7020 FORMAT(1H ' RA ; ',10(F10.6,2X) ) 00269700
00000016 7030 FORMAT(1H ,120('*'),//1X ) 00269800
00269900
C 00000017 UB(1) = 1.0 00270000
00000018 GB(1) = 0.25*PAI*DIAM*DIAM*RHOIN*UIN 00270100
00270200
C 00000019 DO 10 I=1,IN-1 00270300
00000020 U(I,1) = U(I,2) 00270400
00000021 UCENT(I) = ( R(1)*R(1)*R(2)*U(I,3) + R(2)*R(2)*R(3)*U(I,1) 00270500
1 + R(3)*R(3)*R(1)*U(I,2) - R(1)*R(2)*R(2)*U(I,3) 00270600
2 - R(2)*R(3)*R(3)*U(I,1) - R(3)*R(1)*R(1)*U(I,2) ) 00270700
3 / ( R(1)*R(1)*R(2) + R(2)*R(2)*R(3) 00270800
4 + R(3)*R(3)*R(1) - R(1)*R(2)*R(2) 00270900
5 - R(2)*R(3)*R(3) - R(3)*R(1)*R(1) ) 00271000
00000022 10 CONTINUE 00271100
00271200
C 00000023 DO 20 N=1,NGAS 00271300
00000024 20 SCB(N,1) = VISIN/RHOIN/D21IN(N) 00271400
00271500
C 00000025 DO 100 I=2,IN 00271600
00271700
C ----- BULK U-VELOCITY ; UB(I) AT NODE OF SCALAR MESH ----- 00271800
C 00271900
C 00000026 RINTG(1) = 0.0 00272000
00000027 YINTG(1) = 0.0 00272100
00000028 RINTG(JN) = 0.5 00272200
00000029 YINTG(JN) = 0.0 00272300
00000030 DO 1000 J=2,JN-1 00272400
00000031 RINTG(J) = R(J) 00272500
00000032 UM = U(I,J) 00272600
00000033 YINTG(J) = R(J)*UM 00272700
00000034 1000 CONTINUE 00272800
00000035 DO 1010 JJ=1,4 00272900
00000036 R4(JJ) = RINTG(JJ) 00273000
00000037 1010 RU4(JJ) = YINTG(JJ) 00273100
00000038 CALL TRICO ( R4, RU4, 1, UB(I) ) 00273200
00000039 DO 1020 J=2,JN-2 00273300
00000040 DD 1030 JJ=1,4 00273400
00000041 R4(JJ) = RINTG(J+JJ-2) 00273500
00000042 1030 RU4(JJ) = YINTG(J+JJ-2) 00273600
00000043 CALL TRICO ( R4, RU4, 2, SEKI ) 00273700
00000044 1020 UB(I) = UB(I) + SEKI 00273800
00000045 CALL TRICO ( R4, RU4, 3, SEKI ) 00273900
00000046 UB(I) = UB(I) + SEKI 00274000
00000047 UB(I) = 8.0*UB(I) 00274100

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  BULK          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000048      UBN(I)  = (UB(I)+UB(I-1))*0.5          00274200
00000049      UBR      = 0.0                        00274300
00000050      IF ( ABS(UB(I)).GT.1.0E-24 )  UBR = 1.0/UB(I)  00274400
C                                                     00274500
C ----- BULK TEMPERATURE ; TB(I) -----          00274600
C                                                     00274700
00000051      DO 1100  J=2,JN-1                    00274800
00000052          RINTG(J) = R(J)                    00274900
00000053          UM = ( U(I,J) + U(I-1,J) ) / 2.0    00275000
00000054          IF ( I.EQ.IN )  UM = U(I-1,J)      00275100
00000055          YINTG(J) = R(J)*UM*T(I,J)          00275200
00000056 1100 CONTINUE                               00275300
00000057      CALL SIMP2D ( RINTG, YINTG, JN, TB(I), ILL2 ) 00275400
00000058      IF ( ILL2.NE.0 )  GO TO 9999            00275500
00000059      TB(I)  = 8.0*TB(I)*UBR                  00275600
C                                                     00275700
C ----- BULK MASS FRACTION -----                00275800
C                                                     00275900
00000060      IF ( NGAS.EQ.1 )  THEN                  00276000
00000061          OMG(1) = 1.0                        00276100
00000062      ELSE                                    00276200
C                                                     00276300
00000063      DO 1200  N=2,NGAS                       00276400
00000064      DO 1300  J=2,JN-1                       00276500
00000065          RINTG(J) = R(J)                    00276600
00000066          UM = ( U(I,J) + U(I-1,J) ) / 2.0    00276700
00000067          IF ( I.EQ.IN )  UM = U(I-1,J)      00276800
00000068          YINTG(J) = R(J)*UM*OMEGA(N,I,J)    00276900
00000069 1300 CONTINUE                               00277000
00000070      CALL SIMP2D ( RINTG, YINTG, JN, OMEGAB(N,I), ILL3 ) 00277100
00000071      IF ( ILL3.NE.0 )  GO TO 9999            00277200
00000072      OMEGAB(N,I) = 8.0*OMEGAB(N,I)*UBR      00277300
00000073      OMG(N)  = OMEGAB(N,I)                  00277400
00000074 1200 CONTINUE                               00277500
00000075      OMEGAB(1,I) = 1.0-OMEGAB(2,I)-OMEGAB(3,I)-OMEGAB(4,I) 00277600
00000076      OMG(1)  = OMEGAB(1,I)                  00277700
00000077      ENDIF                                  00277800
C                                                     00277900
C ----- NONDIMENSIONAL BULK PROPERTIES ; RHOB, AMUB, CONB ETC. -- 00278000
C                                                     00278100
00000078      PABS = P(I,JN)*RHOIN*UIN*UIN + PREF      00278200
00000079      TABS = TB(I)*(TW-TIN) + TIN              00278300
00000080      CALL PROP ( PABS, TW, OMG, NGAS, 2, RHOW, AMUB(I), CONW,  00278400
1          CPB, DIFB, DM, GNM, XMA )                00278500
00000081      IF ( NGAS.NE.1.OR.CX1.NE.0.0 )  THEN    00278600
00000082      CALL PROP ( PABS, TABS, OMG, NGAS, 2, RHOB(I), AMUB(I), CONB(I),  00278700
1          CPB, DIFB, DM, GNM, XMA )                00278800
00000083      PRB(I)  = CPB*AMUB(I)/CONB(I)          00278900
00000084      DO 1310  N=1,NGAS                         00279000
00000085 1310 SCB(N,I) = AMUB(I)/RHOB(I)/D2(N)        00279100
00000086      RHOB(I)  = RHOB(I)/RHOIN                 00279200
00000087      AMUB(I)  = AMUB(I)/VISIN                 00279300
00000088      CONB(I)  = CONB(I)/CNDIN                 00279400
00000089      CPB      = CPB /CPIN                     00279500
00000090      CONW      = CONW/CNDIN                     00279600
00000091      ELSE                                       00279700
00000092      PRB(I)  = CPIN*VISIN/CNDIN                 00279800
00000093      DO 1320  N=1,NGAS                         00279900
00000094 1320 SCB(N,I) = VISIN/RHOIN/D2(N)            00280000
00000095      RHOB(I)  = 1.0                           00280100

```

FORTRAN77 EX V12L10 BULK DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000096      AMUB(I) = 1.0                                00280200
00000097      CDNB(I) = 1.0                                00280300
00000098      CPB      = 1.0                                00280400
00000099      CONW     = CONW/CNDIN                        00280500
00000100      ENDIF                                         00280600
C
00000101      IF ( CX1.EQ.0.0 )   CONW = 1.0                00280700
C
C
C      ----- BULK NUSSELT NUMBER ; NUB(I) -----          00280800
C
00000102      ANUB(I) = 0.0                                00280900
00000103      IF ( TB(I).EQ.1.0 )   GO TO 1400              00281000
00000104      IF ( I.LT.IHOT(1).OR.I.GT.IHOT(2) ) GO TO 1400  00281100
C
C      TCNS = TIN/(TW-TIN)                                    00281200
00000105      TCNS = 0.0                                     00281300
00000106      FAST = RHO(I,JN-1)*VWALL(I)                   00281400
00000107      FPLS = MAX(FAST,0)                             00281500
00000108      FMNS = MAX(-FAST,0)                           00281600
C
C      QHCN = -CONW/CONB(I)*(T(I,JN)-T(I,JN-1))/(T(I,JN)-TB(I))  00281700
00000109      QHCN = - (T(I,JN)-T(I,JN-1))/(T(I,JN)-TB(I))  00281800
1
1      /DRA(JN-1)*2.0                                       00281900
00000110      QCNV = RE*PR/CONB(I)/(T(I,JN)-TB(I))*(FPLS*(T(I,JN-1)+TCNS)  00282000
1      -FMNS*(T(I,JN)+TCNS))                               00282100
00000111      ANUB(I) = - QHCN                               00282200
00000112      ANUT(I) = - (QHCN + QCNV)                     00282300
00000113      1400 CONTINUE                                  00282400
C
C      ----- REYNOLDS NUMBER -----                        00282500
C
00000114      REB(I) = RE*RHOB(I)*UBN(I)/AMUB(I)            00282600
C
C
C      ----- MASS FLOW RATE (KG/S) -----                  00282700
C
00000115      GBN(I) = RHOIN*UIN*PAI*0.25*DIAM*DIAM*RHOB(I)*UBN(I)  00282800
00000116      GB(I) = GB(1)*(RHOB(I+1)+RHOB(I))*0.5*UB(I)  00282900
C
C
C      ----- GRAETZ NUMBER -----                         00283000
C
00000117      XRE(I) = X(I)/REB(I)                          00283100
00000118      IF ( I.LT.IHOT(1).OR.I.GT.IHOT(2) ) THEN    00283200
00000119      XREPR(I) = 0.0                                00283300
00000120      ELSE                                          00283400
00000121      XREPR(I) = (X(I)-XA(IHOT(1)))/RE/PR          00283500
00000122      ENDIF                                         00283600
00000123      IF ( VWALL(I).EQ.0.0.AND.TIN.EQ.TW ) THEN    00283700
00000124      DO 1410 N=1,NGAS                                00283800
00000125      1410 XRESC(N,I) = 0.0                          00283900
00000126      ELSE                                          00284000
00000127      DO 1420 N=1,NGAS                                00284100
00000128      1420 XRESC(N,I) = (X(I)-XA(ICHM(1)))/RE/SCB(N,1)  00284200
00000129      ENDIF                                         00284300
C
C
C      ----- SHERWOOD NUMBER -----                       00284400
C
00000130      DO 1500 N=1,NGAS                                00284500
00000131      WMASSF = 0.0                                    00284600
00000132      DO 1510 L=1,NGAS                                00284700
00000133      1510 WMASSF = WMASSF + DIFP(N,L,I,JN)*(XMA(I,JN)*OMEGA(L,I,JN)  00284800
1      -XMA(I,JN-1)*OMEGA(L,I,JN-1))/DR(JN-1)            00284900
00000134      WMASSF = WMASSF*RHO(I,JN)*XM(N)/XMA(I,JN)/XMA(I,JN)*  00285000

```



FORTTRAN77 EX V12L10 BULK DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000135      1      2.0*RHOIN*D21IN(1)/DIAM      00286200
00000136      SHB(N,I) = OMEGA(N,I,JN) - OMEGAB(N,I)      00286300
00000137      SHBT(N,I) = 0.0      00286400
00000138      IF ( ABS(BUNBO).GE.1.0E-10 ) THEN      00286500
00000139      SHB(N,I) = DIAM*WMASSF /D2(N)/RHOIN/RHOB(I)/BUNBO      00286600
00000140      SHBT(N,I) = DIAM*(WMASSF+RHOIN*UIN*RHOB(I)*VWALL(I)*      00286700
      1      OMEGA(N,I,JN))/D2(N)/RHOIN/RHOB(I)/BUNBO      00286800
00000141      END IF      00286900
00000142      1500 CONTINUE      00287000
C      00287100
C      100 CONTINUE      00287200
C      00287300
C      ----- VALUE AT BOUNDARY AND WALL SURFACE -----      00287400
C      00287500
00000144      DO 110 I=2,IN-1      00287600
00000145      DGBN(I) = 8.0*GB(1)*RHOB(I)*ABS(VWALL(I))*RA(JN)*DX(I)      00287700
00000146      IF ( ABS(GB(I)-GB(I-1)).GE.1.0E-12 ) THEN      00287800
00000147      ERGBN(I)= ABS((DGBN(I)-GB(I)+GB(I-1))/(GB(I)-GB(I-1)))      00287900
00000148      ELSE      00288000
00000149      ERGBN(I)= 0.0      00288100
00000150      ENDDIF      00288200
00000151      REW(I) = RE*RHOB(I)*VWALL(I)/AMUB(I)      00288300
00000152      110 CONTINUE      00288400
C      00288500
C      ----- PRESSURE AT WALL BOUNDARY -----      00288600
C      00288700
C      00288800
00000153      JJ=JN-1      00288900
00000154      DO 120 I=2,IN-1      00289000
00000155      UIPJ = ( U(I,JJ)+U(I,JJ+1) )/2.0      00289100
00000156      UIMJ = ( U(I-1,JJ)+U(I-1,JJ+1) )/2.0      00289200
00000157      VIMJ = ( RA(JJ+1)*V(I,JJ)+RA(JJ)*V(I,JJ-1) )/2.0/R(JJ)      00289300
00000158      RIPJP = ( RHO(I,JJ)+RHO(I,JJ+1)+RHO(I+1,JJ)+RHO(I+1,JJ+1) )/4.0      00289400
00000159      RIMJP = ( RHO(I,JJ)+RHO(I,JJ+1)+RHO(I-1,JJ)+RHO(I+1,JJ+1) )/4.0      00289500
00000160      FIP = RIPJP*UIPJ/DX(I)      00289600
00000161      FIM = RIMJP*UIMJ/DX(I)      00289700
00000162      FJP = 4.0/(R(JJ)+RA(JJ+1))/DR(JJ)*RA(JJ+1)*RHO(I,JJ+1)*V(I,JJ)      00289800
00000163      FJM = 4.0/(R(JJ)+RA(JJ+1))/DR(JJ)*R(JJ)*RHO(I,JJ)*VIMJ      00289900
00000164      SAHEN1 = MAX(FIP,0.0)*V(I,JJ) - MAX(-FIP,0.0)*V(I+1,JJ)      00290000
      1      - MAX(FIM,0.0)*V(I-1,JJ) + MAX(-FIM,0.0)*V(I,JJ)      00290100
00000165      SAHEN2 = FJP*V(I,JJ) - MAX(FJM,0.0)*V(I,JJ-1)      00290200
      1      + MAX(-FJM,0.0)*V(I,JJ)      00290300
00000166      VIPJP = ( AMU(I,JJ)+AMU(I,JJ+1)+AMU(I+1,JJ)+AMU(I+1,JJ+1) )/4.0      00290400
00000167      VIMJP = ( AMU(I,JJ)+AMU(I,JJ+1)+AMU(I-1,JJ)+AMU(I-1,JJ+1) )/4.0      00290500
00000168      UHEN1 = VIPJP/RE/DX(I)/DXA(I)*(V(I+1,JJ)-V(I,JJ))      00290600
      1      -VIMJP/RE/DX(I)/DXA(I-1)*(V(I,JJ)-V(I-1,JJ))      00290700
00000169      UHEN2 = -AMU(I,JJ)*R(JJ)/RE/RA(JJ+1)/DR(JJ)*2.0/DR(JJ)*      00290800
      1      (V(I,JJ)-V(I,JJ-1))      00290900
00000170      UHEN3 = -AMU(I,JJ+1)/RE/RA(JJ+1)/RA(JJ+1)*V(I,JJ)      00291000
C      00291100
00000171      P(I,JJ+1) = P(I,JJ) + DR(J)/2.0*(UHEN1+UHEN2+UHEN3      00291200
      1      -SAHEN1-SAHEN2)      00291300
00000172      120 CONTINUE      00291400
C      00291500
C      ----- FRICTION FACTOR -----      00291600
C      ***** TOTAL PRESSURE LOSS FROM INLET TO OUTLET *****      00291700
C      00291800
00000173      XDVLP = 0.0      00291900
00000174      IF ( MCUIN.EQ.2 )      XDVLP = 0.1*RE      00292000
00000175      XPLS = (X(IN)+XDVLP)/RE      00292100

```

```

FORTRAN77 EX  V12L10  BULK          DATE 92-08-10  TIME 14:16:19

00000176      FAPP = ( 3.44/XPLS**0.5 + ( 1.25/4.0/XPLS + 16.0 - 3.44/XPLS
1              **0.5 ) / ( 1.0 + 0.00021/XPLS/XPLS ) ) / RE      00292200
00000177      DPTOT = X(IN)*FAPP*2.0                                00292300
C                                                       00292400
00000178      DO 200 I=2,IN                                         00292500
00000179      XPLS = (X(I)+XDVLP)/RE                                  00292600
00000180      FGRT(I) = 1.72/XPLS**0.5 + ( 16.0-1.72/XPLS**0.5+
1              1.008E-2/XPLS**2-1.806E-3/XPLS**2.5+
2              1.3125E-4/XPLS**3 ) / ( 1.0+2.1E-4/XPLS**2 )**2  00292700
00000181      200 CONTINUE                                           00292800
00000182      DO 210 I=2,IN-1                                         00292900
00000183      P1 = P(I-1,JN) + RHOB(I-1)*UBN(I-1)**2              00293000
00000184      P2 = P(I, JN) + RHOB(I )*UBN(I )**2                 00293100
00000185      P3 = P(I+1,JN) + RHOB(I+1)*UBN(I+1)**2              00293200
00000186      DETA = X(I-1)**2*X(I) + X(I)**2*X(I+1) + X(I+1)**2*X(I-1)
1              - X(I-1)*X(I)**2 - X(I)*X(I+1)**2 - X(I+1)*X(I-1)**2  00293300
00000187      IF ( I.EQ.IN-1.OR.I.EQ.2 ) THEN                          00293400
00000188      A = 0.0                                                    00293500
00000189      B = ( P3 - P2 ) / ( X(I+1) - X(I) )                    00293600
00000190      ELSE                                                    00293700
00000191      A = ( P1*X(I) + P2*X(I+1) + P3*X(I-1)
1              - P1*X(I+1) - P2*X(I-1) - P3*X(I) ) / DETA          00293800
00000192      B = ( P1*X(I+1)**2 + P2*X(I-1)**2 + P3*X(I)**2
1              - P1*X(I)**2 - P2*X(I+1)**2 - P3*X(I-1)**2 ) / DETA  00293900
00000193      ENDOF                                                    00294000
00000194      FRIC(I) = -(2.0*A*X(I)+B)/2.0/RHOB(I)/UBN(I)**2 * REB(I)  00294100
C                                                       00294200
00000195      FTAU(I) = -2.0*AMU(I,JN)*(-U(I-1,JN-1)-U(I,JN-1))*0.5/(RE*
1              RHOB(I)*UBN(I)*UBN(I)*DR(JN-1)/2.0) * REB(I)      00294300
00000196      210 CONTINUE                                           00294400
00000197      FRIC(IN) = FRIC(IN-1)                                  00294500
C                                                       00294600
C      ----- PRINT -----                                       00294700
C                                                       00294800
00000198      WRITE(6,6000) DPTOT                                    00294900
C                                                       00295000
00000199      IF ( NGAS.EQ.1 ) GO TO 310                              00295100
00000200      WRITE(6,6500)                                           00295200
00000201      DO 300 I=2,IN                                         00295300
00000202      WRITE(6,6600) I,(XRESC(N,I),N=1,4), (SHB(N,I),N=1,4),
1              (SHBT(N,I), N=1,4), REW(I), I                        00295400
00000203      300 CONTINUE                                           00295500
00000204      310 CONTINUE                                           00295600
C                                                       00295700
00000205      WRITE(6,6020)                                           00295800
00000206      DO 400 I=2,IN                                         00295900
00000207      WRITE(6,6010) I, X(I), REB(I), FRIC(I), FTAU(I), FGRT(I),
1              XRE(I), ANUB(I), XREPR(I), XRESC(2,I), ANUB(I),
2              ANUT(I), P(I,JN)                                    00296000
00000208      400 CONTINUE                                           00296100
C                                                       00296200
00000209      WRITE(6,6200)                                           00296300
00000210      DO 500 I=2,IN                                         00296400
00000211      WRITE(6,6100) I, TB(I), GBN(I), UBN(I), UCENT(I),
1              (OMEGAB(N,I),N=1,4), RHOB(I), AMUB(I), CONB(I), PRB(I)  00296500
00000212      500 CONTINUE                                           00296600
C                                                       00296700
00000213      WRITE(6,6300)                                           00296800
00000214      DO 600 I=2,IN                                         00296900
00000215      WRITE(6,6400) I, GB(I-1),I-1, DGBN(I), ERGBN(I), REW(I),
1              (OMEGAB(N,I),N=1,4), RHOB(I), AMUB(I), CONB(I), PRB(I)  00297000

```

FORTRAN77 EX V12L10 BULK DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

1          REW(I)/REB(I), (AMF(N,I)/RH0IN/UI,N=1,4),      00298200
2          T(I,JN-1)                                       00298300
00000216 600 CONTINUE                                     00298400
C
00000217 6000 FORMAT(1H0,/,/, '***** BULK VALUES AT NODE OF SCALAR MESH ', 00298500
1          70(' ')//,/, ' DP-TOT=',1PE15.8 )             00298600
00000218 6020 FORMAT(1H0,/,/, ' I ',1X,                 00298700
1          'X (NODE)',5X,'REB',7X,'F*REB',4X,'FTAU*REB',3X, 00298800
2          '(SHAH FRE)',3X,'X/D/RE',7X,'NUB',5X,' GRZ(PR)', 00298900
3          2X,'GRZ(SC-02)',3X,'NU-CND',5X,'NU-TOT ',5X,'P-W' ) 00299000
00000219 6010 FORMAT(1H ,I4,6(1X,1PE10.3),1X,OPF10.5,4(1X,1PE10.3),1X,E10.3 ) 00299100
00000220 6100 FORMAT(1H ,I4,1X,F10.7,11(1X,1PE10.3) )    00299200
00000221 6200 FORMAT(1H0,/,/, ' I ',1X,' TB ',3X,'G (KG/S)',5X,'UB', 00299300
1          6X,'U-CENTER',4X,'W-HE',                      00299400
2          7X,'W-02',7X,'W-C0',7X,'W-C02',6X,'RHOB',7X,'VISB', 00299500
3          7X,'CONB',8X,'PRB' )                          00299600
00000222 6300 FORMAT(1H0,/,/, ' I ',1X,'G-B(KG/S)',7X,' DG(KG/S) ', 00299700
1          ' ER.G-G/DG ',4X,'RE-W',6X,'RE.W/RE.B',       00299800
2          3X,' DA.W-C',5X,'DA.W-02',5X,'DA.W-C0',5X,'DA.W-C02', 00299900
3          5X,'T(JN-1)' )                                00300000
00000223 6400 FORMAT(1H ,I4,2X,1PE10.3,' (',OPI3,')',8(2X,1PE10.3), 00300100
1          2X,OPF12.9 )                                  00300200
00000224 6500 FORMAT(1H0,/,/, ' I ',3X,'GRZ-HE',5X,'GRZ-02',5X,'GRZ-C0', 00300300
1          4X,'GRZ-C02',4X,'SH.B-HE',2X,'SH.B-02',2X,'SH.B-C0', 00300400
2          2X,'SH.B-C02',1X,'SH.T-HE',2X,'SH.T-02',2X,    00300500
3          'SH.T-C0',1X,'SH.T-C02',3X,'RE-W I' )        00300600
00000225 6600 FORMAT(1H',I3,4(1X,1PE10.3),8(OPF9.3),F10.5,I3) 00300700
C
00000226 RETURN                                          00300800
C
00000227 9999 CONTINUE                                   00300900
00000228 WRITE(6,6999) ILL2, ILL3                       00301000
00000229 6999 FORMAT(1H1,/,/, ' ERROR AT SUBROUTINE SIMP2S, ILL2,ILL3,' 00301100
1          ' = ',2(I6,2X) )                              00301200
00000230 RETURN                                          00301300
00000231 END                                             00301400

```

FORTRAN77 EX V12L10

DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****
C ***** INTEGRATION OF U-VELOCITIES AT 4 POINTS *****
00000001 C SUBROUTINE TRICO ( X, Y, N, S )
C *****
C
00000002 C IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )
00000003 C DIMENSION A(4,5), X(4), Y(4)
C
00000004 C X4 = (X(N+1)**4-X(N)**4)/4.0
00000005 C X3 = (X(N+1)**3-X(N)**3)/3.0
00000006 C X2 = (X(N+1)**2-X(N)**2)/2.0
00000007 C X1 = X(N+1) -X(N)
00000008 C DO 100 I=1,4
00000009 C A(I,1) = 1.0
00000010 C A(I,2) = X(I)
00000011 C A(I,3) = X(I)*X(I)
00000012 C A(I,4) = X(I)*X(I)*X(I)
00000013 C 100 A(I,5) = Y(I)
00000014 C CALL GAUELD ( A,4,4,5,1.0E-15,ILL )
00000015 C S = X4*A(4,5)+X3*A(3,5)+X2*A(2,5)+X1*A(1,5)
C
00000016 C RETURN
00000017 C END

```

```

00301800
00301900
00302000
00302100
00302200
00302300
00302400
00302500
00302600
00302700
00302800
00302900
00303000
00303100
00303200
00303300
00303400
00303500
00303600
00303700
00303800
00303900
00304000
00304100
00304200

```

FORTRAN77 EX V12L10 DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C
C
C *****00304300
C *****00304400
C *****00304500
C ***** THERMAL PROPERTIES IN MULTICOMPONENT GAS MIXTURE *****00304600
C *****00304700
00000001          SUBROUTINE PROP                                00304800
1      ( P, T, OMG, ICMP, NOMGIN, RHO, VIS, CND, CP,          00304900
2      D21J, DM, GNM, XMM )                                00305000
C *****00305100
C 1 ; HE, 2 ; O2, 3 ; CO, 4 ; CO2, 5 ; N2, 6 ; AIR, 7 ; AR    00305200
C P ; (PA), T ; (C), OMG ; MASS FRACTION, GNM ; MOLE FRACTION 00305300
C                                                                00305400
00000002      IMPLICIT REAL * 8 ( A-H, O-Z )                00305500
00000003      PARAMETER ( NG=5 )                            00305600
C                                                                00305700
00000004      DIMENSION D2(7,7), DM(7,7),                  00305800
1      XM(7), SIG(7), EPK(7), C(8),                        00305900
2      XMG(7), GNM(7), OMG(7),                             00306000
3      F(7,7), F1(7,7), F11(7,7), FJI(7,7),               00306100
4      CVIS(7,2), CCND(7,2), CCP(7,4), S(7),               00306200
5      RHOI(7), VISI(7), CNDI(7), CPI(7), D21IN(NG)        00306300
C                                                                00306400
00000005      COMMON /MOLNO / XM,                          00306500
1      /DIF2 / D21IN,                                       00306600
2      /PRPCNS/ SIG, EPK, C, CVIS, S, CCND, CCP            00306700
C                                                                00306800
C ----- CONSTANTS -----                                00306900
C                                                                00307000
00000006      TK = T + 273.15                               00307100
00000007      TK1 = TK/1000.0                               00307200
00000008      PATM = P/1.013E+5                             00307300
00000009      R = 8.314                                     00307400
00000010      IF ( ICMP.EQ.1 ) GO TO 50                    00307500
C                                                                00307600
00000011      DO 30 I=1,7                                    00307700
00000012      DO 40 J=1,7                                    00307800
00000013          F(I,J) = 0.0                              00307900
00000014          F1(I,J) = 0.0                             00308000
00000015          F11(I,J) = 0.0                            00308100
00000016          FJI(I,J) = 0.0                            00308200
00000017          D2(I,J) = 0.0                             00308300
00000018          DM(I,J) = 0.0                             00308400
00000019      40 CONTINUE                                   00308500
00000020      30 CONTINUE                                   00308600
C                                                                00308700
C ----- AVERAGE MOLECULAR WEIGHT -----                00308800
C                                                                00308900
00000021      50 CONTINUE                                   00309000
00000022          XMM = 0.0                                   00309100
00000023          DO 10 I=1,7                                00309200
00000024              XMM = XMM +OMG(I)/XM(I)                00309300
00000025      10 CONTINUE                                   00309400
00000026          XMM = 1.0/XMM                               00309500
C                                                                00309600
C ----- MOLE FRACTION -----                            00309700
C                                                                00309800
00000027          DO 20 I=1,7                                00309900
00000028              GNM(I) = XMM*OMG(I)/XM(I)              00310000
00000029      20 CONTINUE                                   00310100
C                                                                00310200

```

FORTRAN77 EX V12L10 PROP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

C      ***** DIFFUSION COEFFICIENTS ***** 00310300
C      ----- ; FOR A BINARY MIXTURE ----- 00310400
C 00000030 DO 60 I=1,7 00310500
00000031     XMG(I) = XM(I)*1000.0 00310600
00000032 60 CONTINUE 00310700
C 00000033 DO 100 I=1,6 00310800
00000034     II = I 00310900
00000035     DO 110 J=II+1,7 00311000
00000036         SIGIJ = ( SIG(I)+SIG(J) )/2.0 00311100
00000037         EPKIJ = ( EPK(I)*EPK(J) )**0.5 00311200
00000038         TAST = TK/EPKIJ 00311300
00000039         XMIJ = ( XMG(I)+XMG(J) )/2.0/XMG(I)/XMG(J) 00311400
00000040         OMGIJ = C(1)*TAST**(-C(2)) 00311500
1             +C(3)*EXP(-C(4)*TAST)+C(5)*EXP(-C(6)*TAST) 00311600
2             +C(7)*EXP(-C(8)*TAST) 00311700
00000041         D2(I,J) = 2.6276E-3*(10.0*TK1**3*XMIJ)**0.5/PATM 00311800
1             /SIGIJ**2/OMGIJ 00311900
2             00312000
1             D2(J,I) = D2(I,J) 00312100
00000042 110 CONTINUE 00312200
00000043 100 CONTINUE 00312300
00000044 IF ( ICMP.EQ.1 ) GO TO 1000 00312400
00000045 ***** DIFFUSION COEFFICIENT IN A MULTICOMPONENT MIXTURE ***** 00312500
C      ----- MATRIX AND DETERMINANT OF F ----- 00312600
C 00000046 DO 200 I=1,ICMP 00312700
C 00000047 DO 210 J=1,ICMP 00312800
C 00000048     F(I,J) = 0.0 00312900
C 00000049     F1(I,J) = 0.0 00313000
C 00000050     IF ( I.EQ.J ) GO TO 210 00313100
C 00000051     FD2 = 0.0 00313200
C 00000052     DO 220 K=1,ICMP 00313300
C 00000053     IF ( K.EQ.I ) GO TO 220 00313400
C 00000054     FD2 = FD2 + GNM(K)/D2(I,K) 00313500
C 00000055 220 CONTINUE 00313600
C 00000056     F(I,J) = GNM(I)/D2(I,J)+XM(J)/XM(I)*FD2 00313700
C 00000057     F1(I,J) = F(I,J) 00313800
C 00000058 210 CONTINUE 00313900
C 00000059 200 CONTINUE 00314000
C 00000060 CALL MDETD ( F1, 7, ICMP, 1.0E-14, DETF, ILLF1 ) 00314100
C 00000061 IF ( ILLF1.NE.0 ) WRITE(6,6001) ILLF1 00314200
C 00000062 6001 FORMAT(1H0, '*** ERROR IN MDETS !! ILLF1=',I5) 00314300
C 00000063 ----- DM(I,J) ----- 00314400
C 00000064 DO 300 I=1,ICMP 00314500
C 00000065 ----- DETERMINANT FII ----- 00314600
C 00000066 III = 1 00314700
C 00000067 DO 400 II=1,ICMP 00314800
C 00000068     IF ( II.EQ.I ) GO TO 400 00314900
C 00000069     JJJ = 1 00315000
C 00000070 DO 410 JJ=1,ICMP 00315100
C 00000071     IF ( JJ.EQ.I ) GO TO 410 00315200
C 00000072     FII(III,JJJ) = F(II,JJ) 00315300
00000073 00315400
00000074 00315500
00000075 00315600
00000076 00315700
00000077 00315800
00000078 00315900
00000079 00316000
00000080 00316100
00000081 00316200

```

FORTRAN77 EX V12L10 PROP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000071          JJJ = JJJ+1                                00316300
00000072  410    CONTINUE                                  00316400
00000073          III = III+1                              00316500
00000074  400    CONTINUE                                  00316600
C                                                       00316700
00000075          CALL MDETD ( FII, 7, ICMP-1, 1.0E-14, DETFII, ILLFII ) 00316800
00000076          IF ( ILLFII.NE.0 ) WRITE(6,6002) ILLFII 00316900
00000077  6002          FORMAT(1HO,'*** ERROR IN MDETS !! ILLFII=', 15 ) 00317000
C                                                       00317100
00000078          DO 310 J=1,ICMP                          00317200
C                                                       00317300
C          ----- DETERMINANT FJI -----                00317400
C                                                       00317500
C                                                       00317600
00000079          III = 1                                  00317700
00000080          DO 420 II=1,ICMP                          00317800
00000081          IF ( II.EQ.J )                          GO TO 420 00317900
00000082          JJJ = 1                                  00318000
00000083          DO 430 JJ=1,ICMP                          00318100
00000084          IF ( JJ.EQ.I )                          GO TO 430 00318200
00000085          FJI(JJJ,III) = F(II,JJ)                 00318300
00000086          JJJ = JJJ+1                              00318400
00000087  430    CONTINUE                                  00318500
00000088          III = III+1                              00318600
00000089  420    CONTINUE                                  00318700
C                                                       00318800
00000090          CALL MDETD ( FJI, 7, ICMP-1, 1.0E-14, DETFJI, ILLFJI ) 00318900
00000091          IF ( ILLFJI.NE.0 ) WRITE(6,6003) ILLFJI 00319000
00000092  6003          FORMAT(1HO,'*** ERROR IN MDETS !! ILLFJI=',15) 00319100
C                                                       00319200
00000093          DM(I,J) = XMM/XM(J) *                    00319300
1              ( (-1.0)**(I+J)*DETFJI - (-1.0)**(I+I)*DETFII ) 00319400
2              / DETF                                     00319500
C                                                       00319600
00000094  310    CONTINUE                                  00319700
00000095  300    CONTINUE                                  00319800
C          ***** DENSITY, VISCOSITY, THERMAL CONDUCTIVITY, ***** 00319900
C          AND, SPECIFIC HEAT                               00320000
C          ----- EACH GAS -----                        00320100
C                                                       00320200
00000096  1000   CONTINUE                                  00320300
00000097          DO 1100 I=1,7                            00320400
00000098          RHOI(I) = XM(I)*GNM(I)*P/R/TK             00320500
00000099          VISI(I) = CVIS(I,1)*TK**CVIS(I,2)        00320600
00000100          CNDI(I) = CCND(I,1)*TK**CCND(I,2)        00320700
00000101          CPI(I) = 4.1868/XM(I) * ( CCP(I,1) + CCP(I,2)*TK1 +
1              CCP(I,3)*TK1**2 + CCP(I,4)*TK1**3 ) 00320800
00000102  1100   CONTINUE                                  00320900
C                                                       00321000
C          ----- GAS MIXTURE -----                    00321100
C                                                       00321200
C                                                       00321300
00000103          RHO = 0.0                                00321400
00000104          VIS = 0.0                                00321500
00000105          CND = 0.0                                00321600
00000106          CP = 0.0                                 00321700
C                                                       00321800
00000107          DO 2000 I=1,ICMP                          00321900
C                                                       00322000
C          COEFV = 0.0                                       00322100
00000108          COEFC = 0.0                               00322200
00000109          DO 2100 J=1,ICMP
00000110

```

FORTRAN77 EX V12L10 PROP DATE 92-08-10 TIME 14:16:19

```

00000111      IF ( I.NE.J )      THEN      00322300
00000112      FAIVIS = (1.0+(VISI(I)/VISI(J))*0.5*(XM(J)/XM(I))*0.25) 00322400
1          **2/(2.828427*(1.0+XM(I)/XM(J))*0.5)      00322500
00000113      FAICND = 0.25*(1.0+(VISI(I)/VISI(J))*(XM(J)/XM(I))*0.75* 00322600
2          (1.0+S(I)/TK)/(1.0+S(J)/TK))*0.5)**2*      00322700
3          (1.0+(S(I)*S(J))*0.5/TK)/(1.0+S(I)/TK)      00322800
00000114      ELSE      00322900
00000115      FAIVIS = 0.0      00323000
00000116      FAICND = 0.0      00323100
00000117      ENDIF      00323200
00000118      COEFV = COEFV + GNM(J)*FAIVIS      00323300
00000119      COEFC = COEFC + GNM(J)*FAICND      00323400
00000120      2100 CONTINUE      00323500
C      00323600
00000121      IF ( GNM(I).LE.1.0E-12 )      GO TO 2200      00323700
00000122      RHO = RHO + RHOI(I)      00323800
00000123      VIS = VIS + VISI(I)/(1.0+COEFV/GNM(I))      00323900
00000124      CND = CND + CNDI(I)/(1.0+COEFC/GNM(I))      00324000
00000125      CP = CP + CPI(I)*GNM(I)      00324100
00000126      2200 CONTINUE      00324200
00000127      2000 CONTINUE      00324300
C      00324400
00000128      DD 2300 N=2,NG      00324500
00000129      D21IN(N) = D2(1,N)      00324600
00000130      2300 CONTINUE      00324700
00000131      D21IN(1) = D21IN(2)      00324800
00000132      D21J = D2(1,NOMGIN)      00324900
C      00325000
C      00325100
00000133      RETURN      00325200
00000134      END      00325300
END OF COMPILATION,HIGHEST SEVERITY CODE=00

```



\*\*\*\*\* INPUT AND CONTROL DATA \*\*\*\*\*

```

THE NUMBER OF GAS COMPONENTS      : NGAS  = 1
PRESENCE OF CHEMICAL REACTION    :
  0 ; WITHOUT
  1 ; WITH
      CO + O2 > CO2      : NCR   = 0
      C  + O2 > CO       : NCR1  = 0
      C  + O2 > CO2      : NCR2  = 0
      C  + CO2 > CO      : NCR3  = 0

DIMENSIONLESS TIME STEP          : DTAU  = 1.00000E-01
THE NUMBER OF TIME STEPS        : NEND  = 1
THE NUMBER OF ITERATION TIMES    : IEND  = 1000

ALLOWABLE ERROR FOR PRESSURE CAL. : ALWP  = 1.00000E-04
FOR U VELOCITY CAL.             : ALWU  = 1.00000E-04
FOR V VELOCITY CAL.             : ALWV  = 1.00000E-04
FOR O2 MASS FRAC. CAL.: ALWO(2)=

THE NUMBER OF PRINTING CYCLES ;
  IN THE TIME STEP : NPRTI =1000
  IN TIME ITERATION : NPRTN = 500

THE NUMBER OF ITERATION TIMES ;
  FOR SOLVING PRESSURE EQUATION : NSETP  = 3

RELAXATION FACTOR FOR PRESSURE EQ. : ALPHAP = 0.200
FOR U VELOCITY EQ. : ALPHAU = 0.300
FOR V VELOCITY EQ. : ALPHAV = 0.300
FOR T ENERGY EQ. : ALPHAT = 0.300
FOR HE MASS CNS. EQ.: ALPHAO(1)= 0.500
FOR O2 MASS CNS. EQ.: ALPHAO(2)=

FLOW CONDITION : ICND = 3
  1 ; COMPRESSIBLE AND VARIABLE VISCOSITY.
  2 ; NON COMPRESSIBLE AND VARIABLE VISCOSITY.
  3 ; NON COMPRESSIBLE AND CONSTANT VISCOSITY.

FLOW DIRECTION : IDIRX = 0
  -1 ; UPWARD, 1 ; DOWNWARD, 0 ; NO GRAVITY.

TEMPERATURE AT INLET (C) : TIN = 20.0
PRESSURE AT INLET (PA) : PIN = 1.00000E+05
REFERENCE TEMPERATURE (C) <.NE.TIN> : TREF = 15.0
REFERENCE PRESSURE (PA) : PREF = 1.00000E+05
WALL TEMPERATURE (C) : TW = 10.0

U DISTRIBUTION AT INLET : MCUIN = 2
  1 ; UNIFORM DISTRIBUTION
  2 ; POISEVILLE DISTRIBUTION
  3 ; ( U GRADIENT ) = 0
VALUE OF U AT WALL (SLIP VELOCITY) M/S: UWALL = 0.000
MASS FRACTION OF HE AT INLET : OMGIN1 = 0.800
MASS FRACTION OF OXIGEN AT INLET : OMGIN2 = 0.200
MASS FRACTION OF CO AT INLET : OMGIN3 = 0.000
MASS FRACTION OF CO2 AT INLET : OMGIN4 = 0.000
MASS FRACTION OF NITROGEN AT INLET : OMGIN5 = 0.000
    
```

```

REYNOLDS NUMBER AT INLET          : RE      = 100.00
HYDRAULIC DIAMETER OF CIRCULAR TUBE : DIAM   = 5.00000E-02
REYNOLDS NUMBER NORMAL TO WALL     : REW    = 0.00000E+00
( VELOCITY NORMAL TO WALL (M/S) )  : VWIN   = 0.00000E+00

SCHMIDT NUMBER AT INLET            : SC     = 1.67659E+00
GRASHOF NUMBER AT INLET            : GR     = -1.41685E+03
PRANDTL NUMBER AT INLET            : PR     = 6.52920E-01
AVERAGE VELOCITY AT INLET          (M/S) : UIN    = 2.45053E-01
REAL TIME STEP FOR DTAU=1          (SEC) : REALDT = 2.04038E-01

DENSITY OF GAS MIXTURE AT INLET KG/M3 : RHOIN  = 1.59262E-01
REFERENCE DENSITY                   KG/M3 : RHORF  = 1.62025E-01
VISCOSITY OF GAS MIXTURE AT INLET PAS : VISIN  = 1.95138E-05
CONDUCTIVITY AT INLET                W/MK   : CNDIN  = 1.50465E-01
SPECIFIC HEAT AT INLET                J/KGK  : CPIN   = 5.03448E+03
DIFFUSION COEFFICIENT AT INLET        M2/S   : D212IN = 7.30805E-05

SOLUTION METHOD                      : NSIMP  = 1
  1 ; SIMPLE,  2 ; SIMPLER,  3 ; SIMPLEST/ANL.

NODE NUMBER OF KNOWN PRESSURE IN X   : IPPFIX = 2
NODE NUMBER OF KNOWN PRESSURE IN R   : JPPFIX = 2
VALUE OF DIMENSIONLESS PRESSURE KNOWN : PPIX   = 0.00000E+00
IF NGAS>1, PPIX IS NOT REFERRED BUT IS CALCULATED.

```

```

***** M E S H   D A T A   *****
THE NUMBER OF BOUNDARIES IN X DIRECTION ; IBP = 20
      IN R DIRECTION ; JBP = 13

THE NUMBER OF NODE IN X DIRECTION ; IN = 19
      IN R DIRECTION ; JN = 12

THE NUMBER OF THE NODE OF GRAPHITE ; ICHM= 2
      ICHM(1) -- ICHM(2) ; ICHM= 1

THE NUMBER OF THE NODE OF HEATING ; IHOT= 2
      IHOT(1) -- IHOT(2) ; IHOT= 14

THE NUMBER OF THE NODE OF INJECTION ; IVWL= 2
      IVWL(1) -- IVWL(2) ; IVWL= 1

( CALCULATED REGION ; 2 =< X =< IBP-1, 2 =< R =< JBP-1 )
    
```

```

----- M E S H ( X DIRECTION ) -----
I      :      1      2      3      4      5      6      7      8      9      10     11
XA (I) : -1.0000  0.0000  1.0000  2.0000  3.0000  4.0000  5.0000  6.0000  7.0000  8.0000  10.0000
DX (I) :  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  2.0000

I      :      1      2      3      4      5      6      7      8      9      10     11
X (I)  : -0.5000  0.5000  1.5000  2.5000  3.5000  4.5000  5.5000  6.5000  7.5000  9.0000  11.0000
DXA(I) :  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.0000  1.5000  2.0000

I      :      11     12     13     14     15     16     17     18     19     20
XA (I) : 10.0000 12.0000 14.0000 16.0000 20.0000 25.0000 30.0000 35.0000 40.0000 45.0000
DX (I) :  2.0000  2.0000  2.0000  2.0000  4.0000  5.0000  5.0000  5.0000  5.0000  5.0000

I      :      11     12     13     14     15     16     17     18     19
X (I)  : 11.0000 13.0000 15.0000 18.0000 22.5000 27.5000 32.5000 37.5000 42.5000
DXA(I) :  2.0000  2.0000  3.0000  3.0000  4.5000  5.0000  5.0000  5.0000  5.0000
    
```

----- M E S H ( R D I R E C T I O N ) -----

H

J	:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
RA (J)	:	-0.0500	0.0000	0.0500	0.1000	0.1500	0.2000	0.2500	0.3000	0.3500	0.4000	0.4500
DR (J)	:	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500
J	:	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
R (J)	:	* -0.0250	* 0.0250	* 0.0750	* 0.1250	* 0.1750	* 0.2250	* 0.2750	* 0.3250	* 0.3750	* 0.4250	* 0.4750
DRA(J)	:	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500	0.0500
J	:	11	12	13								
RA (J)	:	0.4500	0.5000	0.5500								
DR (J)	:	0.0500	0.0500	0.0500								
J	:	11	12									
R (J)	:	0.4750	0.5250									
DRA(J)	:	0.0500										

```

***** < U > PART : 1/ 2 NTIME= 0/ 1 TIME= 0.00000E+00 ITER= 0/ 1000 ERR= 0.00000E+00 RES,I,J= 0.00000E+00 0. 0.
1: 0.000 2: 1.000 3: 2.000 4: 3.000 5: 4.000 6: 5.000 7: 6.000 8: 7.000 9: 8.000 10: 10.000
1.995E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.995E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.955E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.875E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.755E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.595E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.395E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.155E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
8.750E-01 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
5.550E-01 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
1.950E-01 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00

```

```

***** < U > PART : 2/ 2 NTIME= 0/ 1 TIME= 0.00000E+00 ITER= 0/ 1000 ERR= 0.00000E+00 RES,I,J= 0.00000E+00 0. 0.
11: 12.000 12: 14.000 13: 16.000 14: 20.000 15: 25.000 16: 30.000 17: 35.000 18: 40.000
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00
0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00 0.000E+00

```

\*\*\*\*\*  
 ( 19 X 12 ), 0 - .40.0 REACTION ; 0.0 - 0.0. HEATING ; 0.0 - 20.0. INJECTION ; 0.0 - 0.0.  
 RE= 100.00 RE-W= 0.000 PR= 0.65292 SC= 1.67659 T-IN= 20.0 (C) ( 0.00000) T-W= 10.0 (C) ( 1.00000)  
 IITER= 581 CO-BURN/C0/C02 ; 0 / 0 / 0 / 0  
 ALPHA-P/U/V/T/D ; 0.20 / 0.30 / 0.30 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 / 0.00 /  
 ERR ; 0.00E+00 / 3.30E-05 / 9.80E-07 / 2.26E-04 / 0.00E+00 / 0.00E+00 / 0.09E+00 /  
 RES ; 7.50E-05 / 9.24E-05 / 8.55E-07 / 5.45E-04 / 0.00E+00 / 0.00E+00 / 0.00E+00 /  
 XA ; -1.00000 0.00000 1.00000 2.00000 3.00000 4.00000 5.00000 6.00000 7.00000 8.00000  
 10.00000 12.00000 14.00000 16.00000 20.00000 25.00000 30.00000 35.00000 40.00000 40.00000  
 RA ; -0.050000 0.000000 0.050000 0.100000 0.150000 0.200000 0.250000 0.300000 0.350000 0.400000  
 0.450000 0.500000  
 \*\*\*\*\* KUNUGI-ID \*\*\*\*\*  
 \*\*\*\*\* BULK VALUES AT NODE OF SCALAR MESH \*\*\*\*\*  
 DP-TOT= 1.40982855E+01

\*\*\*\*\* BULK VALUES AT NODE OF SCALAR MESH \*\*\*\*\*

DP-TOT= 1.40982855E+01

I	X (NODE)	REB	F*REB	FTAU*REB	(SHAH FRE)	X/D/RE	NUB	GRZ(PR)	GRZ(SC-O2)	NU-CMD	NU-TOT	P-W
1	5.000E-01	9.999E+01	1.564E+01	1.550E+01	1.611E+01	5.000E-03	7.69879	7.658E-03	0.000E+00	7.697E+00	7.697E+00	-2.212E-04
2	1.500E+00	9.999E+01	1.571E+01	1.580E+01	1.609E+01	1.500E-02	5.19727	2.297E-02	0.000E+00	5.197E+00	5.197E+00	-3.128E-01
3	2.500E+00	9.998E+01	1.581E+01	1.583E+01	1.608E+01	2.500E-02	4.49899	3.899E-02	0.000E+00	4.499E+00	4.499E+00	-6.284E-01
4	3.500E+00	9.998E+01	1.583E+01	1.584E+01	1.607E+01	3.501E-02	4.16882	5.341E-02	0.000E+00	4.169E+00	4.169E+00	-9.447E-01
5	4.500E+00	9.997E+01	1.584E+01	1.584E+01	1.607E+01	4.501E-02	3.98357	6.892E-02	0.000E+00	3.983E+00	3.983E+00	-1.261E+00
6	5.500E+00	9.997E+01	1.584E+01	1.584E+01	1.606E+01	5.502E-02	3.87047	8.424E-02	0.000E+00	3.870E+00	3.870E+00	-1.578E+00
7	6.500E+00	9.996E+01	1.584E+01	1.584E+01	1.605E+01	6.502E-02	3.79893	9.935E-02	0.000E+00	3.799E+00	3.799E+00	-1.894E+00
8	7.500E+00	9.996E+01	1.584E+01	1.585E+01	1.605E+01	7.503E-02	3.75230	1.149E-01	0.000E+00	3.753E+00	3.753E+00	-2.211E+00
9	8.500E+00	9.995E+01	1.584E+01	1.585E+01	1.604E+01	9.004E-02	3.70759	1.378E-01	0.000E+00	3.708E+00	3.708E+00	-2.686E+00
10	9.000E+00	9.995E+01	1.584E+01	1.585E+01	1.604E+01	1.101E-01	3.68396	1.685E-01	0.000E+00	3.684E+00	3.684E+00	-3.320E+00
11	1.300E+01	9.995E+01	1.584E+01	1.585E+01	1.603E+01	1.603E-01	3.67107	1.991E-01	0.000E+00	3.671E+00	3.671E+00	-3.953E+00
12	1.500E+01	9.995E+01	1.585E+01	1.585E+01	1.603E+01	1.501E-01	3.66360	2.297E-01	0.000E+00	3.664E+00	3.664E+00	-4.586E+00
13	1.800E+01	9.995E+01	1.587E+01	1.577E+01	1.602E+01	1.801E-01	3.65444	2.737E-01	0.000E+00	3.654E+00	3.654E+00	-5.537E+00
14	2.250E+01	9.995E+01	1.592E+01	1.592E+01	1.602E+01	2.251E-01	0.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-6.968E+00
15	2.750E+01	9.995E+01	1.593E+01	1.593E+01	1.601E+01	2.751E-01	0.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-8.560E+00
16	3.250E+01	9.995E+01	1.592E+01	1.592E+01	1.601E+01	3.252E-01	0.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-1.015E+01
17	3.750E+01	9.995E+01	2.341E+01	1.592E+01	1.601E+01	3.752E-01	0.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-1.174E+01
18	4.250E+01	4.997E+01	2.341E+01	0.000E+00	1.601E+01	8.504E-01	0.00000	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-1.533E+01

I	TB	G (KG/S)	US	U-CENTER	W-HE	W-O2	W-CO	W-CO2	RHOB	VISB	CONB	PRB
1	0.1835360	7.663E-05	9.999E-01	1.996E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
2	0.2937756	7.662E-05	9.999E-01	1.993E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
3	0.3775635	7.662E-05	9.998E-01	1.992E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
4	0.4445205	7.661E-05	9.998E-01	1.991E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
5	0.5035618	7.661E-05	9.997E-01	1.991E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
6	0.5565866	7.660E-05	9.997E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
7	0.6017253	7.660E-05	9.996E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
8	0.6418099	7.660E-05	9.996E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
9	0.7066791	7.660E-05	9.995E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
10	0.7595059	7.659E-05	9.995E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
11	0.8026783	7.659E-05	9.995E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
12	0.8380268	7.659E-05	9.995E-01	1.990E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
13	0.8871897	7.659E-05	9.995E-01	1.992E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
14	0.8871641	7.659E-05	9.995E-01	1.994E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
15	0.8862309	7.659E-05	9.995E-01	1.994E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
16	0.8831553	7.659E-05	9.995E-01	1.994E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
17	0.8754459	7.659E-05	9.995E-01	1.994E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
18	0.8754459	7.659E-05	9.995E-01	1.994E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01
19	0.0000000	3.830E-05	4.997E-01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+00	6.529E-01

I	G-B(KG/S)	DG(KG/S)	ER-G-G/DG	RE-W	RE-W/RE-B	DA-W-C	DA-W-D2	DA-W-CD	DA-W-C02	T(JN-1)
2	7.663E-05 ( 1)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.842896116
3	3.831E-05 ( 2)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.908239082
4	3.831E-05 ( 3)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.9299991617
5	3.831E-05 ( 4)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.942316042
6	3.831E-05 ( 5)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.950743053
7	3.830E-05 ( 6)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.957094495
8	3.830E-05 ( 7)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.962174535
9	3.830E-05 ( 8)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.966399091
10	3.830E-05 ( 9)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.972812130
11	3.830E-05 ( 10)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.977850713
12	3.830E-05 ( 11)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.981890447
13	3.830E-05 ( 12)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.985164857
14	3.829E-05 ( 13)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.989694384
15	3.830E-05 ( 14)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.910521809
16	3.830E-05 ( 15)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.893172585
17	3.830E-05 ( 16)	0.000E+00	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.884028661
18	3.830E-05 ( 17)	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.872041154
19	3.830E-05 ( 18)	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.860053647

B

付表. プログラムの記号とその意味

## メインプログラム

記号	意味	記号	意味
X(IX)	ノード点の x 方向無次元距離	RESO(NG, 3)	
XA(IX)	境界面の x 方向無次元距離	ALWP	圧力の許容誤差
R(JR)	ノード点の r 方向無次元距離	ALWU	} ALWPに同じ
RA(JR)	境界面の r 方向無次元距離	ALWV	
U(IX, JR)	x 方向無次元流速	ALWO(NG)	
V(IX, JR)	r 方向無次元流速	IN	ノード点の総数 (x 方向)
P(IX, JR)	無次元圧力	JN	ノード点の総数 (r 方向)
UØ(IX, JR)	1 タイムステップ前の U	ICHM(2)	化学反応区間の開始ノード番号と終了ノード番号
VØ(IX, JR)	1 タイムステップ前の V	IHOT(2)	加熱・冷却区間の開始ノード番号と終了ノード番号
OMEGA(NG, IX, JR)	質量分率	IVWL(2)	吹き出し流れ区間の開始ノード番号と終了ノード番号
T(IX, JR)	無次元温度	NSIMP	= 1 : SIMPLE法 = 2 : SIMPLER法 = 3 : SIMPLEST/ANL 法
DA(NG, IX, JR)	ダムケラ数	NGAS	気体成分数
RHO(IX, JR)	無次元密度	NTIME	時間繰り返し数
AMU(IX, JR)	無次元粘性係数	NEND	時間繰り返し計算の打ち切り回数 (= 1 なら定常計算)
CON(IX, JR)	無次元熱伝導率	ITER	繰り返し数
CP(IX, JR)	無次元定圧比熱	IEND	繰り返し計算打ち切り回数
DIFP(NG, NG IX, JR)	無次元多成分拡散係数	NPRTI	NPRTI 毎に出力する。
XMA(IX, JR)	平均分子量	NPRTN	時間繰り返し計算の中で, NPRTN 毎に出力する。
ALPHAP	圧力の緩和係数	RE	入口レイノルズ数
ALPHAU	U の緩和係数	SC	シュミット数
ALPHAV	V の緩和係数	GR	グラスホフ数
ALPHAO(NG)	質量分率の緩和係数	PR	プラントル数
RESP(3)	圧力方程式の最大残差, その x 方向ノード番号, r 方向ノード番号	IX, JR, NG	ディメンジョン数 (x, r, 成分)
RESU(3)	} RESPと同様		
RESV(3)			
REST(3)			



(2) DATAサブルーチン

記号	意味
NCR	一酸化炭素の燃焼反応の有無 = 1 なら有, = 0 なら無
NCR1	$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$ 反応の有無
NCR2	$C + O_2 \rightarrow CO_2$ 反応の有無
NCR3	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$ 反応の有無
DTAU	時間きざみ
TIN	入口温度 (°C)
PIN	入口圧力 (Pa)
TREF	参照温度 (°C)
PREF	参照圧力 (Pa)
TW	壁温 (°C)
OMGIN(NG)	入口各成分気体の質量分率
DIAM	等価直径 (m)
REW	壁レイノルズ数

(3) MESHサブルーチン

記号	意味
VOLS(IX, JR)	スカラーコントロールボリュームの体積
VOLU(IX, JR)	Uコントロールボリュームの体積
VOLV(IX, JR)	Vコントロールボリュームの体積

(4) BOUND サブルーチン

記号	意味
VWALL(IX)	壁面に垂直な速度

(5) BNDIP サブルーチン

記号	意味
XXO <sub>2</sub>	黒鉛酸化による腐食速度
XXCO <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub> による黒鉛腐食速度
FCOCO <sub>2</sub>	COとCO <sub>2</sub> の発生比
GNMF(NG)	流体側のモル分率
GNMW(NG)	壁面のモル分率
ACOE(6, 7)	連立方程式の係数
AMF(NG, IX)	壁面における質量流束

(6) SOLPサブルーチン

記号	意味
AHD(IX, JR)	} 圧力離散化式の各係数
AHU(IX, JR)	
AHR(IX, JR)	
AHL(IX, JR)	
AH(IX, JR)	
AHØ(IX, JR)	

(7) FACTU サブルーチン

記号	意味
AUU(IX, JR)	} U 離散化式の各係数
AUD(IX, JR)	
AUR(IX, JR)	
AUL(IX, JR)	
AU(IX, JR)	
BU(IX, JR)	

(8) FACTV サブルーチン

記号	意味
AVU(IX, JR)	V 離散化式の各係数
AVD(IX, JR)	
AVR(IX, JR)	
AVL(IX, JR)	
AV(IX, JR)	
BV(IX, JR)	

(9) CORP サブルーチン

記号	意味
PP(IX, JR)	無次元圧力補正值

(10) SOLT サブルーチン

記号	意味
ATU(IX, JR)	温度離散化式の各係数
ATD(IX, JR)	
ATR(IX, JR)	
ATL(IX, JR)	
AT(IX, JR)	
ATØ(IX, JR)	

(11) SOLOMG サブルーチン

記号	意味
AU(IX, JR)	$\omega$ 離散化式の各係数
AD(IX, JR)	
AR(IX, JR)	
AL(IX, JR)	
A(IX, JR)	
B(IX, JR)	
OMGTMP(NG, IX, JR)	質量分率の1時保管

(12) BULK サブルーチン

記号	意味
UCENT(IX)	中心での x 方向無次元流速
UB(IX)	バルク流速
TB(IX)	バルク温度
OMEGAB(NG, IX)	バルク質量分率
PHOB(IX)	バルク無次元密度
AMUB(IX)	バルク無次元粘性係数
CØNB(IX)	バルク無次元熱伝導率
CPB(IX)	バルク無次元定圧比熱
PRB(IX)	バルクプラントル数
NUB(IX)	ヌッセルト数 (バルク値)
REB(IX)	レイノルズ数 (バルク値)
GB(IX)	質量流量 (kg/s)
XRE(IX)	$= \frac{x}{a} / Re$
XREPR(IX)	$= \frac{x}{a} / (RePr)$
XRESC(NG, IX)	$= \frac{x}{a} / (ReSc_k)$
SHB(NG, IX)	シャーウッド数 (バルク値)
FRIC(IX)	圧力に基づくまさつ係数
FTAU(IX)	せん断応力に基づくまさつ係数
DPTOT	出入口圧損

## (13) PROPサブルーチン

記号	意味
OMG (7)	質量分率
GNM (7)	モル分率
XMM	平均分子量
D2(7,7)	2成分拡散係数
DM(7,7)	多成分拡散係数
RHO	混合気体の密度
VIS	混合気体の粘性係数
CND	混合気体の熱伝導率
CP	混合気体の定圧比熱
D211N(NG)	2成分拡散係数: $D^{(2)}_{He/k}$
XM(7)	成分気体の分子量

尚, NGは, 成分気体の数のディメンジョン数である。