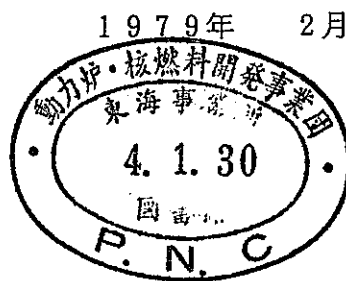


Purex プロセス計算コード
Revised MIXSET

CALCULATION CODE REVISED MIXSET
FOR PUREX PROCESS



動力炉・核燃料開発事業団
東海事業所

TOKAI WORKS

Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation

Purex プロセス計算コード
Revised MIXSET

CALCULATION CODE REVISED MIXSET
FOR PUREX PROCESS

February 1979

動力炉・核燃料開発事業団

東海事業所

TOKAI WORKS

POWER REACTOR & NUCLEAR FUEL DEVELOPMENT CORPORATION

複製あるいは入手については、下記にお問い合わせください。

茨城県那珂郡東海村 〒319-11

動力炉・核燃料開発事業団

東海事業所技術部研究管理課 ☎ 東海(02928)2-1111 内線 238

Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation

Enquiries about copyright and reproduction should be addressed to ;

Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel Development
Corporation,

Tokai, Ibaraki, Post No 319-11, Japan.

Purex プロセス計算コード Revised MIXSET

CALCULATION CODE REVISED MIXSET FOR PUREX PROCESS

実施責任者 権 田 浩 三^{*}
報告者 権 田 浩 三^{*}
岡 紘 一 郎^{*}
福 田 章 二^{**}

要 旨

Revised MIXSET は、さきに開発された MIXSET (PNCT 841-77-60) の機能に次の機能を付加し、改良した計算コードである。

すなわち、Purexプロセスで起こる主要な化学反応、

- (1) Pu (IV) の還元反応 (U (IV) または HAN による)
- (2) Pu (III) の再酸化反応 (HNO₂ による)
- (3) U (IV) の酸化反応 (HNO₂ と O₂ による)
- (4) HNO₂ の分解反応 (N₂H₄ と HAN による)

の各速度式が本コードに組込まれており、これらの反応による抽出器内での各化学種の増減を考慮したシミュレーションを行なえるようにした。この機能により、次に示すような利用法が新たに可能となった。

- (1) 流量、濃度などの条件変更に対応した計算ができる。
- (2) N₂H₄ が不足した場合など、化学種の増減を折込んだ誤操作試験のシミュレーションが行なえる。
- (3) 各反応化学種の反応後の物質収支が得られる。
- (4) 還元剤として HAN を用いる Purex プロセスのシミュレーションが行なえる。

本報告は、内容的にみて MIXSET とかなり重複する部分もあるが、解法の一部を変更したこともあるため、全内容を詳細に記述した。

* 再処理建設所工務部試験課

** CRC (センチュリ・リサーチ・センター)

Feb. 1979

CALCULATION CODE REVISED MIXSET FOR PUREX PROCESS

Kozo GONDA*, Koichiro OKA* and Shoji FUKUDA**

Abstract

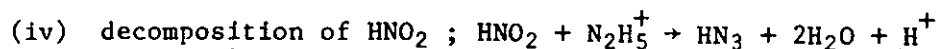
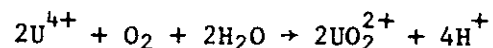
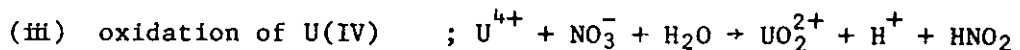
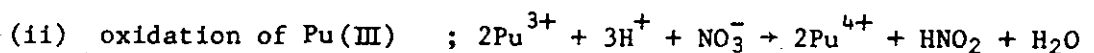
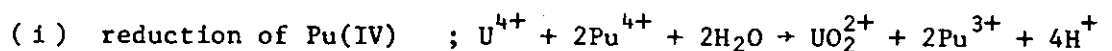
Revised MIXSET is a FORTRAN IV calculation code developed to simulate steady and transient behaviors of the Purex extraction process and calculate the optimum operating condition of the process.

Revised MIXSET includes all the functions of MIXSET code as shown below.

- a) Maximum chemical system of eight components can be handled with or without mutual dependence of the distribution of components.
- b) The flowrate and concentration of feed can be renewed successively at any state, transient or steady, for searching optimum operating conditions.
- c) Optimum inputs of feed concentrations and flowrates can be calculated to satisfy both of specification and recovery rate of a product.
- d) Radioactive decay reactions can be handled on each component.

Besides these functions, the following chemical reactions concerned in Purex process are newly-included in Revised MIXSET code and the quantitative changes of components such as H^+ , U(IV), U(VI), Pu(III), Pu(IV), NH_2OH , N_2H_4 can be simulated.

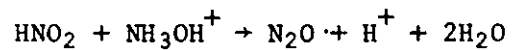
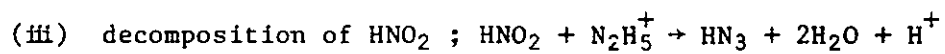
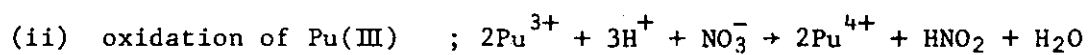
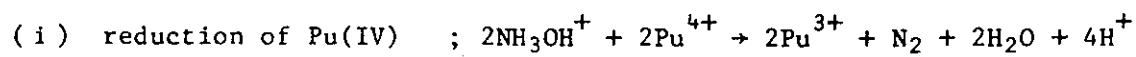
1st Gr.



* Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation, Tokai, Ibaraki, 319-11, Japan

** Century Research Center, Nihonbashi 3-2, Chuo-Ku, Tokyo, 103, Japan

2nd Gr.



目 次

1. まえがき	1
2. 抽出工程のモデル化	3
2.1 抽出 Bank の構成	3
2.2 Stage (段) の構造	4
3. 計算モデルの設定	5
3.1 流 量	5
3.2 分配平衡	6
3.3 段効率	7
3.4 化学反応	9
3.5 物質収支式	15
4. 分配係数の設定	20
4.1 Purex 法における分配係数	20
4.2 一般の場合の分配係数の与え方	22
4.3 MIXSET に組み込まれている平衡定数	22
5. 供給液入力の最適化	28
5.1 問題の定式化	28
5.2 最適化の方法	29
6. 数値解法	31
6.1 過渡計算	31
6.2 定常計算	35
6.3 最適化の手順	46
7. 入力仕様	47
7.1 Free Format 入力について	47
7.2 入力カードの説明	47
8. プログラムについて	58
9. 本文中に使用されている記号	61
10. あとがき	62
11. 参考文献	63

付 録

付録 1	ミキサ・セトラ内におけるPurexプロセス諸反応	65
付録 2	プログラムリスト	95
付録 3	計算例	201

1. ま え が き

Revised MIXSET コードは、MIXSET (PNCT 841-77-60) に Purex 法プロセスの分配工程とプルトニウム精製工程におけるプルトニウムの化学反応を取り扱えるように修正を加えたコードである。計算時間を少なくするために過渡計算の解法を一部修正した。その他にも計算効率化のためプログラムに改良が加えられたが、Revised MIXSET Version は既存の MIXSET コードの機能をそのまま残してあるので、本報告書では Revised コードを MIXSET コードと呼ぶことにする。

MIXSET は、Mixer-Settler 型の連続抽出器を用いた溶媒抽出工程の動的状態 (Transient State) 及び定常状態 (Steady State) 計算と各種供給液について流量と濃度の最適化計算が行なえるコードである。

プログラムは動燃東海の再処理プラント用に開発されたため、Purex 法プロセスの解析に重点がおかれているが、一般の抽出工程への応用も可能である。

MIXSET では溶媒として向流する水相液と有機相液が考慮され、有機相中に抽出剤 (Purex 法の場合 TBP) が存在する。抽出成分としては最大 8 個まで扱うことが可能である。溶媒相互間の溶解はないと仮定し、成分濃度の違いによる溶媒の体積変化もないものとする。抽出成分の 2 相間への分配は分配係数によって定義される。分配係数が成分濃度に依存することは可能であるが、水相濃度のみの関数で表わされなければならない。

バンク数は 3 個まで、段数は 50 段まで設定することができ、水相、有機相の供給液は 15 個まで任意の段へ入力が可能である。供給液の流量、濃度ともに時間変化入力が可能である。有機相流は 1 段から最上段へ、水相流はその逆向きに流れる。各段、各成分毎に段効率を指定できる。

化学反応として Pu(IV) の U(IV) または HAN^{*} による還元反応を取り扱うことができる。この場合、抽出成分は H⁺, U(VI), Pu(IV), Pu(III), U(IV) または HAN, HNO₂, Hydrazine に固定され、分配係数も特に指定されないならばプログラムに組み込まれている値が使用される。化学反応としては、一定の反応定数による“1 次反応”を反応物と生成物という組み合わせで考慮することも可能である。

計算は各段内の Mixer と Settler の水相および有機相濃度を 1 点で近似する“集中定数化法”で行なわれる。定常状態の濃度分布はこれら各段の濃度点の非線型連立方程式を解くことで得られる。動的挙動は各段の成分濃度の微分方程式によって表現され、これらの連立微分方程式は差分法によって解かれる。

* HAN = Hydroxylamine nitrate, NH₂OHNO₂

入力は Free Format 入力で行なわれ、必要な項目だけ入力すればよい。詳細な入力データリストがプリントされる。

出力としては、入力データリストの他に、指定された時間の各段における各成分の水相と有機相濃度がプリントされる。化学反応がある場合、定常状態における反応の物質収支表が得られる。また Calcomp 1136 によるプロッター出力もあり、成分濃度の経時変化、任意の時間における濃度プロファイルが得られる。

2. 抽出工程のモデル化

2.1 Bank の構造

MIXSET では3個までの Bank の抽出プロセスを取扱うことが可能である。各 Bank の連結は Bank 1 → Bank 2 → Bank 3 へ流れる有機相流により行なわれる。つまり、

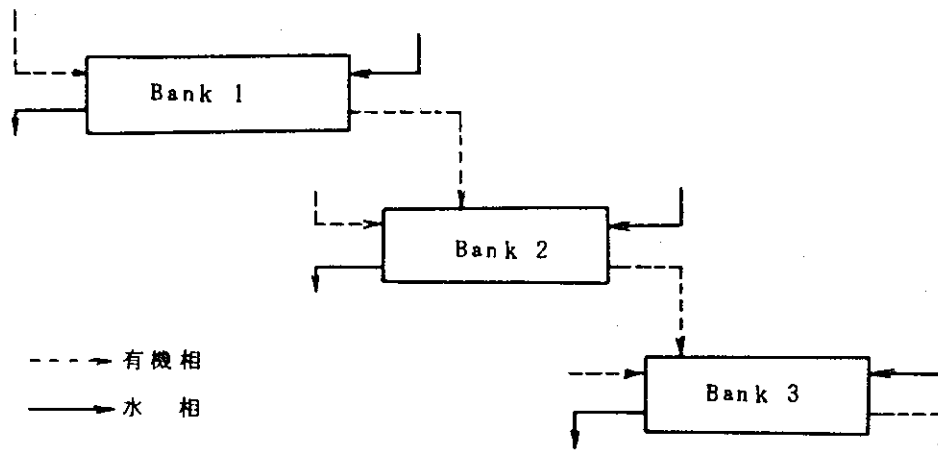


図 2.1 Bank 間の流れ

各 Bank は1段～25段までの Stage より構成されており、Bank 1, 2 からの有機相流はそれぞれ Bank 2, 3 の任意の段へ入力可能である。また供給液は水相、有機相ともに各 Bank の任意の Stage へ入力ができる。ただし各 Bank の両端には必ず供給液入力が必要である。MIXSET では、有機相は Stage 番号の小さい方から大きい方へ Stage 間を流れ、水相はその逆の順に流れる。

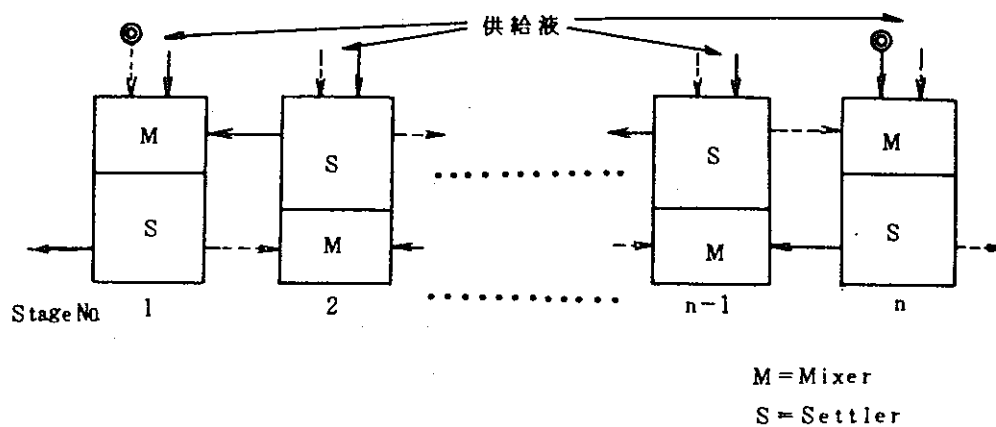


図 2.2 Bank 内の流れ

図 2.2 のように Stage 1 には有機相入力, Stage n には水相入力が必要である。Stage 1 の有機相流は前の Bank の出力でもよい。

2.2 Stage の構造

実際の Mixer-Settler の Stage の構造は非常に複雑であるため, これを忠実に表現するのは困難であり, 実用的でもない。ここでは従来のコードと同様に Stage を Mixer と Settler の 2 室に分ける方法によった。

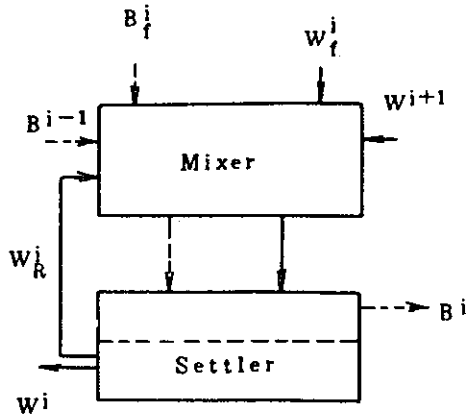


図 2.3 Stage i 内の流れ

図 2.3 において Mixer 部では有機相と水相は完全混合しており, 各相の容積は流量比に等しい。

$$h_s^i = h^i \frac{W^{i+1} + W_f^i + W_R^i}{W^{i+1} + B^{i-1} + W_f^i + B_f^i + W_R^i} \dots\dots\dots (2.1)$$

$$h_o^i = h^i - h_s^i \dots\dots\dots (2.2)$$

Settler 部においては有機相と水相は完全に分離している。しかし各相内では完全に混合されている。両相の容積比は界面レベルにより決定される。

$$H_s^i = H^i \cdot L_1(t) \dots\dots\dots (2.3)$$

$$H_o^i = H^i - H_s^i \dots\dots\dots (2.4)$$

3. 計算モデルの設定

3.1 流量

MIXSET で取扱う水相、有機相はともにそれぞれ逆向きの一方向のみに流れる。

Mixer 内及びSettler 各相内において、完全混合状態が仮定されているが、流れは“完全押し出しモデル (Push-out)” によって計算される。このモデルによって流量可変をとり扱うことは困難であり、誤差が大きく、使いものにならない可能性がある。しかし抽出工程の動特性解析において、供給液の時間変化入力を省くことは現実的でないということと、“単純押し出しモデル”以外の計算法は複雑すぎるという2点から暫定的にこの計算法を組み込む。

各Bank への供給液入力はその段へ入れることも可能であり、Inlet, Feed flow という区別をつけない。供給液は最大 15 ブロックまで可能である。

3.1.1 Stage 間の流れ

流れは押し出し式と仮定したので、Stage間の流量は供給液入量だけに依存する。界面レベルの変動が無い場合、

$$W^i(t) = W^{i+1}(t) + W_f^i(t) \quad (i = 1 \sim N-1) \quad \dots\dots\dots (3.1)$$

$$B^i(t) = B^{i-1}(t) + B_f^i(t) \quad (i = 2 \sim N) \quad \dots\dots\dots (3.2)$$

$$W^N(t) = W_f^N(t) \quad \dots\dots\dots (3.3)$$

$$B^1(t) = B_f^1(t) \quad \dots\dots\dots (3.4)$$

ここで、 $W^i(t)$, $B^i(t)$ とは Stage i の Settler 部を流出する量であり、 $W_f^i(t)$, $B_f^i(t)$ は入力される供給液流量なので既知である。(3.1) 式は、 $i = N \sim 1$ 、(3.2) 式は $i = 1 \sim N$ についての漸化式として、任意の時間で計算される。Bank 2, 3 において、Bank 1, 2 からの有機相流はすでに計算されており、これらは供給液と同様に処理される。

3.1.2 界面レベル変動による流量変化

Stage i において時間 $t = t \sim t + \Delta t$ 間に図 3.1 に示すようなレベル変化があると、

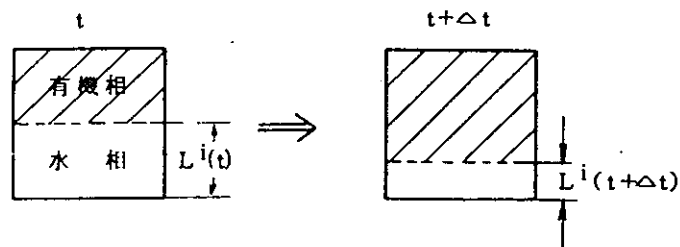


図 3.1 Settler 部の界面レベル変化の模式図

Settler 部の有機相は、次に示す F の割合で増加する。

$$F = \frac{L^i(t + \Delta t) - L^i(t)}{\Delta t} \cdot H_s^i \quad (\text{単位例 } \ell/\text{hr})$$

しかし、流入量は一定であるから流出量が減少することとなる。ここでレベル変化がないとして (3.1) (3.2) 式で計算したものに [·] をつけて表わすと、流量はそれぞれ

$$W^i(t + \Delta t) = W^i(t + \Delta t)' + F \quad \dots\dots\dots (3.5)$$

$$B^i(t + \Delta t) = B^i(t + \Delta t)' - F \quad \dots\dots\dots (3.6)$$

平均流量は、

$$W^i(t_{av}) = \{ W^i(t)' + W^i(t + \Delta t)' \} \cdot 0.5 + F$$

$$B^i(t_{av}) = \{ B^i(t)' + B^i(t + \Delta t)' \} \cdot 0.5 - F$$

F について、有機相は $i \sim N_s$ 段まで、水相は $i \sim 1$ 段まで同じ効果を与える。

3.2 分配平衡

溶媒抽出工程は各抽出成分の分配係数の差によって、各成分を分配するので、分配平衡データの扱いは重要な因子となる。ここでは MIXSET コード内における分配平衡の定義を明らかにしておく。コード中では分配係数 D が抽出成分の水相濃度と有機相濃度とを関連させる。もちろん実際の抽出工程において、各成分ともに水相と有機相との間に分配平衡が完全に成立していることはまれであるが、本報告で述べる分配係数は平衡状態における抽出成分の水相と有機相の濃度比を表わしている。分配係数は共存する成分の水相濃度によって表わされるものとする、つまり

$$D = \frac{y}{x}$$

$$D = f(x_1, x_2, \dots, x_N)$$

(1 ~ N は共存する成分番号)

分配係数 D は温度によっても変化するが、MIXSET コードでは温度依存の項は含まれない。分配係数が水相濃度のみの関数としたのは、数値解法上の問題によるものである。これによって、ある種の問題に対しては計算手順が簡潔になり、計算時間が短縮されるが、原則的にはこれに拘束はされない。

分配係数 D の表現法によって成分のタイプが決定される。つまり、Interactive (Macro) と Micro 成分に分類される。ここで、

Interactive 成分とは成分濃度がお互いに他の成分の分配係数へ影響をおよぼしている成分を示す。1 成分のみの場合でも分配係数が自分自身の濃度に依存するならば Interactive となる。

Micro 成分とは分配係数が自分自身の濃度とは無関係に決められる成分を示す。

具体例として、ここで 4 種の成分 A, B, C, D を仮定し、それらの分配係数 D_A, B_B, D_C, D_D が

$$D_A = f(X_A, X_B, X_C)$$

$$D_B = f(X_B)$$

$$D_C = f(X_A, X_B)$$

$$D_D = f(X_A)$$

のように表わされるとすると、成分A,B,CはInteractive，成分DはMicroとなる。一般に分配係数の関数は非線型方程式になるので、濃度分布を求める際、Interactive成分については反復計算が必要となる。

定常計算および過渡計算において、各Mixer内の水相と有機相の濃度比は分配平衡の状態からのずれ(段効率)によって表わされる。そしてこのような分配状態への到達速度は非常に大きいと仮定される。つまり、定常状態であれ過渡状態であれ、あらゆる時間のMixer部における水相と有機相の濃度比は分配係数と段効率によって計算されることを意味する。

3.3 段効率

Mixer-Settler 抽出器における段効率については、多くの場合Murphreeの段効率が適用されている。しかしこれらは定常状態における適用がほとんどであり、過渡状態においては適用例が少ない。他の定義がないので、過渡計算についてもMurphree段効率を応用する。化学反応に関与する成分については段効率の定義はできない。つまり段効率はすべて1となる。化学反応に関与しないその他の成分については各段毎に段効率を指定できる。

3.3.1 定常計算におけるMurphree段効率

段効率は水相又は有機相どちらかの濃度によって定義される。以下にStage iについて考える(成分インデックスは省略)。

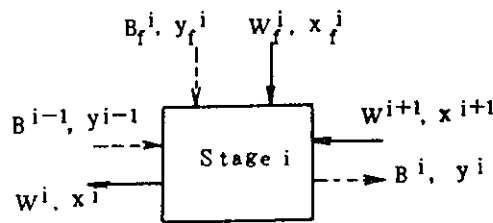


図 3.2 定常時の i 段のバランス

有機相について :

$$E_f = \frac{y^i - y_{in}}{y^* - y_{in}} \dots\dots\dots (3.7)$$

$$y^* = D^i x^i \dots\dots\dots (3.8)$$

$$y_{in} = \frac{B^{i-1} y^{i-1} + B_f^i y_f^i}{B^i} \dots\dots\dots (3.9)$$

水相について :

$$E_t = \frac{x^i - x_{in}}{x^* - x_{in}} \dots\dots\dots (3.10)$$

$$x^* = \frac{y^i}{D^i} \dots\dots\dots (3.11)$$

$$x_{in} = \frac{W^{i+1} x^{i+1} + W_t^i x_t^i}{W^i} \dots\dots\dots (3.12)$$

どちらの相濃度についての段効率を定義するかにより、濃度分布が異なるので注意を要する。MIXSET コードではどちらの段効率も取扱い可能である。成分毎に定義を変えることも可能である。

Stage i におけるマスバランス式は (インデック i を省略) ,

$$W \cdot x + B \cdot y = W \cdot x_{in} + B \cdot y_{in} \dots\dots\dots (3.13)$$

となる。以上の (3.7) ~ (3.12) 式の関係を図示すると,

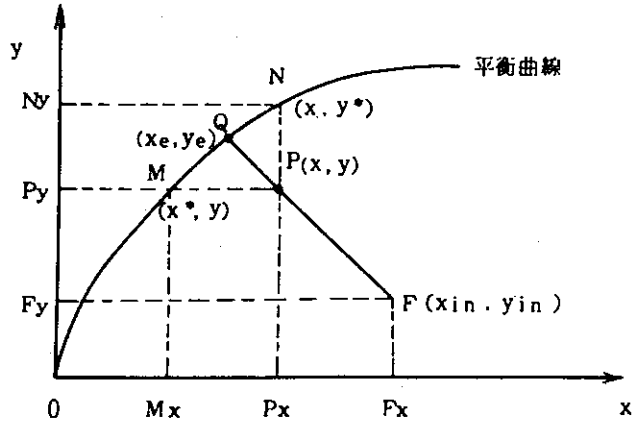


図 3.3 段効率の図示

$$E_t = \frac{\overline{F_x P_x}}{\overline{F_x M_x}} \quad (\text{水相について})$$

$$E_t = \frac{\overline{F_y P_y}}{\overline{F_y N_y}} \quad (\text{有機相について})$$

$$\overline{QPF} : y = -\frac{W}{B} x + \frac{(W \cdot x_{in} + B \cdot y_{in})}{B} \dots\dots\dots (3.14)$$

となる。

3.3.2 過渡計算における Murphree 段効率

過渡状態においても時間 t を考慮して (3.7) と (3.10) 式同様に段効率を定義する。

有機相について :

$$E_f = \frac{y^i(t) - y_{in}}{y^* - y_{in}} \dots\dots\dots (3.15)$$

$$y^* = D^i(t) X^i(t) \dots\dots\dots (3.16)$$

$$y_{in} = \frac{B^{i-1}(t_{av}) \cdot y_S^{i-1}(t - \Delta t) + B_f^i(t_{av}) \cdot y_f^i(t_{av})}{B^i(t_{av})} \dots (3.17)$$

t_{av} はタイムステップの平均値である。

$$\left[\begin{array}{l} t_{av} = t - \frac{\Delta t}{2} \\ \Delta t : \text{タイムステップ} \end{array} \right]$$

水相について :

$$E_f = \frac{x^i(t) - x_{in}}{x^* - x_{in}} \dots\dots\dots (3.18)$$

$$x^* = \frac{y^i(t)}{D^i(t)} \dots\dots\dots (3.19)$$

$$x_{in} = \frac{W^{i+1}(t_{av}) \cdot x_S^{i+1}(t - \Delta t) + W_f^i(t_{av}) \cdot x_f^i(t_{av})}{W^i(t_{av})} \dots\dots (3.20)$$

さて、これらの定義の中で問題となるのが (3.17) または (3.20) 式の入力参照濃度 (x_{in} と y_{in}) である。Stage i における時間 $t \sim t + \Delta t$ 間のマスバランスは 3.5 より、

$$\begin{aligned} & (h_a^i + W_{av}^i \frac{\Delta t}{2}) x^i(t) + (h_o^i + B_{av}^i \frac{\Delta t}{2}) y^i(t) \\ &= W_{fav}^i \cdot x_{fav}^i + B_{faw}^i \cdot y_{faw}^i + B_{av}^{i-1} \cdot y_S^{i-1}(t - \Delta t) + W_{av}^{i+1} \cdot x_S^{i+1}(t - \Delta t) \\ &+ (h_a^i - W_{av}^i \frac{\Delta t}{2}) x_m^i(t - \Delta t) + (h_o^i - B_{av}^i \frac{\Delta t}{2}) y_m^i(t - \Delta t) \end{aligned} \dots\dots\dots (3.21)$$

となる。定常状態の (3.14) 式と比べると、右辺の $x_m^i(t - \Delta t)$ と $y_m^i(t - \Delta t)$ を含む項があることが大きく異なる。 $\Delta t = h_a / W_{av} \times 2$ とすればこれらの項は無くなるが、通常は $\Delta t \leq h_a / W_{max}$ とされるので、 $x_m(t - \Delta t)$ 、 $y_m(t - \Delta t)$ を除外した (3.17) (3.20) 式の定義は定常状態の定義とは若干内容が異なる。しかし、過渡計算に Murphree の段効率を適用することの妥当性も検討していない現状では、あまり複雑な計算手順をプログラミングすることが、計算結果と実験値との良い適合をもたらすとは限らない。ここでは MIXSET コードは従来通り (3.15) ~ (3.21) 式の定義を使用する。過渡計算における段効率の定義は今後の検討課題として残す。

3.4 化学反応

Purex 法による核燃料再処理工程では、Pu(IV) が Pu(III) に還元されて、ウランとの分離が行なわれる。PNC プラントでは分配工程とプルトニウム精製工程においてこの還元反応が行なわれている。これらの工程では、Pu(IV) の還元反応だけが起こるものではなく、他の反応と組み合わせ

て起こる。反応には酸の発生あるいは消滅が必ず起こり、バンク内の酸濃度が変化して他の成分の分配値に大きな影響を与える。また還元剤としてU(IV)を用いた場合のU(IV)とU(III)の割合も重要因子となる。このように、Purex法におけるPu還元反応には種々の要素がからみ合っており、従来のMIXSETでPu(IV)のPu(III)への還元反応を1次反応として取り扱っていたのでは、Pu-U混合抽出法などの問題には十分に対応できない。Revised MIXSETではこれらを考慮して、Purex法におけるPu還元反応とその周辺で起こる諸反応のメカニズムの取り扱いを実際の抽出工程での反応に十分対応できるように改良を行った。反応メカニズムとしては、還元剤としてU(IV)を使う場合とHAN(Hydroxylamine nitrate)を使う場合の2種を用意してある。どちらの場合にも安定剤としてヒドラジンの添加が考慮されている。また従来の1次反応による取り扱いもそのまま可能である。

以下に分配工程とプルトニウム精製工程で起こる諸化学反応と反応速度について説明するが、詳細は付録1に記載した。

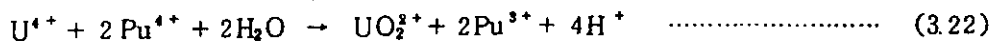
3.4.1 Pu(IV)-U(IV)反応

反応成分として、8成分即ち、

- 1 H⁺
- 2 UO₂²⁺
- 3 Pu⁴⁺
- 4 Pu³⁺
- 5 U⁴⁺
- 6 HNO₂
- 7 N₂H₅⁺
- 8 NO₃⁻

を考慮し、化学反応としては以下の5個を考慮する。

① Puの還元反応

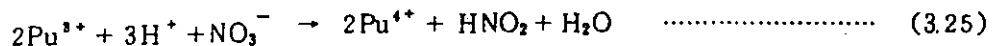


反応速度式は、

$$\text{水相で、} \quad -\frac{d(Pu(IV))}{dt} = 1.5 \times 10^3 \times \frac{[U(IV)][Pu(IV)]}{[H^+]^2} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad (3.23)$$

$$\text{有機相で、} \quad -\frac{d(Pu(IV))}{dt} = 6.5 \times \frac{[U(IV)][Pu(IV)]}{[H^+]^2} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.24)$$

② Pu(III)の再酸化反応



反応速度式は、

水相で, $[\text{HNO}_2] \geq 2.3 \times 10^{-2} \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.5 \times 10^{-2} [\text{Pu(III)}] \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.26)$$

$10^{-4} \text{ M} \leq [\text{HNO}_2] < 2.3 \times 10^{-2} \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 10^{-(1.3 \log_{10} [\text{H}^+] + 0.54)} [\text{Pu(III)}] [\text{HNO}_2]^{(0.44 - \log_{10} [\text{H}^+])} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.27)$$

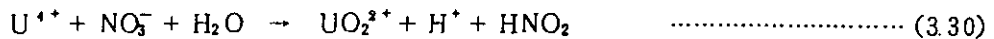
$[\text{HNO}_2] < 10^{-4} \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.1 \times 10^{-2} [\text{Pu(III)}] [\text{H}^+]^{1.8} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.28)$$

有機相で,

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 1.5 \times 10^{-1} [\text{Pu(III)}] [\text{HNO}_2] [\text{H}^+]^{3.1} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.29)$$

③ U(IV)のHNO₂酸化反応



反応速度式は,

水相で, $[\text{H}^+] < 0.8 \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{U(IV)}]}{dt} = 2.5 \times 10^{-2} [\text{U(IV)}] [\text{HNO}_2]^{0.38} [\text{H}^+]^{2.7} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.31)$$

$[\text{H}^+] \geq 0.8 \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{U(IV)}]}{dt} = 1.3 \times 10^{-2} [\text{U(IV)}] [\text{HNO}_2]^{0.38} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.32)$$

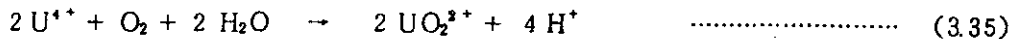
有機相で, $[\text{H}^+] \leq 0.34 \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{U(IV)}]}{dt} = 1.6 \times 10^{-2} [\text{U(IV)}] [\text{HNO}_2]^{0.49} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.33)$$

$[\text{H}^+] > 0.34 \text{ M}$ のとき

$$-\frac{d[\text{U(IV)}]}{dt} = 4.0 \times 10^{-2} [\text{U(IV)}] [\text{H}^+]^{0.63} [\text{HNO}_2]^{0.49} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.34)$$

④ U(IV)の空気酸化反応



反応速度式は,

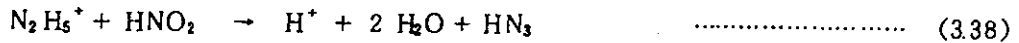
水相で,

$$\frac{d[\text{U(IV)}]}{dt} = 2.5 \times 10^{-4} \frac{[\text{U(IV)}]}{[\text{H}^+]} \quad (\text{mol/l}\cdot\text{min}) \quad \dots\dots\dots (3.36)$$

有機相で、

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = 3.2 \times 10^{-3} \frac{[U(IV)]}{[H^+]^{0.86}} \text{ (mol/l}\cdot\text{min)} \quad \dots\dots\dots (3.37)$$

⑥ HNO₂の分解



反応速度式は、

水相で、

$$-\frac{d[HNO_2]}{dt} = 3.7 \times 10^4 [H^+] [HNO_2] [N_2H_5^+] \text{ (mol/l}\cdot\text{min)} \quad \dots (3.39)$$

有機相では N₂H₅⁺が抽出されないので反応は起こらない。

以上の5個の反応はすべて Mixer部, Settler 部両方で起こるものとする。反応②, ③では硝酸根 NO₃⁻が関与しているが、後述する物質収支式には NO₃⁻を含めないものとする。なぜならば水相中の NO₃⁻濃度 x_{NO₃} は

$$x_{NO_3} = x_H + 2x_{UO_2} + 4x_{Pu^{4+}} + 3x_{Pu^{3+}} + 4x_{U^{4+}} + x_{N_2H_5^+} \quad \dots\dots\dots (3.40)$$

と計算されるのに対して、(3.25)式の場合、左辺の陽電荷数が9、右辺が8なので、反応によって硝酸根が減少していることを表わしているからである。また O₂, HN₃, H₂O についても物質収支から除外する。

Purex 法の Normal Flow Sheet では、還元されるべき Pu(IV) 電対に対し、大過剰 (6~7倍当量) の U(IV) とヒドラジン (安定剤) が供給されており、反応②, ③が主反応になることはない。反応⑥の (3.39) 式の数値定数 k=3.7×10⁴ という値は他に比べ非常に大きいので、反応②, ③によって生じた亜硝酸はほとんどすべて瞬間的に消滅することになる。数値解法上、(3.39) 式のような大きい速度式を微分方程式にそのまま組み込むことは好ましくなく、タイムステップの縮小、収束計算の発散等の原因になる。Revised MIXSET ではこれらの点を考慮して、ヒドラジンが亜硝酸よりも多い場合には、(3.25) (3.30) 式によって生じた亜硝酸がすぐ消滅することにし、(3.39) 式の数値定数を直接解くことはない。このため、ヒドラジンが十分供給されている場合には、亜硝酸濃度は常にゼロとなり、反応②の (3.26), (3.27), (3.29) 式, 反応③の (3.31) ~ (3.34) 式は生じない。ヒドラジン供給量が発生した亜硝酸量より少ない場合、ヒドラジンとその当量の亜硝酸が消滅し、亜硝酸が残るので、亜硝酸は反応②, ③によって増加して行く。ヒドラジン供給が停止するような特殊なケースの計算も可能となる。

3.4.2 Pu(IV) - HAN 反応

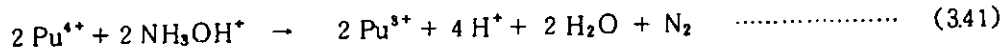
反応成分は、

- 1 H⁺
- 2 UO₂²⁺

- 3 Pu⁴⁺
- 4 Pu³⁺
- 5 NH₃OH⁺
- 6 N₂H₅⁺
- 7 HNO₂

の7成分とし、以下の4個の反応を考慮する。

① Pu(IV)のHAN還元反応



反応速度式は、

水相で、

$$\frac{d [\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{6.5 [\text{Pu(IV)}]^2 [\text{NH}_3\text{OH}^+]^2}{[\text{Pu(III)}]^2 [\text{H}^+]^4 [1 + 4.3[\text{NO}_3^-]]^2} \quad (\text{mol}/\ell \cdot \text{min}) \quad \dots (342)$$

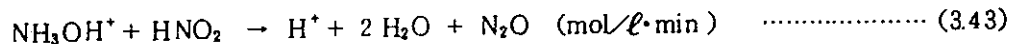
有機相では、HANが抽出されないので反応は起こらない。

② Pu(III)の再酸化反応

③ N₂H₄によるHNO₂の分解反応

②③は3.4.1の反応②、⑤と同じなので省略する。

④ HANによるHNO₂の分解反応



反応速度式は、

水相で、

$$-\frac{d [\text{HNO}_2]}{dt} = 3.2 \times 10^2 [\text{HNO}_2] [\text{NH}_3\text{OH}^+] [\text{H}^+] \quad (\text{mol}/\ell \cdot \text{min}) \quad \dots (344)$$

有機相では、HANが抽出されないので反応は起こらない。

ここで、

$$[\text{NO}_3^-] = [\text{H}^+] + 2 [\text{UO}_2^{2+}] + 4 [\text{Pu}^{4+}] + 3 [\text{Pu}^{3+}] + [\text{NH}_3\text{OH}^+] + [\text{N}_2\text{H}_5^+] \quad \dots (345)$$

亜硝酸の分解反応の扱いは3.4.1と同じとする。亜硝酸は反応④によってHANとも反応するが、ヒドラジンの反応の方が100倍以上も速いので、ヒドラジン—亜硝酸反応が優先する。亜硝酸の生成量がヒドラジンの供給量より大きい場合のみ、過剰分の亜硝酸がHANと反応することになる。例えば、反応④によってΔHNO₂の亜硝酸が生じたとすると、これに当量のヒドラジン(ΔH_{yd})とHAN(ΔHAN)が消滅する。

$$\left. \begin{aligned} \Delta H_{yd} &= \text{Min}(\Delta \text{HNO}_2, \Delta F_{H_{yd}}) \\ \Delta \text{HAN} &= \text{Max}(0, \Delta \text{HNO}_2 - \Delta H_{yd}) \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (346)$$

ここで、ΔF_{H_{yd}} = ヒドラジンの供給量

となる。

3.4.3 1次反応メカニズム

これは従来から MIXSET コードに組み込まれている機能であり、成分は固定されない。1次反応であるから、反応物(R)、生成物(P)を定義する。



反応速度定数 k_R, k_P は水相、有機相のそれぞれについて与えられる。

$$-\frac{d[R]}{dt} = k_R [R] \dots \dots \dots (3.48)$$

$$-\frac{d[P]}{dt} = k_P [P] - k_R [R] \dots \dots \dots (3.49)$$

生成物を考慮しない反応物の消滅反応だけでも可能である。成分は1つの反応の生成物か反応物のうち1つしか選択できない。MIXSET では8成分まで取り扱いが可能であるので、(3.47)式のような反応が2つ以上存在してもかまわないが(最大4個)、これらの反応の各成分が相互に関連してはいけない。1次反応はMixer, Settlerの両方で起こる。

この反応の適用例としては、



のような放射性物質の崩壊反応が適当であろう。3.4.1, 3.4.2 で扱われた Purex 法のPu還元反応においても、通常運転では還元剤と安定剤は十分に供給されているので、Pu(IV)の反応速度式を近似的に

$$-\frac{d[Pu(IV)]}{dt} = k [Pu(IV)] \dots \dots \dots (3.51)$$

と仮定することが可能であり、1次反応で十分に扱える。

(3.48), (3.49) 式の微分方程式が他の物質収支式と組み合わせられて、1つの微分方程式が作られるので、反応定数k (または崩壊定数)の大きさには注意をすることが必要である。

以上の通り、化学反応として種々の反応の速度式を提示したが、MIXSET コードではこれらの反応速度より溶媒抽出(または逆抽出)による2相間の物質移動の方が十分速いという仮定を設けている。つまり、どのような化学反応が存在したとしてもMixer部においては分配平衡、

$$y = D \cdot x$$

が成立していることにする。このため反応成分についての段効率の定義はできない。

Settler 部有機相においても化学反応を考慮しているが、反応によっては成分の電荷と抽出剤(TBP)配位数が変化するので、化学平衡論的にアンバランスな状態がこの相に生じることがある。しかし MIXSET コードはこのような詳細な平衡については考慮せず、各成分の物質収支のみに着目している。

3.5 物質収支の基本式

Mixer-Settler 型抽出器内の濃度分布を計算するモデルについては種々のタイプが考えられているが、Mixer, Settler 内の水相、有機相のそれぞれの濃度を均一とし、一点近似する集中定数化法による物質収支式の設定ということに関しては一致をみている。MIXSET コードにおいてもある 1 段内の濃度分布は Mixer 部の水相 (x_m)、有機相 (y_m)、Settler 部の水相 (x_s)、有機相 (y_s) の 4 点で代表されるので、 i 段目の物質収支は図 3.4 のように表わされる。

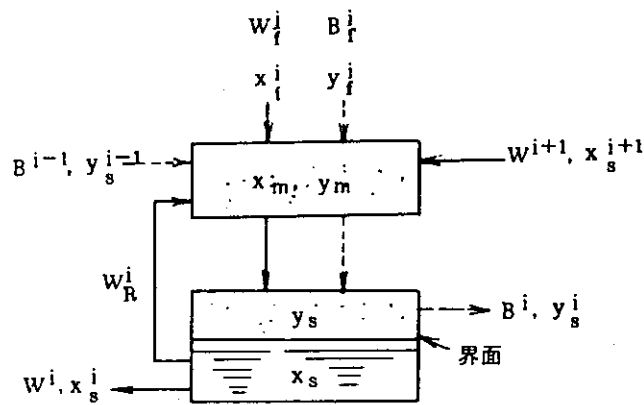


図 3.4 i 段内の物質収支

本報告では、物質収支式として、濃度分布の時間変化を計算する式と定常状態における濃度分布を計算する式とを独立に設定する。

3.5.1 過渡計算式

各段内濃度の時間変化を表わす方程式として、差分方程式モデル、微分方程式モデルおよび両者の組み合わせの 3 種が考えられる。通常、差分モデルでは Settler 部については方程式を設定せず、時間遅れ項を導入することで近似している。化学反応、流量変動を扱う場合、時間遅れでは表現できないので、MIXSET は微分方程式モデルを採用した。

供給液流量の時間変化によって、ステージ間流量、相容積も時間とともに変化するが、流れの扱いについては濃度とは独立に 3.1 に述べられた方法で計算されるので、抽出成分濃度のバランスを考慮する微小時間内においては、流量と体積は一定として扱われる。

Mixer, Settler 各相内の微小時間 dt における物質収支は、

$$\begin{aligned}
 (\text{ホールドアップ量の変化}) = & (\text{入力量}) - (\text{出力量}) + (\text{反応増分}) - (\text{反応減分}) \\
 & \dots\dots\dots (3.52)
 \end{aligned}$$

と表わされる。化学反応項については 3.4 のように複雑なので (取扱いについては 3.5.3 で説明する)、増分と減分をそれぞれ P と K (単位: mole/hr) で表わし、時間 t と成分 j のサブスクリプトを省略し、(3.52) 式を数式で表現すると、図 3.4 より、

Mixer 部では ;

$$h_a \frac{dx_m}{dt} + h_o \frac{dy_m}{dt} = W \cdot x_{in} + B \cdot y_{in} + W_R \cdot x_s - (W + W_R) \cdot x_m - B \cdot y_m + P_m - K_m \dots (3.53)$$

ここで,

$$W = W^{i-1} + W_f^i \dots (3.54)$$

$$B = B^{i+1} + B_f^i \dots (3.55)$$

$$x_{in} = \frac{W^{i+1} \cdot x_s^{i+1} + W_f^i \cdot x_f^i}{W} \dots (3.56)$$

$$y_{in} = \frac{B^{i-1} \cdot y_s^{i-1} + B_f^i \cdot y_f^i}{B} \dots (3.57)$$

である。

Settler 部水相では ;

$$H_a \frac{dx_s}{dt} = (W + W_R) \cdot X_m - (W + W_R) \cdot X_s + P_{sa} - K_{sa} \dots (3.58)$$

Settler 部有機相では ;

$$H_o \frac{dy_s}{dt} = B \cdot y_m - B \cdot y_s + P_{so} - K_{so} \dots (3.59)$$

と表わされる。(3.53) (3.58) (3.59) 式の微分方程式が段 1 ~ N_s について成立する。Mixer 部については、x_m と y_m の関係式が分配係数と段効率によって与えられ、y_m が方程式より消去される。段数 N_s、成分数 N_c とおくと、N_c × N_s × 3 個の未知数の非線型連立常微分方程式が成立する。ただし、非線型性は分配係数と反応項の関数型によるので、これらが線型の場合、方程式も線型となる。反応項については 3.5.3 で記述する。

3.5.2 定常状態計算式

定常時においては各段の各相内の濃度変化がないので、物質収支は

$$(\text{入力量}) - (\text{出力量}) + (\text{反応増分}) - (\text{反応減分}) = 0 \dots (3.60)$$

と表わされる。つまり過渡状態における計算式の微分項をゼロとおけば定常時の物質収支式が得られる。(3.53) ~ (3.59) 式より,

Mixer 部では ;

$$(W^i + W_R^i) \cdot x_m^i + B^i \cdot y_m^i = F^i + W^{i+1} \cdot x_s^{i+1} + B^{i-1} \cdot y_s^{i-1} + W_R^i \cdot x_s^i + P_{ma}^i + P_{mo}^i - K_{ma}^i - K_{mo}^i \dots (3.61)$$

ここで, $F^i = W_f^i \cdot x_f^i + B_f^i \cdot y_f^i$

Settler 部では ;

$$(W^i + W_R^i) \cdot x_s^i = (W^i + W_R^i) \cdot x_m^i + P_{Sa}^i - K_{Sa}^i \quad \dots\dots\dots (3.62)$$

$$B^i \cdot y_s^i = B^i \cdot y_m^i + P_{So}^i - K_{So}^i \quad \dots\dots\dots (3.63)$$

となる。成分サブスクリプト j は省略してあるが、(3.61)～(3.63)式が段 1～N_s、成分 1～N_C について成立する。化学反応項 P_{ma}ⁱ～K_{so}ⁱ については 3.5.3 を参照のこと。Mixer 部の式 (3.61) において有機相 y_{mj}ⁱ は分配係数と段効率によって水相濃度の関数として表わされるので、(3.61)～(3.63) 式は N_s×N_C×3 個の未知数の非線型連立方程式となる。

化学反応がない場合は、(3.62)、(3.63) 式より x_s=x_m、y_s=y_m となるから、Mixer 部のみのバランス式だけとなる。

$$W^i \cdot x^i + B^i \cdot y^i = F^i + W^{i+1} \cdot x^{i+1} + B^{i+1} \cdot y^{i+1} \quad \dots\dots\dots (3.64)$$

3.5.3 化学反応項の数式表現

3.5.1, 3.5.2 で使用された化学反応項 P_{ma}, P_{mo}, K_{sa}, K_{so} を定義する。これらの単位は過渡計算、定常計算どちらの場合にも mole/hr であるから、ここでの定義は両計算に共通となる。過渡計算においては、ある時間 t における反応割合を表わすものであり、各変数は時間 t における値となる。Mixer 部、Settler 部とも反応は共通であるから、ここでは水相反応 P_a, K_a, 有機相反応 P_o, K_o によって代表する。

I) Pu(IV)-U(IV)反応

成分番号を j = 1	H ⁺	} (3.65)
2	UO ₂ ²⁺		
3	Pu ⁴⁺		
4	Pu ³⁺		
5	U ⁴⁺		
6	HNO ₂		
7	N ₂ H ₅ ⁺		

とおき、反応①～④ (3.4.1 参照) の注目成分減少割合を (3.66) 式に定義する。

反応①	$\Delta P_1^a = \frac{k_{1a} \cdot x_5 \cdot x_3}{x_1^2}$	} (3.66)
	$\Delta P_1^o = \frac{k_{1o} \cdot y_5 \cdot y_3}{y_1^2}$		
反応②	$\Delta P_2^a = k_{2a} \cdot x_4$		
	$\text{or } k_{2a} \cdot 10^{-(1.3 \log X_1 + 0.54)} \cdot x_4 \cdot x_6^{(0.44 - \log X_1)}$ $\text{or } k_{2a} \cdot x_1^{18} \cdot x_4$		
	$\Delta P_2^o = k_{2o} \cdot y_1^{31} \cdot y_4$		
反応③	$\Delta U_3^a = k_{3a} \cdot x_5 \cdot x_6^{0.38} \cdot x_1^{2.7}$		

$$\begin{aligned}
 & \text{or } k_{3a} \cdot x_5 \cdot x_6^{0.38} \\
 \Delta U_3^0 &= k_{30} \cdot y_5 \cdot y_6^{0.49} \\
 & \text{or } k_{30} \cdot y_5 \cdot y_6^{0.49} \cdot y_1^{0.63} \\
 \text{反応④} \quad \Delta U_4^a &= \frac{k_{4a} \cdot x_5}{x_1} \\
 \Delta U_4^0 &= \frac{k_{40} \cdot y_5}{y_1^{0.86}} \quad (\text{mole/hr})
 \end{aligned}$$

化学反応式のバランスより、

$$\begin{aligned}
 P_a(1) &= 2 \Delta P_1^a + 0.5 \Delta P_2^a + \Delta U_3^a + 2 \Delta U_4^a \\
 K_a(1) &= 1.5 \Delta P_2^a \\
 P_a(2) &= 0.5 \Delta P_1^a + \Delta U_3^a + \Delta U_4^a \\
 K_a(2) &= 0 \\
 P_a(3) &= \Delta P_2^a \\
 K_a(3) &= \Delta P_1^a \\
 P_a(4) &= \Delta P_1^a \\
 K_a(4) &= \Delta P_2^a \\
 P_a(5) &= 0 \\
 K_a(5) &= 0.5 \Delta P_1^a + \Delta U_3^a + \Delta U_4^a \\
 P_a(6) &= 0 \\
 K_a(6) &= 0 \\
 P_a(7) &= -0.5 \Delta P_2^a \\
 K_a(7) &= 0 \quad (\text{mole/hr})
 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (3.67)$$

() 内に成分番号を示す。有機相 $P_o(j)$, $K_o(j)$ も同様であるから省略する。(3.67) 式にて・印は、反応②により生じた亜硝酸がヒドラジンにより分解された項を表わしている。(3.66) 式の各反応速度定数 (k_{1a} 等) には各段の相容積が含まれているとする。

II] Pu(IV)-HAN 反応

成分番号 $j = 5$ が HAN となる以外は (3.65) 式と同じである。反応② (3.4.2 参照) 以外は無機相で起こらないから、水相について I) と同様に注目成分減少割合を定義する。

$$\text{反応①} \quad \Delta P_1^a = \frac{k_{1a} \cdot x_3^2 \cdot x_5^2}{x_4^2 \cdot x_1^2 \cdot (1 + 4.3 x_{NO_2})^2} \quad (\text{mole/hr}) \quad \dots\dots\dots (3.68)$$

反応② (3.66) 式と同じである。

UO_2 ($j=2$) は反応とは無関係であるから除外すると、化学反応式のバランスより、

$$\begin{aligned}
 P_a(1) &= 2 \Delta P_1^a + 0.5 \Delta P_2^a \\
 K_a(1) &= 1.5 \Delta P_2^a \\
 P_a(3) &= \Delta P_2^a \\
 K_a(3) &= \Delta P_1^a \\
 P_a(4) &= \Delta P_1^a \\
 K_a(4) &= \Delta P_2^a \\
 P_a(5) &= - \frac{0.5 \Delta P_2^a \cdot k_{4a}}{(k_{3a} + k_{4a})^*} \\
 K_a(5) &= 0 \\
 P_a(6) &= 0 \\
 K_a(6) &= 0 \\
 P_a(7) &= - \frac{0.5 \Delta P_2^a \cdot k_{3a}}{(k_{3a} + k_{4a})^*} \\
 K_a(7) &= 0 \\
 P_O(3) &= \Delta P_2^O \\
 K_O(3) &= 0 \\
 P_O(4) &= 0 \\
 K_O(4) &= \Delta P_2^O \\
 P_O(6) &= 0.5 \Delta P_2^O \\
 K_O(6) &= 0
 \end{aligned}
 \tag{3.69}$$

(mole/hr)

他はすべてゼロである。・印の項は生じた亜硝酸が HAN とヒドラジンによって分解されることを表わしている。(3.68) 式の反応速度定数 k_{1a} には各段の相容積が含まれているとする。

Ⅲ) 1次反応

反応物を ℓ , 生成物を j とおくと,

$$\left. \begin{aligned}
 P_a(j) &= k_{\ell}^a \cdot h_a^i \cdot x_{\ell} \\
 P_O(j) &= k_{\ell}^O \cdot h_o^i \cdot y_{\ell}
 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.70)$$

$$\left. \begin{aligned}
 K_a(j) &= k_j^a \cdot h_a^i \cdot x_j \\
 K_O(j) &= k_j^O \cdot h_o^i \cdot y_j
 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.71)$$

となる。1次反応定数 k_{ℓ}^a 等の単位は 1/hr である。

4. 分配係数の設定

3.2で分配平衡についての基本的な考え方について述べたので、ここでは分配係数の具体的な表現方法について例を引いて説明を行う。MIXSET コードでは溶媒として水相1種類と有機相1種類の向流を仮定する。これらの溶媒の相互溶解はないとし、流量のみが定義される。両者ともに各種の抽出成分を含有することによって体積が変化するが、コードではそのような変化は無視する。つまり、両者の溶媒はともに基本的には無限量の成分を含有することも可能となる。

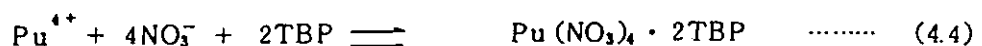
4.1 Purex法における分配係数

有機相 (n-Dodecane) に TBP (Tributyl phosphate) が抽出剤として考慮され、Vol.分率 (体積分率) が入力される。通常、軽水炉燃料の場合 30 Vol. % TBP が、高速増殖炉燃料では 15 Vol. % TBP が使用される。Vol.分率からモル濃度 T_0 (mole/l) への変換は、

$$T_0 = \frac{\text{Vol.分率 TBP} \times 0.973 \times 1000}{2663} \quad \dots\dots\dots (4.1)$$

によって計算される。この T_0 は n-Dodecane が水によって飽和されている状態を基準としているが、実際の抽出工程では各種の溶質を溶媒内に含むので、n-Dodecane の体積が若干変化する。しかし、ここではその差を無視する。TBP は水相へは移動せず、有機相中に均一に分布しているとする。

例として $H^+ - UO_2^{2+} - Pu^{4+} - NO_3^-$ 系について分配平衡を考えると、水相と有機相の間で、



のような平衡関係が成立している。左辺が水相、右辺が有機相を表わす。もちろん酸濃度やその他の因子によって平衡式は変化するが、ここでは (4.2) ~ (4.4) 式だけで話を進める。モル濃度によるみかけの平衡定数を定義して、(4.2) ~ (4.4) 式の平衡関係を数式で表わすと、

$$y_H = K_H \cdot x_H \cdot x_{NO_3} \cdot T \quad \dots\dots\dots (4.5)$$

$$y_U = K_U \cdot x_U^2 \cdot x_{NO_3}^2 \cdot T^2 \quad \dots\dots\dots (4.6)$$

$$y_P = K_P \cdot x_P^4 \cdot x_{NO_3}^4 \cdot T^2 \quad \dots\dots\dots (4.7)$$

ここで、 T = Free TBP (uncomplexed TBP) 濃度

$$= T_0 - 2(y_U + y_P) - y_H \quad \dots\dots\dots (4.8)$$

$$x_{NO_3} = x_H + 2x_U + 4x_P \quad \dots\dots\dots (4.9)$$

である。

分配係数Dは、 $D = y/x$ であるから、(4.5)～(4.7)式は次のようになる。

$$D_H = K_H \cdot x_{NO_3} \cdot T \quad \dots\dots\dots (4.10)$$

$$D_U = K_U \cdot x_{NO_3}^2 \cdot T^2 \quad \dots\dots\dots (4.11)$$

$$D_P = K_P \cdot x_{NO_3}^4 \cdot T^2 \quad \dots\dots\dots (4.12)$$

T (Free TBP 濃度) を水相濃度で表わせば、分配平衡を水相濃度のみで表現できる。そこで(4.5)～(4.7)式を(4.8)式に代入し、y を消去するとTについての2次方程式が得られる。

$$a \cdot T^2 + b \cdot T + c = 0 \quad \dots\dots\dots (4.13)$$

$$\left. \begin{aligned} a &= (K_U \cdot x_U \cdot x_{NO_3}^2 + K_P \cdot x_P \cdot x_{NO_3}^4) \times 2 \\ b &= K_H \cdot x_H \cdot x_{NO_3} + 1 \\ c &= -T_O \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (4.14)$$

(4.13) 式の正根のみに意味があるから、

$$T = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \dots\dots\dots (4.15)$$

となり、 $D = f(x_H, x_U, x_P)$ という関係が成立する。

MIXSET コードではTBPのVol.分率と各成分の平衡定数を入力することで分配係数が計算されるようにプログラミングされている。成分と平衡式が(4.2)～(4.4)に固定されるわけでないで、各成分の電荷とTBPの配位数は自由に入力することが可能となっている。成分jの電荷をn、TBP配位数をmとおくと、

$$y_j = K_j \cdot x_j \cdot x_{ANION}^n \cdot T^m \quad \dots\dots\dots (4.16)$$

となる。ただし抽出成分は正の電荷を持つとし、対応する陰イオンは1価で共通とする。Purex法であればNO₃⁻以外の陰イオンは一応考えられないが、ここでは上式のように一般的に示した。

また、TBP配位数mが2より大きい場合には、Tは(4.15)式のように解析解が得られない。そこでMIXSETコードでは(4.13)式をNewton法による反復法で解いているので、2次の場合でも解析解は採用していない。

さて、これまでみかけの平衡定数Kは一定の値として扱ってきたが、通常Kは成分濃度によって変化する。ここではHorner⁸⁾と同じようにKをイオン強度μの多項式として表わす。すなわち、

$$K = C_0 + C_1 \mu + C_2 \mu^2 + C_3 \mu^3 \quad \dots\dots\dots (4.17)$$

$$\mu = \frac{1}{2} \sum_j (n_j^2 + n_j) \cdot x_j \quad \dots\dots\dots (4.18)$$

とする。ここで、n_jは成分jの電荷であり、(4.18)式には対応する陰イオンの項も含まれる。

(4.17) 式の多項式係数C₀～C₃が各成分について入力される。

4.2 一般的な分配係数の与え方

TBPのような抽出剤が考慮されない場合には、直接に分配係数が入力される。もし分配係数Dが一定ならば、成分毎に一定値が入力できる。段毎に分配値が決定されている場合も各バンクの段毎に一定の分配係数が入力できる。またRuやZrのように分配係数が酸濃度の関数の場合には、

$$D_{Ru} = \exp(a + b \cdot x_H) \quad \dots\dots\dots (4.19)$$

として入力でき、また D_{Ru} を x_H の表としても入力できる。

x_H	x_H^1	x_H^2	x_H^N
D_{Ru}	D_{Ru}^1	D_{Ru}^2	D_{Ru}^N

表の途中の値は線型補間される。ただし(4.19)式のような指数曲線を線型近似することは誤差が大きくなるので注意を要する。

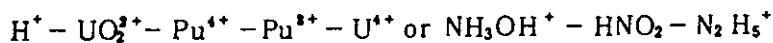
MIXSETコードの現バージョンでは、 $D_j = f(x_j)$ と一変数の表入力での線型補間しか扱えない。今後のバージョンアップによって、多変数、log補間などオプションを増す予定である。

Fortranによる表現

分配係数の内容が複雑であり、4.1、4.2の方法では取り扱いが困難の場合には、分配係数Dを計算するルーチンDBCOFXを利用者が書き直すことができる。DBCOFXルーチンは独立したサブルーチンであり変更は容易である。詳細はプログラムにリストした。

4.3 MIXSETに組み込まれている平衡定数

Purex法による核燃料再処理工程において取り扱われる成分の中で、



の7成分はよく計算されるので、MIXSETコードにはこれらの成分の平衡定数値が組み込まれている。新たな入力により分配係数または平衡定数が指定されない場合は以下の値が使用される。HANとヒドラジンは有機相に抽出されないとする。つまり分配係数はゼロである。

$HNO_3-U-Pu-TBP$ 系の平衡定数値についてはいくつかのレポートが発表されているが、プルトニウムの還元反応を考慮して Pu^{4+} と Pu^{3+} の区別をつけているレポートは少ない。この中からMIXSETは、

G.L. Recharadson and J.L. Swanson,

"Plutonium Partitioning in the Purex Process with Hydrazine-stabilized Hydroxylamine nitrate", HEDL-TME-7531 (1975).

に使用されている平衡値を用いた。

成分jのみかけの平衡定数 K_j を

$$K_j = \frac{y_j}{x_j \cdot T_f^{n_j}} \dots\dots\dots (4.20)$$

ここで、 x_j : 成分 j の水相濃度
 y_j : 成分 j の有機相濃度
 T_f : Free TBP 濃度
 n_j : 成分 j の TBP 配位数

とおき、みかけの平衡定数を硝酸根濃度 x_{NO_3} の関数として表現する。HEDL-TME-7531では、 HNO_3 と TBP の溶媒和形として、 $HNO_3 \cdot TBP$ と $HNO_3 \cdot 2TBP$ を考慮している点に注意を要する。

$$\left. \begin{aligned} x_{NO_3} &= x_H + 2(x_{UO_2} + x_{Pu4}) + 3x_{Pu3} + x_{NH_3OH^+} \\ K_{H1} &= (0.135 x_{NO_3}^{0.82} + 0.0052 x_{NO_3}^{3.44}) (1 - 0.54e^{-15} F) \\ K_{H2} &= K_{H1} \\ K_{UO_2} &= (3.7 x_{NO_3}^{1.57} + 1.4 x_{NO_3}^{3.9} + 0.011 x_{NO_3}^{7.3}) (4F^{-0.17} - 3) \\ K_{Pu4} &= K_{UO_2} (0.2 + 0.55 F^{1.25} + 0.0074 x_{NO_3}^2) \\ K_{Pu3} &= 0.04 x_{NO_3}^{1.8} + 0.000156 F \cdot x_{NO_3}^7 \end{aligned} \right\} \dots (4.21)$$

ここで、 F は TBP Vol. 分率である。最上式の x_{Pu4} の係数は 2とも考えられるが、ここでは HEDL-TME-7531の通りとした。

Free TBP 濃度 T_f は、

$$T_f = T_o - 2(K_{H2} \cdot x_H + K_{UO_2} \cdot x_{UO_2} + K_{Pu4} \cdot x_{Pu4} + K_{Pu3} \cdot x_{Pu3}) T_f^2 - K_{H1} \cdot x_H \cdot T_f \dots\dots\dots (4.22)$$

の 2 次方程式を解けば求められる。分配係数は (4.20) 式より、

$$\left. \begin{aligned} D_H &= K_{H1} \cdot T_f + K_{H2} \cdot T_f^2 \\ D_{UO_2} &= K_{UO_2} \cdot T_f^2 \\ D_{Pu4} &= K_{Pu4} \cdot T_f^2 \\ D_{Pu3} &= K_{Pu3} \cdot T_f^2 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.23)$$

と表わされる。 F (TBP Vol. 分率) より T_o (TBP モル濃度) への交換は、

$$T_o = 3.6538 \times F \dots\dots\dots (4.24)$$

による。(4.21)式の元の式には温度補正項が含まれていたが、ここでは常温 (25°C) の値を用いた。

U(IV) については (4.21) 式のような TBP との平衡式のデータが見当たらないので、本 MIXSET では、

H.A.C. Mckay, R.J.W. Streeton and A.G. WAIN,

*Mixer Settler Runs to Study Uranium (IV) as a Reductant in Uranium /

Plutonium Separation *, AERE-R 4381 (1963).

から, 図 4.1 を引用した。図 4.1 の中のデータ点 (1~17) の値を表 4.1 に示す。表 4.1 の数値は図より読み取ったものである。

表 4.1 の U(IV) の分配値は U(VI) の TBP 内濃度の関数となっているので, このままの型では MIXSET コードにおいて使用できない。分配平衡を

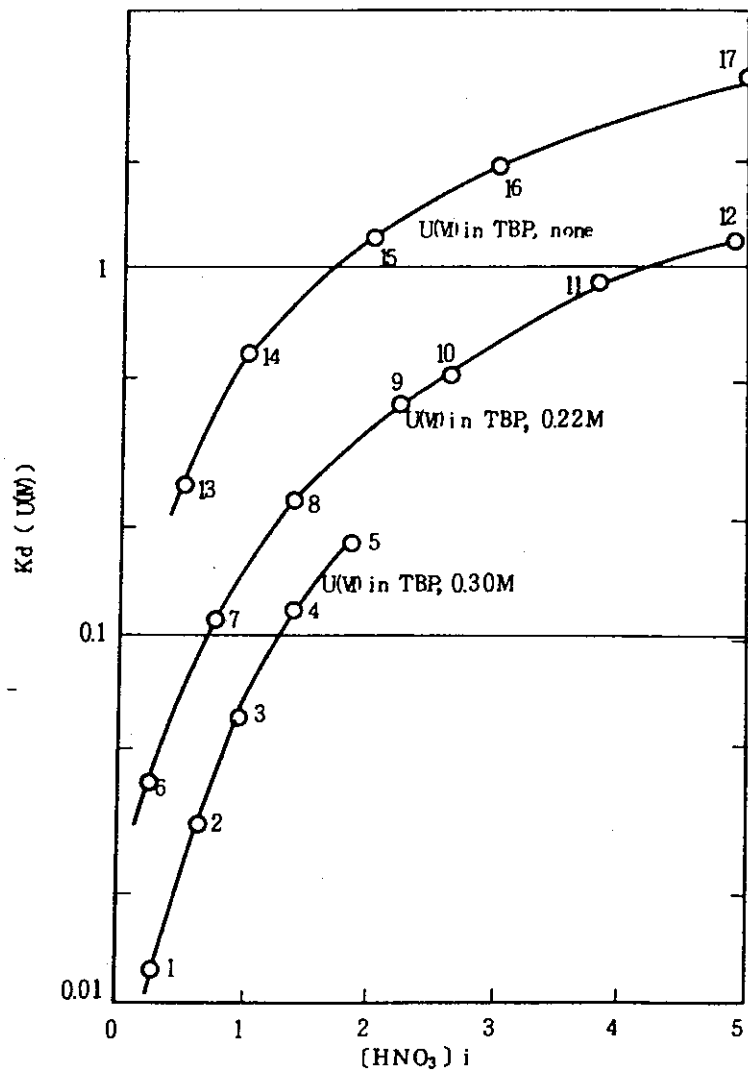
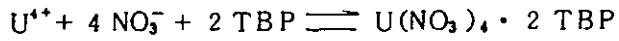


図 4.1 30% TBP による U(IV) の抽出 [U(VI)]: 0.1M

表 4.1 U(IV)の分配係数

	y_{UO_2} (M)	x_{H^+} (M)	D_{U4}
1	0.30	0.2679	0.01218
2		0.6488	0.03031
3		0.9524	0.05963
4		1.399	0.1179
5		1.839	0.1758
6	0.22	0.2679	0.03907
7		0.7738	0.1099
8		1.345	0.2308
9		2.232	0.4095
10		2.637	0.5059
11		3.810	0.9060
12	4.881	1.115	
13	0	0.5059	0.2560
14		1.0	0.5743
15		2.0	1.190
16		3.0	1.859
17		5.0	3.237

y_{UO_2} : (U(M)) in TBP
 x_H : (H⁺) in Aq.

とし、U(IV)についても(4.23)式のような見かけの平衡定数 K_{U4} を定義した。

$$\left. \begin{aligned} D_{U4} &= K_{U4} \cdot T_i^2 \\ K_{U4} &= f(x_{NO_3}) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.25)$$

表 4.1 のデータを用いて最小自乗法により K_{U4} を求めた。 K_{U4} の計算に必要な各データ点の x_{NO_3} と T_i は、

$$\left. \begin{aligned} x_{NO_3} &= x_H + 4 x_{U4} + 2 x_{UO_2} \\ T_i &= T_0 - 2 (y_{U4} + y_{UO_2} + K_{H2} \cdot x_H) T_i^2 - K_{H1} \cdot x_H \cdot T_i \\ x_{UO_2} &= \frac{y_{UO_2}}{K_{UO_2} \cdot T_i^2} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (4.26)$$

の方程式を解くことで得られる。 K_{UO_2} , K_{H1} , K_{H2} は(4.21)式を用いた。U(IV)の濃度は、図 4.1 より全濃度が 0.1M であることから、

$$x_{U4} = \frac{0.1}{1 + D_{U4}}, \quad y_{U4} = 0.1 - x_{U4} \quad \dots\dots\dots (4.27)$$

のように計算した。表 4.2 に各データ点 (1~17) における計算された x_{NO_3} と K_{U4} を示す。

表 4.2 U(N)の K_{U4}

N	IT	x_{NO_3}	K_{U4}
1	29	9.712E-01	5.719E-02
2	13	1.254E+00	1.827E-01
3	9	1.501E+00	4.565E-01
4	6	1.886E+00	1.346E+00
5	6	2.283E+00	3.098E+00
6	14	8.336E-01	1.064E-01
7	7	1.241E+00	4.347E-01
8	6	1.740E+00	1.522E+00
9	5	2.562E+00	6.641E+00
10	5	2.944E+00	1.293E+01
11	4	4.057E+00	9.773E+01
12	4	5.109E+00	4.700E+02
13	1	8.244E-01	3.128E-01
14	1	1.254E+00	1.109E+00
15	1	2.183E+00	6.136E+00
16	1	3.183E+00	1.790E+01
17	1	5.094E+00	5.273E+02

表 4.2 中の N はデータ点番号, IT は (4.26) 式の計算の反復回数を表わす。この表から, $K_{U4} = f(x_{NO_3})$ の型に最小自乗法でフィッティングを行なうが, K_{U4} は $10^{-2} \sim 10^3$ の拡りがあるので, 対数によるフィッティングを行った。この結果を図 4.2 に示す。 $\ln K_{U4}$ を (x_{NO_3}) の線型としたのは, データ点の信頼性および (4.26) 式の方法から判断して, 複雑な多項式による必要はないと思われるからである。図 4.2 の点線は 90 % の信頼区間を表わしている。

図 4.2 から,

$$K_{U4} = e^{-3336 + 1.9331[x_{NO_3}]} \dots\dots\dots (4.28)$$

と表わせる。

亜硝酸 (HNO_2) の分配係数は,

T. Tsujino, T. Aochi and T. Hoshino,

J. Nucl. Sci. Tech., 13(6) 321 (1976)

から酸濃度に対する表 4.3 を作成し, 組み込んだ。

表 4.3 HNO_2 の分配係数 K_d

x_{NO_3} (M)	0.1	0.5	1.0	2.0	3.2
K_{d,HNO_2}	1.5	15	16	15	6.0

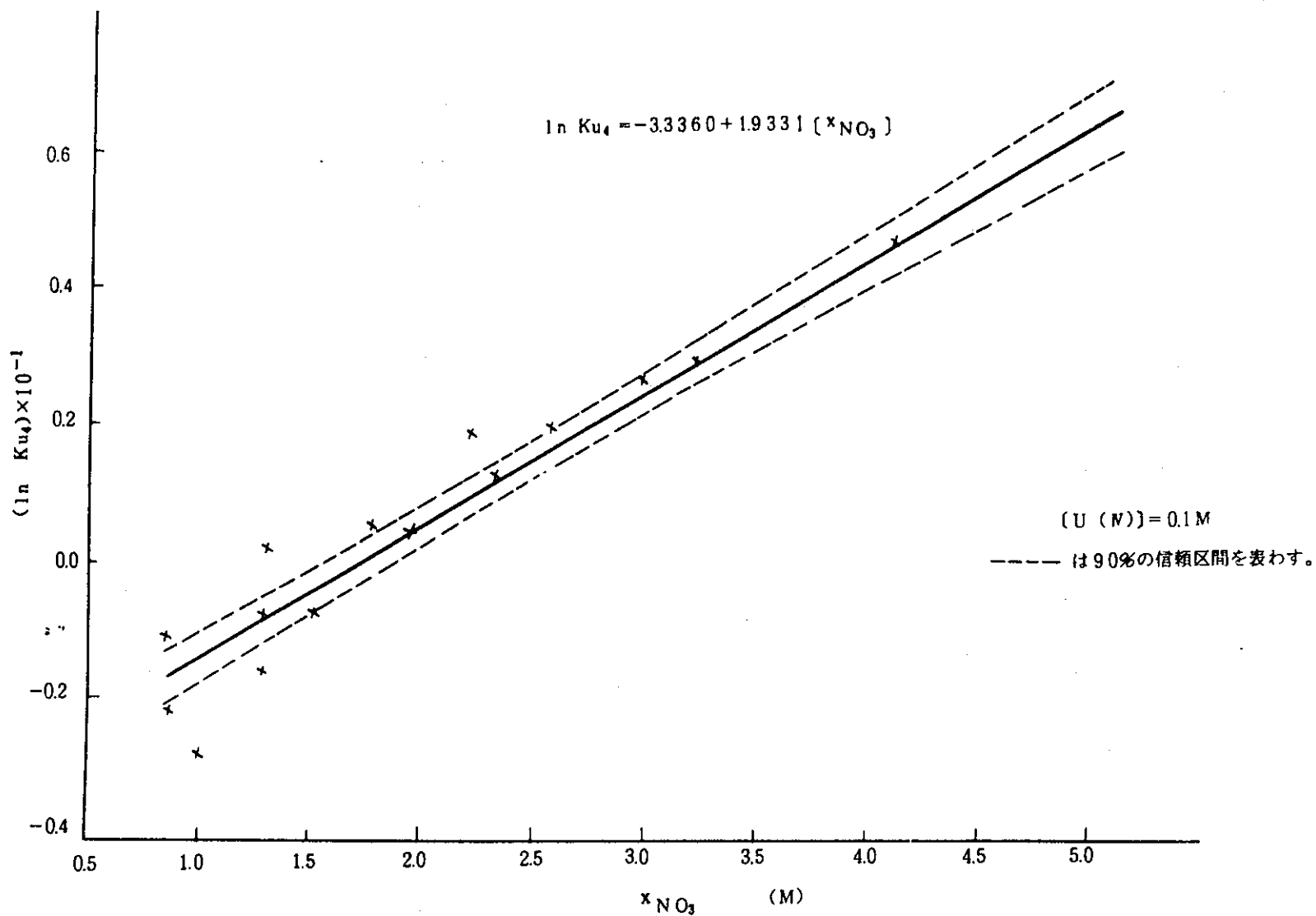


図 4.2 U(N) の見かけの平衡定数 Ku_4 のフィッティング (最小自乗法)

5. 供給液入力最適化

再処理溶媒抽出工程において、所定の製品の回収率、除染係数及び抽出器特性から、各種供給液の流量と濃度を最適化する必要が生じる。MIXSET コードでは3個のバンクを連立して解くことができるが、供給液最適化の必要が特にあるのは、各サイクルの第1バンクであるので、最適化計算の対象は1個のバンクのみとする。

5.1 問題の定式化

まず“製品 (Product)”と“廃品 (Waste)”を定義する。第1バンクの流れを図5.1に示す。

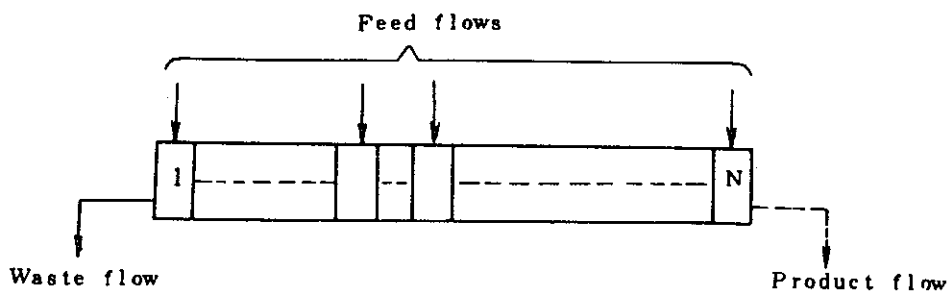


図5.1 製品と廃品の流れ

製品とは有機相流によって回収される成分を示し、この成分番号を J_{PR} とおくと、製品回収率 η は、

$$\eta = \frac{B^N \cdot y_{J_{RR}}^N}{\sum_m W_f^m \cdot x_{fJ_{PR}}^m} \dots\dots\dots (5.1)$$

と定義される。

廃品とは水相によって回収される成分を示し、この成分番号を J_{FP} とおくと、廃品回収率 ξ は、

$$\xi = \frac{W^1 \cdot x_{J_{FP}}^1}{\sum_m W_f^m \cdot x_{fJ_{FP}}^m} \dots\dots\dots (5.2)$$

と定義される。

η と ξ は当然 $0 \leq \eta \leq 1.0$, $0 \leq \xi \leq 1.0$ である。Purex法プロセスであれば、製品としてはウラン、プルトニウム等の燃料成分、廃品成分としてはルテニウム、ジルコニウム等の放射性核分裂生成物 (F.P.) があげられる。生産量は一定に保つ必要があるので、(5.1)と(5.2)式の分

母は一定でなければならない。したがって、 $B^N \cdot y_{J_{RP}}^N$ と $W^1 \cdot x_{J_{FP}}^1$ を自由に可変できるのは、製品と廃品の入力に無関係な供給液流量と成分濃度になる。これらの可変パラメータを $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ とおく。最大5個までのパラメータを扱える。通常これらのパラメータとしては、溶媒流量、洗浄液流量、酸濃度が代表的なものとなる。目的は製品及び廃品の回収率を設定値 η_c, ξ_c に近づけることにある。つまり以下に示す関数 F を最小化する \mathbf{X} を求めることに帰着する。

$$F(\mathbf{X}) = \lambda_1 (\eta_c - \eta)^2 + \lambda_2 (\xi_c - \xi)^2 \quad \dots\dots\dots (5.3)$$

ここで λ_1, λ_2 は加重係数である。

η と ξ はバンク内の濃度分布より計算されるので、これには定常状態ルーチンが使われる。関数 F は \mathbf{X} について陽に表わされていないので、最小値を求める手順は当然反復計算が含まれる。 η と ξ はパラメータ \mathbf{X} の変動に対して通常相反する挙動を示す。例えば、製品の回収率 η を大きくしようとして、溶媒流量を増すと、 ξ は逆に低下する。このように(5.3)式を最小にする \mathbf{X} が存在する。

5.2 最適化の方法 (パターン探索法)

基本的には関数 $F(\mathbf{X})$ (5.3式) を最小にすることである。 F は非常に複雑な関数型なので、微係数を用いる方法等のこみ入った手順は適当でない。関数値のみを用いる“直接探索法”が単純なのでよいと考えられる。この中からMIXSETコードは“パターン探索法”を採用した。

パターン探索法

最小化すべき関数を $F = f(\mathbf{X})$, $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ とおく。パターン探索法は、パターン決定とパターン移動の2種類の動きからなる繰り返しの手法である。第1のパターン決定の動きは、目的関数の局所的な動きを探索するように工夫されている。出発点 \mathbf{X} を定め、各方向 e_1, e_2, \dots, e_n にステップ幅 $\Delta x_1, \Delta x_2, \dots, \Delta x_n$ をきめて、つぎのようにパターン決定を行う。

i) $i = 1$ とし、 $F = f(\mathbf{X})$ を計算する。

ii) 新しい試行点をきめる。

$$\mathbf{X} \leftarrow (x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n)$$

iii) $f(\mathbf{X}) < F$ のときは、 $F \leftarrow f(\mathbf{X})$, $i \leftarrow i + 1$ として ii) へもどる。

iv) $f(\mathbf{X}) \geq F$ のときは、 $\mathbf{X} \leftarrow (x_1, \dots, x_i - 2 \Delta x_i, \dots, x_n)$ とし $f(\mathbf{X})$ を評価する。このとき $f(\mathbf{X}) < F$ ならば $F \leftarrow f(\mathbf{X})$, $i \leftarrow i + 1$ として ii) へもどる。

$f(\mathbf{X}) \geq F$ ならば、動きは行なわず $i \leftarrow i + 1$ とし ii) へもどる。

v) i が n になるまで ii), iii), iv) をくり返す。

以上のパターン決定によって到達した点を基点 (Base point) という。出発点は出発基点という。第2の動きはパターン移動で、ある段階における基点 \mathbf{X}^B から一気に、

$$\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{X}^B + (\mathbf{X}^B - \bar{\mathbf{X}}^B) = 2\mathbf{X}^B - \bar{\mathbf{X}}^B \quad \dots\dots\dots (5.4)$$

へ飛ぶ。この式で $\bar{\mathbf{X}}^B$ は前回の基点である。パターン移動は、

- i) 点 \mathbf{X} からパターン決定を行い、点 \mathbf{X}' を求める。
- ii) $f(\mathbf{X}^B) > f(\mathbf{X}')$ ならば、この点 \mathbf{X}' を新しい基点として、(5.4)式により点 \mathbf{X} を求め i) へもどる。
- iii) もし $f(\mathbf{X}^B) < f(\mathbf{X}')$ ならば、基点 \mathbf{X}^B を出発基点として、その点より手続きを再開する。ただしこの時ステップ幅 Δx_i を減じる。
- iv) i), ii), iii)をくり返し、ステップ幅 Δx_i がある値以下になったら、プロセスは収束したとみなされる。

パターン探索法の途中で、製品及び廃品の回収率が条件を満足すれば、その点が最小値でなくとも計算は終りとなる。

6. 数 値 解 法

6.1 過渡計算

3.5 で表わされたように、物質収支式は濃度に関する微分方程式である。これを差分方程式に変換し、タイムステップ毎に連立方程式を解いて行く。ここで用いる時間 t における変数 x の値 $x(t)$ は図 6.1 の斜線部の平均値を表わす。

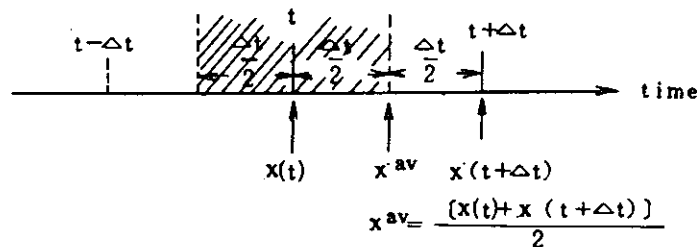


図 6.1 タイムステップの構造

6.1.1 Mixer 部

A) 化学反応が無い場合の差分方程式

(353) 式を時間 $t \rightarrow t + \Delta t$ 間で積分すると、

$$\begin{aligned}
 h_a^i (x_{mi} - x'_{mi}) + h_o^i (y_{mi} - y'_{mi}) &= \int (W^{i+1} \cdot x_s^{i+1} + B^{i-1} \cdot y_s^{i-1}) dt + \\
 &+ \int (W_f^i \cdot x_f^i + B_f^i \cdot y_f^i) dt + \int W_R^i \cdot x_s^i dt - \int (W^{i+1} + W_R^i + W_f^i) x_{mi} dt \\
 &- \int (B^{i-1} + B_f^i) y_{mi} dt \quad \dots\dots\dots (6.1)
 \end{aligned}$$

ここで、 x_{mi} は $x_{mi}^i(t)$ 、 x'_{mi} は $x_{mi}^i(t + \Delta t)$ を表わす。他もすべて同様である。

成分インデックスは省略する。体積、流量についてはタイムステップの平均値である。

右辺の積分の近似を図 6.2 のように a, b を考え、流入項には a, 流出項と供給項には b を適用すると、(6.1) 式は、

$$\begin{aligned}
 h_a^i (x_{mi} - x'_{mi}) + h_o^i (y_{mi} - y'_{mi}) &= F_{in} - F_x (x_{mi} + x'_{mi}) - F_y (y_{mi} + y'_{mi}) \quad \dots (6.2) \\
 \left. \begin{aligned}
 F_{in} &= (W^{i+1} x_{s_{i+1}}' + B^{i-1} y_{s_{i-1}}' + W_f^i x_{fi}^{av} + B_f^i y_{fi}^{av} + W_R^i x_{si}^i) \Delta t \\
 F_x &= (W^{i+1} + W_f^i + W_R^i) \frac{\Delta t}{2} \\
 F_y &= (B^{i-1} + B_f^i) \frac{\Delta t}{2}
 \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (6.3)
 \end{aligned}$$

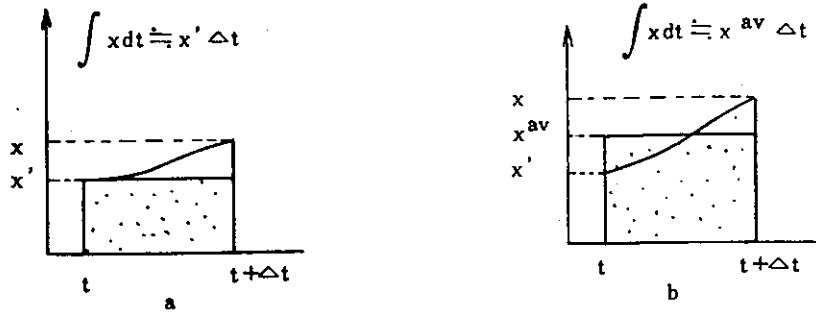


図 6.2 積分の近似法

となる。以後段インデックス i を省略する。

(6.2) 式を整理すると、

$$(h_a + F_x) x_m + (h_o + F_y) y_m = F_{in} + (h_a - F_x) x'_m + (h_o - F_y) y'_m \quad \dots\dots (6.4)$$

となる。右辺は定数項のみであるから、ここで、

$$\left. \begin{aligned} R &= F_{in} + (h_a - F_x) x'_m + (h_o - F_y) y'_m \\ H_x &= h_a + F_x \\ H_y &= h_o + F_y \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots (6.5)$$

とおくと (6.4) 式はさらに簡略化されて、

$$H_x \cdot x_m + H_y \cdot y_m = R \quad \dots\dots (6.6)$$

となる。(6.6) 式が $i = 1 \sim N_s$, 成分 $i = 1 \sim N_C$ について成立するが、流入項に Explicit 型 (図 6.2 の a) を使用したので、(6.6) 式は段毎に独立の方程式となる (未知数は成分数)。

段効率 $E_r = 1$ の場合；

$$y_j = D_j \cdot x_j$$

であるから、(6.6) 式より

$$x_{mj}^i(t + \Delta t) = \frac{R_j^i}{H_x^i + H_y^i D_j^i} \quad \dots\dots (6.7)$$

$$i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_C$$

段効率が水相について定義される場合 ；

(3.7) ~ (3.9) 式より

$$y_m = \frac{D}{E} x_m - \frac{D}{E} (1 - E_r) x_{in} \quad \dots\dots (6.8)$$

(6.8) 式を (6.6) 式の y_m へ代入して整理すると、

$$x_{mj}^i(t + \Delta t) = \frac{R_j^i + H_y^i \cdot D_j^i (1 - E_j^i) \frac{x_{inj}^i}{E_j^i}}{H_x^i + H_y^i \frac{D_j^i}{E_j^i}} \quad \dots\dots (6.9)$$

$$i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_C$$

段効率が有機相について定義される場合 ;

(3.10)~(3.12) 式より

$$y_m = E \cdot D \cdot x_m + (1 - E) y_{in} \quad \dots\dots\dots (6.10)$$

(6.10) 式を(6.6) 式の y_m へ代入して整理すると,

$$x_{mj}^i(t + \Delta t) = \frac{R_j^i - H_y^i (1 - E_j^i) y_{inj}^i}{H_x^i + H_y^i \cdot E_j^i \cdot D_j^i} \quad \dots\dots\dots (6.11)$$

となる。

B) 化学反応がある場合の差分方程式

反応項 $P_{ma}, P_{mo}, K_{ma}, K_{mo}$ の積分に図 6.2 の b の方法を適用し, 他は A) と同様に差分化すると,

$$H_x \cdot x_m + H_y \cdot y_m = R + (P_{ma} + P'_{ma}) \frac{\Delta t}{2} + (P_{mo} + P'_{mo}) \frac{\Delta t}{2} - (K_{ma} + K'_{ma}) \frac{\Delta t}{2} - (K_{mo} + K'_{mo}) \frac{\Delta t}{2} \quad \dots\dots\dots (6.12)$$

が導かれる。右辺の ' のついたタイムステップの前半での計算値を

$$C = R + (P'_{ma} + P'_{mo} - K'_{ma} - K'_{mo}) \tau \quad \dots\dots\dots (6.13)$$

ここで, $\tau = \frac{\Delta t}{2}$

とまとめる。ただし $C < 0$ の場合は $C = 0$ とする。(6.12) 式は

$$H_x \cdot x_m + H_y \cdot y_m = C + (P_{ma} + P_{mo}) \tau - (K_{ma} + K_{mo}) \tau \quad \dots\dots\dots (6.14)$$

となる。この式のまま $y_m = Dx_m$ より y_m を消去して反復計算をすることも可能であるが, 右辺の第 3 項に減少項があるため反復途中で x_m が負に計算されることがあり, 発散するおそれが出てくる。これを防ぐため, K_{ma}, K_{mo} の反応減少項に " 擬 1 次反応定数 k_a, k_o " を (6.15) 式のように定義する。

$$\left. \begin{aligned} K_{ma} &= k_a \cdot x_m \\ K_{mo} &= k_o \cdot y_m \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots\dots (6.15)$$

k_a, k_o は l/hr の単位となる。(6.15) 式と $y = D \cdot x$ を (6.14) 式へ代入し, 段と成分インデックスをつけて整理すると,

$$x_{mj}^i(t + \Delta t) = \frac{C_j^i + (P_{ma} + P_{mo}) \tau}{H_x^i + k_{aj}^i \cdot \tau + (H_y^i + k_{oj}^i \cdot \tau) D_j^i} \quad \dots\dots\dots (6.16)$$

$i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$

となる。

C) 差分方程式の反復法

(6.7), (6.9), (6.11), (6.16) 式により $t + \Delta t$ における水相濃度 $x_{mj}^i(t + \Delta t)$ が計算され, タイムステップを進めることができる。しかし各式ともに右辺に分配係数と化学反応項を含んで

おり、これらが $x_{mj}^i(t+\Delta t)$ および $y_{mj}^i(t+\Delta t)$ の関数となっているので反復計算が必要となる。反復の手順は以下の通りである。

(1) x_m^g, y_m^g より係数群 (H_x, H_y, R, C 等) を計算する。

(2) $t+\Delta t$ における推定値 x_m^g, y_m^g を計算する。

$$\left. \begin{aligned} x_m^g &= x_m(t) - x_m(t-\Delta t) \\ y_m^g &= y_m(t) - y_m(t-\Delta t) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.17)$$

(3) x_m^g, y_m^g を用いて、分配係数と化学反応項を計算する。

(4) x_m^n を (6.7), (6.9), (6.11) or (6.16) 式で計算する。

(5) 化学反応がある場合 $y_m^n = D x_m^n$ 。

(6) $x_m^g \approx x_m^n$ ならば(8)へ行く。

(7) $x_m^g - x_m^n, y_m^g - y_m^n$ として(3)よりくり返す。

(8) 収束、段効率がある場合 (6.8) または (6.10) 式で y_m を計算する。

反復の上限は 25 回としてあるが、通常、計算スタート近くでは 10~20 回、定常状態近くになれば 1~5 回で収束する。収束判定は、

$$\left| \frac{x_{mj}^n - x_{mj}^g}{x_{mj}^n} \right| < \epsilon_g, \quad j = 1 \sim N_s \quad \dots\dots\dots (6.18)$$

とする。 ϵ_g は 7.2 の入力カード 8 により指定できるが、省略された場合は 10^{-3} が使われる。以上の操作が各段毎に行なわれる。

6.1.2 Settler 部

(3.58), (3.59) 式の微分方程式を Mixer 部と同様に差分化する。Settler 部は Mixer 部の後で計算されるので、 $x_m(t+\Delta t), y_m(t+\Delta t)$ は既知として扱うことができる。このため差分化の際、流入項、流出項および化学反応項に平均値を使用する。分配係数がないことを除いては 6.1.1 と同様に差分化して、 $t+\Delta t$ における濃度を求めると、

$$x_{sj}^i(t+\Delta t) = \frac{F_{ij}^A + [H_a^i - (W^i + W_R^i)\tau] x_{sj}^{i'} + (P_{S_a} + P_{S_a}')\tau - K_{S_a}^i \cdot \tau}{H_a^i + (W^i + W_R^i)\tau + k_{a_j}^i \cdot \tau} \quad \dots (6.19)$$

$$y_{sj}^i(t+\Delta t) = \frac{F_{ij}^O + (H_o^i - B^i \cdot \tau) y_{sj}^{i'} + (P_{s_o} + P_{s_o}')\tau - K_{s_o}^i \cdot \tau}{H_o^i + B^i \cdot \tau + k_{o_j}^i \cdot \tau} \quad \dots\dots\dots (6.20)$$

ここで $F_{ij}^A = (W^{i+1} + W_R^i + W_f^i)(x_{mj}^i + x_{mj}^{i'})\tau \quad \dots\dots\dots (6.21)$

$$F_{ij}^O = (B^{i-1} + B_f^i)(y_{mj}^i + y_{mj}^{i'})\tau \quad \dots\dots\dots (6.22)$$

$$k_{aj}^i = \frac{K_{Sa} \cdot \tau}{x_{sj}^i} \dots\dots\dots (6.23)$$

$$k_{oj}^i = \frac{K_{So} \cdot \tau}{y_{sj}^i} \dots\dots\dots (6.24)$$

$i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$

となる。

化学反応項がなければ (6.19), (6.20) 式は反復計算なしで解ける。反応項 P_{Sa}, P_{So}, k_a, k_o は時間 $t + \Delta t$ における濃度の関数なので、化学反応がある場合は Mixer 部と同様に反復計算を行う。水相と有機相は関連していないので (6.19) 式と (6.20) 式は別々に解くことができる。収束判定は Mixer 部と同じ $\epsilon, (10^{-3})$ を用い、反復上限数は 10 回としてある。

6.2 定常計算

化学反応、段効率の有無によって 3.5 の (3.61) 式の型が変わるので、以下に各場合毎について式の導出と解法を示す。

6.2.1 化学反応が無い場合

I) 段効率が水相について定義される場合、

(3.10) 式より、

$$y^i = \frac{D^i}{E^i} x^i - \frac{D^i(1-E^i)}{E^i} \cdot \frac{W^{i+1} \cdot x^{i+1} + W_f^i \cdot x_f^i}{w^i} \dots\dots\dots (6.25)$$

である。(6.25) 式を (3.64) 式へ代入して整理すると、

$$\begin{aligned} & -\frac{B^{i-1} \cdot D^{i-1}}{E^{i-1}} x^{i-1} + \left[\frac{B^i \cdot D^i}{E^i} + W^i + \frac{B^{i-1} W^i (1-E^i) D^{i-1}}{E^{i-1} \cdot W^{i-1}} \right] x^i - \left[W^{i+1} + \frac{B^i \cdot W^{i+1} (1-E^i) D^i}{E^i \cdot W^i} \right] x^{i+1} \\ & = W_f^i \cdot x_f^i + B_f^i \cdot y_f^i - \left[\frac{B^{i-1} \cdot W_f^{i-1} \cdot x_f^{i-1} (1-E^{i-1})}{E^{i-1} \cdot W^{i-1}} \right] D^{i-1} + \left[\frac{B^i \cdot W_f^i \cdot x_f^i (1-E^i)}{E^i \cdot W^i} \right] D^i \dots (6.26) \end{aligned}$$

となる。(6.25), (6.26) 式では成分 j のサブスクリプトは省略されているが、これらが $i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$ について成立する。ここで分配係数 D^i を定数と仮定し、係数群を行列 A_j , 右辺をベクトル b_j とおくと、

$$A_j \cdot X_j = b_j \dots\dots\dots (6.27)$$

$$X_j = \begin{pmatrix} x_j^1 \\ x_j^2 \\ \vdots \\ x_j^{N_s} \end{pmatrix}$$

$$j = 1 \sim N_c$$

とおける。係行列 A_j は (6.26) 式から明らかなように対角要素 a_{ii} と隣り同士の要素 $a_{i,i-1}$, $a_{i,i+1}$ ($i = 1 \sim N_s$) 以外はすべてゼロである。このため実際にはこれらのゼロでない3列の係数列 ($N_s \times 3$) だけを定義すればよい。 ($N_s \times N_s$) の行列演算を行なうことなしに (6.27) 式は解くことができる。分配係数 D_{ij} が成分濃度 X_j ($j = 1 \sim N_c$) ならば、以下の反復手順によって濃度分布を求める。

- (1) X_j ($j = 1 \sim N_c$) の初期値を設定する。
- (2) X_j ($j = 1 \sim N_c$) より分配係数 D_{ij} ($i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$) を計算し、係数群 A_j, b_j ($j = 1 \sim N_c$) を設定する。
- (3) $A_j \cdot X_j^N = b_j$ を解き、水相濃度 X_j^N ($j = 1 \sim N_c$) を求める。ここで N は New を意味する。
- (4) $X_j \approx X_j^N$ ならば終了。
- (5) $X_j \leftarrow X_j^N$ ($j = 1 \sim N_c$) として (2)(3)(4) をくり返す。

分配係数が定数の成分については反復計算の必要はない。この反復計算法は EITRC 1 ルーチンで行なわれる。

II) 段効率が有機相について定義される場合

(3.7) 式より

$$y^i = E^i \cdot D^i \cdot x^i + (1 - E^i) \frac{B^{i-1} \cdot y^{i-1} + B_f^i \cdot y_f^i}{B^{i-1}} \quad \dots\dots\dots (6.28)$$

である。(6.28) 式を (3.64) 式へ代入し、 y^i のみを消去すると、

$$(W^i + B^i \cdot E^i \cdot D^i) x^i = W_f^i \cdot x_f^i + B_f^i \cdot y_f^i + W^{i+1} x^{i+1} + B^{i-1} E^i y^{i-1} \quad \dots\dots\dots (6.29)$$

となる。 y^{i-1} にも (6.28) 式を代入して順次 y の項を消去して行くと、段 i の式に x^{i-2}, x^{i-3}, \dots の項が現われるので、(6.27) 式のように表わすと係数行列 A_j は三重対角でなくなる。このため連立1次方程式 (6.29) を解くためには ($N_s \times N_s$) 行列の掃き出し法等の計算が必要となり、計算手順が多くなるので EITRC 1 ルーチンによる方法は採用しない。マクロ成分の反復計算において、 i 段以外の項に前の反復における値を使うと、(6.29) 式は

$$x_{ij} = \frac{W_f^i \cdot x_{fj}^i + B_f^i \cdot y_{fj}^i + W^{i+1} \cdot x^{i+1P} + B^{i-1} E_j^i \cdot y^{i-1P}}{W^i + B^i \cdot E_j^i \cdot D_j^i} \quad \dots\dots\dots (6.30)$$

$i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$

となる。 P は前の反復の値であることを示す。反復の手順は以下ようになる。

- (1) x_{ij} ($i = 1 \sim N_s, j = 1 \sim N_c$) の初期値の設定。
- (2) 段 $i = 1 \sim N_s$ について以下を行う。
 - (2-1) $x_j^i \leftarrow x_{ij}$ ($j = 1 \sim N_c$)

- (2-2) x_j^i より分配係数 D_j ($j=1\sim N_c$) を計算する。
- (2-3) x_j^n ($j=1\sim N_c$) を (6.30) 式より計算する。
- (2-4) $x_j^n \approx x_j^i$ ならば (2-6) へ。
- (2-5) $x_j^i \leftarrow x_j^n$ ($i=1\sim N_c$) とし, (2-2) ~ (2-4) をくり返す。
- (2-6) $x_{ji}^p \leftarrow x_j^n$
 $y_{ji} \leftarrow x_j^n \cdot D_j$ ($j=1\sim N_c$)
- (3) $x_{ji}^p \approx x_{ij}^p$ ($i=1\sim N_s, j=1\sim N_c$) ならば終了。
- (4) $x_{ij}^p \leftarrow x_{ji}^p$ ($i=1\sim N_s, j=1\sim N_c$) とし, (2)(3) をくり返す。

この反復法は EITRC2 ルーチンで行なわれる。

成分 j がマイクロ成分または分配係数が定数の場合は, 有機相濃度 y についての連立方程式を設定することができる。(6.28) 式を変型して,

$$x_j^i = \frac{y^i}{E^i \cdot D^i} - \frac{1-E^i}{E^i \cdot D^i} \cdot \frac{B^{i-1} y^{i-1} + B_f^i \cdot y_f^i}{B^i} \dots\dots\dots (6.31)$$

これを (3.64) 式へ代入し, x^{i+1}, x^i を消去すると,

$$-\left[B^{i-1} + \frac{W^i(1-E^i)}{E^i \cdot D^i} \cdot \frac{B^{i-1}}{B^i} \right] y^{i-1} + \left[B^i + \frac{W^i}{E^i \cdot D^i} + \frac{W^{i+1}(1-E^{i+1})B^i}{E^{i+1} \cdot D^{i+1} \cdot B^{i+1}} \right] y^i - \frac{W^{i+1}}{E^{i+1} \cdot D^{i+1}} y^{i+1}$$

$$= W_f^i \cdot x_f^i + B_f^i \cdot y_f^i + \frac{W^i(1-E^i)B_f^i \cdot y_f^i}{E^i \cdot D^i \cdot B^i} - \frac{W^{i+1}(1-E^{i+1})B_f^{i+1} \cdot y_f^{i+1}}{E^{i+1} \cdot D^{i+1} \cdot B^{i+1}} \dots (6.32)$$

($i=1\sim N_s$)

となる。行列形式で表わすと,

$$A \cdot y = b$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N_s} \end{pmatrix}$$

となり, A は三重対角行列であり, 分配係数 D^i は定数なので反復なしで解が得られる。

6.2.2 一次の化学反応がある場合

反応定数は一定であるから, Settler 部の濃度は Mixer 部濃度によって表わされる。Settler 部のバランス式を解く必要はない。

反応物(R), 生成物(P)の Settler 部濃度は (3.70) と (3.71) 式を (3.62), (3.63) 式へ代入することにより (段インデック i は省略),

$$x_S^R = \frac{W + W_R}{W + W_R + k_a^R \cdot H_a} x_m^R \quad \dots\dots\dots (6.33)$$

$$y_S^R = \frac{B}{B + k_o^R \cdot H_o} y_m^R \quad \dots\dots\dots (6.34)$$

$$x_S^P = \frac{W + W_R}{W + W_R + k_a^P \cdot H_a} x_m^P + \frac{k_a^R \cdot H_a}{W + W_R + k_a^P \cdot H_a} \cdot \frac{W + W_R}{W + W_R + k_a^R \cdot H_a} x_m^R \quad \dots\dots\dots (6.35)$$

$$y_S^P = \frac{B}{B + k_o^P \cdot H_o} y_m^P + \frac{k_o^R \cdot H_o}{B + k_o^P \cdot H_o} \cdot \frac{B}{B + k_o^R \cdot H_o} y_m^R \quad \dots\dots (6.36)$$

となる。段効率は常に1とされるので、 $y_m = D \cdot x_m$ であるから、(6.35)と(6.36)を(6.34)式へ代入すると、生成物(P)のMixer部の水相濃度に関する連立方程式が得られる。

$$\begin{aligned} & - \left[\frac{(B^{i-1})^2 \cdot D_p^{i-1}}{B^{i-1} + k_o^P \cdot H_o^{i-1}} \right] x_{mp}^{i-1} + \left[\frac{W^i + W_R^i + k_a^P \cdot h_a^i}{W^i + W_R^i + k_a^P \cdot H_a^i} - \frac{(W^i + W_R^i) W_R^i}{W^i + W_R^i + k_a^P \cdot H_a^i} + (B^i + k_o^P \cdot h_o^i) D_p^i \right] x_{mp}^i \\ & - \left[\frac{(W^{i+1} + W_R^{i+1}) W^{i+1}}{W^{i+1} + W_R^{i+1} + k_a^P \cdot H_a^{i+1}} \right] x_{mp}^{i+1} = W_f^i \cdot x_{fp}^i + B_f^i \cdot y_{fp}^i + (k_a^R \cdot h_a^i + k_o^R \cdot h_o^i \cdot D_R^i) x_{mR}^i \\ & + \frac{W^i + W_R^i}{W^i + W_R^i + k_a^R \cdot H_a^i} \cdot \frac{k_a^R \cdot H_a^i}{W^i + W_R^i + k_a^P \cdot H_a^i} W_R^i \cdot x_{mR}^i + \frac{W^{i+1} + W_R^{i+1}}{W^{i+1} + W_R^{i+1} + k_a^R \cdot H_a^{i+1}} \cdot \frac{k_a^R \cdot H_a^{i+1}}{W^{i+1} + W_R^{i+1} + k_a^P \cdot H_a^{i+1}} \\ & \cdot W^{i+1} x_{mR}^{i+1} + \frac{B^{i-1}}{B^{i-1} + k_o^R \cdot H_o^{i-1}} \cdot \frac{k_o^R \cdot H_o^{i-1}}{B^{i-1} + k_o^P \cdot H_o^{i-1}} B^{i-1} \cdot D_R^{i-1} \cdot x_{mR}^{i-1} \quad \dots\dots\dots (6.37) \end{aligned}$$

$i = 1 \sim N_S$

(6.37)式において反応物 R から変換してくる量と分配係数を定数と仮定すると、6.2.1と同様な連立方程式が成分毎に得られる。

$$A_j \cdot X_{mj} = b_j \quad (j = 1 \sim N_c)$$

係数行列Aは三重対角であるから、EITRC1ルーチンによる反復法で解が得られる。反応物のバランス式は(6.37)式の右辺の他成分からの変換項をなくし、インデックスP→Rとすれば得られる。反復計算は $j = 1 \sim N_c$ の順で実行されるので、成分番号を $R < P$ とすれば(6.37)式で x_{mR}^i ($i = 1 \sim N_S$)を既知と仮定することに問題はない。

6.2.3 Pu(IV)-U(IV)反応の場合

ウラナスによるプルトニウムの還元反応においても“擬一次反応定数”を定義して、6.2.2のEITRC1のように各段毎の化学平衡計算を行わずに成分毎の連立方程式を解く反復法も可能であるが、反応が成分濃度の非線型関数になっているため発散しやすくなる。このため各段毎に成分の化学平衡をとりながら、計算を進めて行く方法をとる。これはEITRC2ルーチンと同じ反復法になる。バランス式において各段への入力項には1回前の反復の値が使われるので、原理的には過渡計算の差分式と同じ非線型連立方程式(未知数は成分数)を各段毎に解くことになるが、過渡計算のような解法によらず、反応項を直接解く方法を採用した。

Mixer部のある段の定常時のバランスを 図 6.3 のように表わす。

成分番号

- 1 H⁺
- 2 UO₂²⁺
- 3 Pu⁴⁺
- 4 Pu³⁺
- 5 U⁴⁺
- 6 HNO₂
- 7 N₂H₅⁺

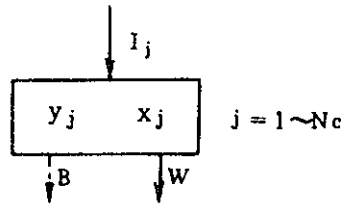
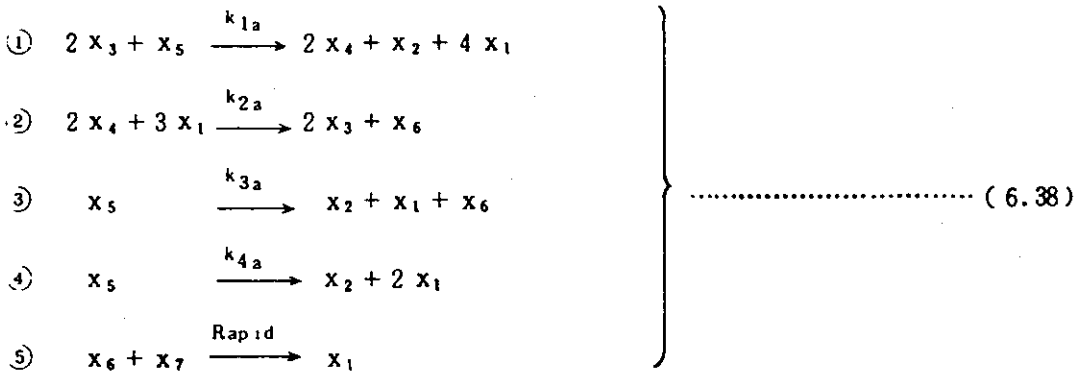


図 6.3 定常時のバランス

反応式 (1)~(5)の反応番号は3.4.1参照を、



とおく。有機相においても同様である。

酸とヒドラジンは反応量に比べ十分多量に供給されているので、まずウランとプルトニウムのバランスを考える。

$$R_j = W + D_j \cdot B \quad (j = 1 \sim N_c) \quad \dots\dots\dots (6.39)$$

とおく。 x_1, x_6, x_7 を定数と考えて反応定数の中へ組み入れる。まず x_5 (U(IV)) のマスバランス式は、

$$R_5 \cdot x_5 + 0.5 k_1 \cdot x_3 \cdot x_5 + k_{34} \cdot x_5 - I_5 = 0 \quad \dots\dots\dots (6.40)$$

ここで、

$$k_1 = k_{1a} + k_{10} \cdot D_5 \cdot D_3$$

$$k_{34} = k_{3a} + k_{4a} + (k_{30} + k_{40}) \cdot D_5$$

となる。この式から x_5 を x_3 の関数として表わすことができる。

$$x_5 = \frac{I_5}{R_5 + 0.5 k_1 \cdot x_3 + k_{34}} \dots\dots\dots (6.41)$$

x_3 についても、

$$R_3 \cdot x_3 + k_1 \cdot x_3 \cdot x_5 - k_2 \cdot x_4 - I_3 = 0 \dots\dots\dots (6.42)$$

ここで、 $k_2 = k_{2a} + k_{20} \cdot D_4$

と表わされる。全プルトニウムを入力を $I_p (= I_3 + I_4)$ とおくとプルトニウムのマスバランスより、

$$x_4 = \frac{I_p - R_3 x_3}{R_4} \dots\dots\dots (6.43)$$

とおけるから (6.43) 式を (6.42) 式へ代入して x_4 を消去すると、

$$R_3 \cdot x_3 + \frac{k_1 \cdot I_5 \cdot x_3}{R_5 + k_{34} + 0.5 k_1 \cdot x_3} - \frac{k_2 (I_p - R_3 x_3)}{R_4} - I_3 = 0 \dots (6.44)$$

となる。ここで、 $R_K = R_5 + k_{34}$ とおいて両辺に $(R_K + 0.5 k_1 \cdot x_3)$ をかけると、

$$\left[0.5 k_1 R_3 + \frac{0.5 k_1 \cdot k_2 \cdot R_3}{R_4} \right] x_3^2 + \left[R_3 \cdot R_K + k_1 \cdot I_5 - \frac{0.5 k_1 \cdot k_2 \cdot I_p}{R_4} + \frac{k_2 \cdot R_3 \cdot R_K}{R_4} - 0.5 k_1 \cdot I_3 \right] x_3 - \frac{k_2 \cdot R_K \cdot I_p}{R_4} - I_3 \cdot R_K = 0 \dots (6.45)$$

という x_3 に関する2次方程式 (6.45) となる。さらに、

$$\left. \begin{aligned} a &= k_1 \cdot R_3 + \frac{k_1 \cdot k_2 \cdot R_3}{R_4} \\ b &= R_3 \cdot R_K + k_1 \cdot I_5 - 0.5 k_1 \cdot I_3 + \frac{k_2 \cdot R_3 \cdot R_K - 0.5 k_1 \cdot k_2 \cdot I_p}{R_4} \\ c &= I_3 \cdot R_K + \frac{k_2 \cdot R_K \cdot I_p}{R_4} \end{aligned} \right\} \dots (6.46)$$

とおくと、(6.45) 式は、

$$0.5 a \cdot x_3^2 + b \cdot x_3 - c = 0$$

となるから、 x_3 は (6.47) 式で計算される。

$$x_3 = \frac{-b + \sqrt{b^2 + 2ac}}{a} \dots\dots\dots (6.47)$$

$a > 0, c > 0$ であるから x_3 は負になることはない。 x_4 と x_5 はそれぞれ (6.43)、(6.41)

式で求まる。他の成分については、反応のバランスより以下のように求まる。

$$x_2 = \frac{I_2 + I_5 - R_5 \cdot x_5}{R_2} \dots\dots\dots (6.48)$$

反応②, ③によって生じる亜硝酸を Δx_6 とおくと、反応式より

$$\Delta x_6 = (k_{2a} + k_{2o} \cdot D_4) x_4 + (k_{3A} + k_{3o} \cdot D_5) x_5 \dots\dots (6.49)$$

となり、これがヒドラジン (x_7) と反応して消滅する量 ΔR は、

$$\Delta R = \text{AMIN} (\Delta x_6, I_7) \dots\dots\dots (6.50)$$

と表わされる。これらから x_1, x_6, x_7 は、

$$x_1 = \frac{I_1 + 2 k_{1o} x_3 \cdot x_5 - 1.5 k_2 \cdot x_3 + (k_3 + 2 k_4) x_5 + \Delta R}{R_1} \dots\dots (6.51)$$

$$x_6 = \frac{I_6 + \Delta x_6 - \Delta R}{R_6} \dots\dots\dots (6.52)$$

$$x_7 = \frac{I_7 - \Delta R}{R_7} \dots\dots\dots (6.53)$$

と計算される。これで x_1, x_6 の新しい値が計算されたので、新たな反応速度定数と分配係数 D を求め、以上の操作を収束するまでくり返す。

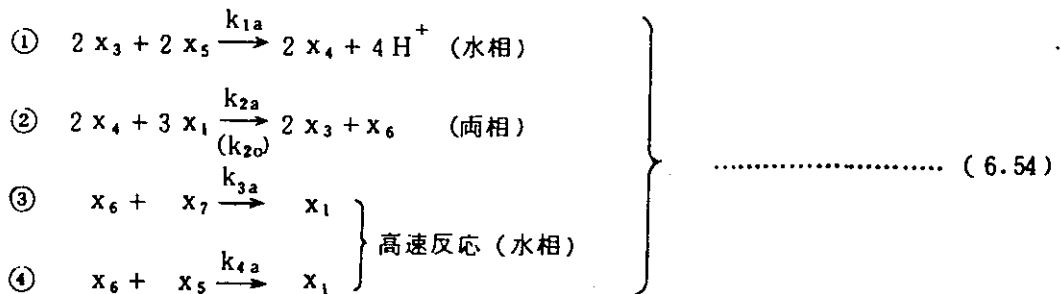
通常、酸とヒドラジンは反応量に比べ多量に存在するので、亜硝酸濃度 (x_6) は常にゼロとなり、酸の変動も小さい。相対誤差 10^{-5} まで収束するのに必要な反復数は5回前後である。有機相濃度 y_j は $y_j = D_j \cdot x_j$ によって求まる。

Settler 部では水相、有機相についてそれぞれ独立のマスバランス式が同様に解かれる。基本的には同じ式の展開となるので説明は省略する。ただし有機相で生じた亜硝酸はヒドラジンによって分解されない。

以上に述べたPu(IV)-U(IV)反応の定常計算はSTDYR2ルーチンで実行される。

6.2.4 Pu(IV)-HAN反応の場合

プルトニウムの還元反応は3.4で説明されているように、Pu(IV)とPu(III)の濃度の2乗に関する速度式であり、反応の主体はプルトニウムの酸化状態にあるので、プルトニウムのバランスを中心にした解法を採用した。反復法は1段毎に平衡計算をくり返して行くEITRC2ルーチンと同じ方法である。反応は3.4より、



と表わされる。有機相でも生じるのは反応②だけである。反応③④は高速のため、生じた亜硝酸はただちにHANとヒドラジンによって分解されるとする。成分番号は3.5.3と同じである。

A) Mixer部

反復計算において段内のバランスを考える時、段への入力項には1回前の値が使用されるので定数として扱われる。1段のPu(IV)とPu(III)のバランスは図6.4に表わされる。

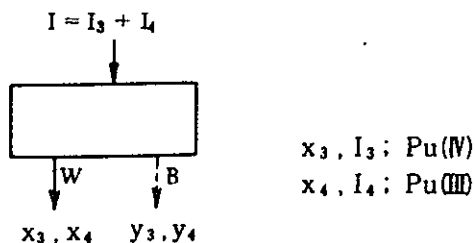


図6.4 プルトニウムの流れ

プルトニウム全体のマスバランスより、

$$\left. \begin{aligned} R_3 &= W + D_3 \cdot B \\ R_4 &= W + D_4 \cdot B \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.55)$$

とおくと、

$$x_4 = \frac{I - R_4 \cdot x_3}{R_4} \dots\dots\dots (6.56)$$

と表わされる。(6.54)の反応速度式において、プルトニウム(x₃, x₄)以外の成分濃度を定数と仮定して速度定数 k_{1a}, k_{2a}, k₂₀ に組み込むと、Mixer内におけるPu(III)(x₄)の正味の反応による増加量ΔP₄は、

$$\Delta P_4 = \frac{k_{1a} \cdot x_3^2}{x_4^2} - k_{2a} \cdot x_4 - k_{20} \cdot y_4 \quad (\text{mole/hr}) \dots\dots\dots (6.57)$$

となるから、Pu(III)の入出力バランスより、

$$R_4 \cdot x_4 - \frac{k_{1a} \cdot x_3^2}{x_4^2} + k_2 \cdot x_4 - I_4 = 0 \dots\dots\dots (6.58)$$

ここで、 k₂ = k_{2a} + k₂₀ · D₄

が成り立つ。酸、HANはプルトニウムに比べ多量に存在するので、これらの濃度を定数とおいで、3.5.3の(3.70)式を(6.57)式のように近似して反復計算を行うことは妥当である。

(6.57)式の両辺にx₄²をかけて整理し、関数 f(x₃) = 0を以下に定義する。

$$f(x_3) = k_{1a} \cdot x_3^2 - (R_4 + k_2) x_4^3 + I_4 \cdot x_4^2 = 0 \dots\dots\dots (6.59)$$

(6.56)式を用いれば、f(x₃)はx₃の3次方程式となる。f(x₃)の微分式f'(x₃)は

(6.56), (6.59)式を用いて

$$f'(x_3) = 2 k_{1a} \cdot x_3 + [3(R_4 + k_2) x_4^2 - 2 I_4 \cdot x_4] \frac{R_3}{R_4} \quad (6.60)$$

と表わされるので、プルトニウム (x_3, x_4) 以外の成分濃度と分配係数を一定とみなした場合の $Pu^{3+}(x_4)$ と $Pu^{4+}(x_3)$ の濃度は Newton 法により計算できる。

$$x_3^{new} - x_3^{old} = \frac{f(x_3^{old})}{f'(x_3^{old})} \quad (6.61)$$

反応②によって生じる亜硝酸を Δx_6 とおくと、

$$\Delta x_6 = 0.5 k_2 \cdot x_4 \quad (\text{mole/hr}) \quad (6.62)$$

となる。反応③, ④によって亜硝酸が分解される量 ΔR は

$$\Delta R = AMIN(\Delta x_6, I_5 + I_7) \quad (6.63)$$

となる。通常 $\Delta R = \Delta x_6$ である。他の成分濃度はこれより、

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= \frac{I_1 + \frac{2 k_{1a} \cdot x_4^2}{x_4^2} - 1.5 k_2 \cdot x_4 + \Delta R}{R_1} \\ x_2 &= \frac{I_2}{R_2} \\ x_5 &= \frac{I_5 - \frac{k_{1a} \cdot x_3^2}{x_4^2} - \frac{k_{4a}}{k_{3a} + k_{4a}} \Delta R}{R_5} \\ x_6 &= \frac{\Delta x_6 - \Delta R}{R_6} \\ x_7 &= \frac{I_7 - \frac{k_{3a}}{k_{3a} + k_{4a}} \Delta R}{R_7} \end{aligned} \right\} \quad (6.64)$$

と計算される。これですべての成分濃度が求まるので、新たに分配係数 D_j と反応速度定数 k_{1a}, k_{2a}, k_{20} を計算し、以上の操作を収束するまでくり返す。相対誤差 10^{-5} 程度までに収束するのに必要な反復数は5回位である。 x_3 を求める Newton 法においても、5回位の反復数で十分な (10^{-6} 程度) 精度が得られる。

B) Settler 部

水相部については、Mixer 部と同様な操作で計算されるので説明を省略する。有機相部では反応②しか生じないのでバランス式は簡略化される。3.5.3より、亜硝酸がゼロならば反応は起きないので、Mixer 部と同じ濃度となる。もし亜硝酸濃度がゼロでないならば ($[HNO_2] > 0$)、 H^+, Pu^{3+}, HNO_2 がプルトニウムの再酸化反応に関連する。3成分のマスバランス式は、

$$\left. \begin{aligned} y_1 - y_{m1} + 1.5 k \cdot y_1^{3.1} \cdot y_4 \cdot y_6 &= 0 \\ y_4 - y_{m4} + k \cdot y_1^{3.1} \cdot y_4 \cdot y_6 &= 0 \\ y_6 - y_{m6} - 0.5 k \cdot y_1^{3.1} \cdot y_4 \cdot y_6 &= 0 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (6.65)$$

ここで、 $k = \frac{k_{20}}{B}$ (k_{20} は 3.5.3 の (3.66) 式の値)

y_{m1}, y_{m4}, y_{m6} は Mixer 部の有機相濃度を示す。

と表わされる。(6.65) 式は非線型 3 元連立方程式である。単純な反復法によって (6.65) 式を解く。

- (1) 反応量 $R (= y_1^{3.1} \cdot y_4 \cdot y_6)$ を予測する。
- (2) (6.65) 式より y_1, y_4, y_6 を求める。
- (3) 新しい反応量 R_1 を計算する。
- (4) $R \approx R_1$ ならば終了。
- (5) $R \leftarrow R_1$ として(2) よりくり返す。

以上の Pu(IV)-HAN 反応の定常計算は STDYR1 ルーチンで実行される。

6.2.5 定常計算のまとめ

6.2.1 ~ 6.2.4 にて 4 個の定常計算法が提示されたが、ここではそれらの関係を明らかにしておく。

MIXSET コードでは STEADY というサブルーチンが定常計算の制御を行なっている。

STEADY ルーチンの流れの概略を図 6.5 に示す。

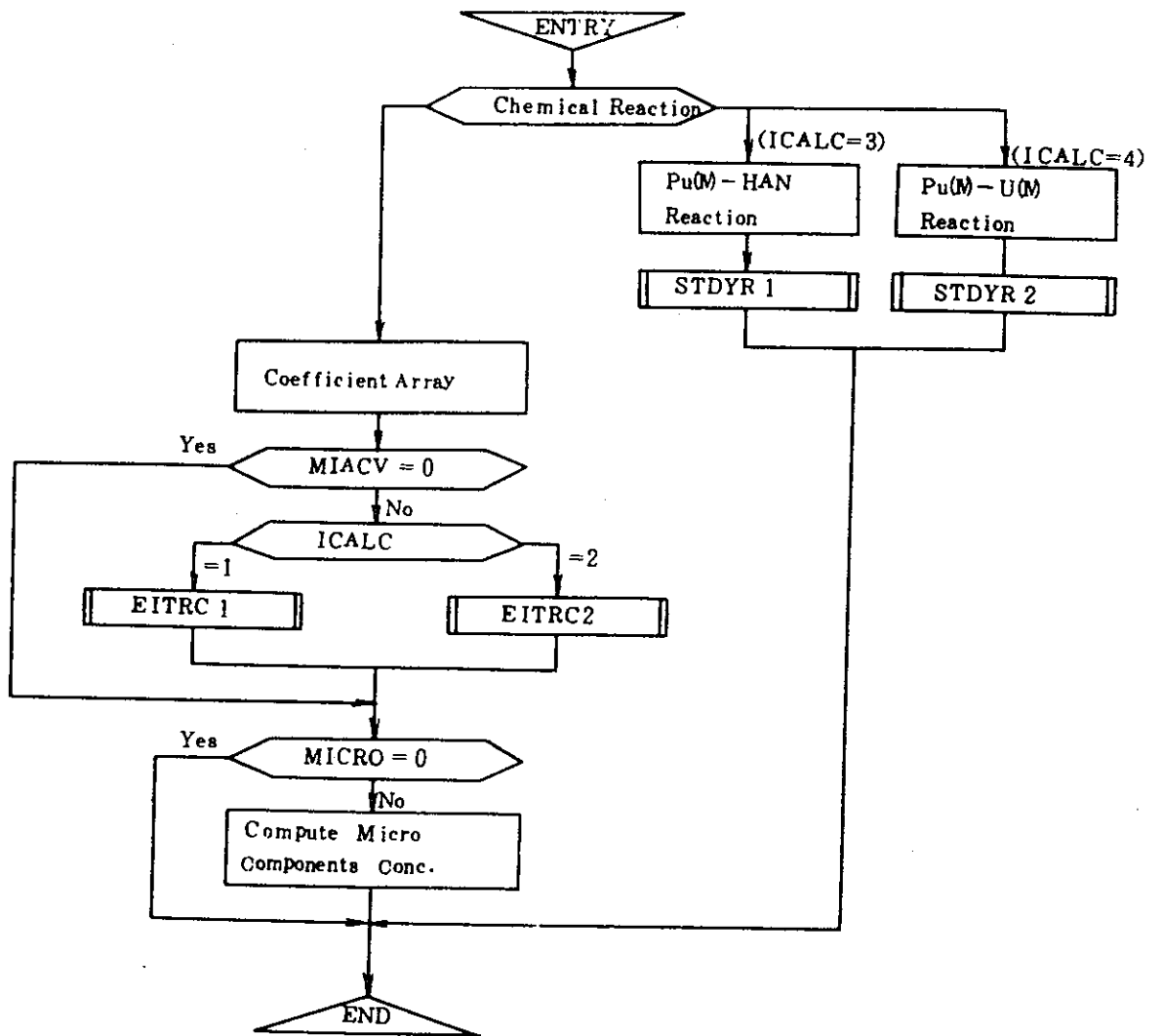


図 6.5 STEADYルーチンの概略フロー

入力フラッグ ICALC によって計算ルーチンを指定する。プルトニウムの非線型酸化還元反応を考慮する計算では、STDYR1かSTDYR2ルーチンが自動的に選択される。段効率と1次反応の指定は成分毎に行なわれる。分配係数がInteractiveの場合(MIACV>0),反復法はEITRC1,EITRC2のどちらでもよく、入力フラッグICALCで指定できる。計算時間はEITRC1の方が早いので、EITRC1による反復を選択する方が望ましい。ただし、マクロ成分で段効率が有機相について定義される場合は、EITRC1を選択することはできない。

収束判定

通常、定常状態の収束判定としては、バンク内の全体の物質収支によることが多い。MIXSETコードでは化学反応が扱われるので、物質収支によっては収束判定が行なえない。そこで、反復計算の定石通り、

$$\frac{|x_j^{iP} - x_j^{iP-1}|}{x_j^{iP}} \leq \epsilon_{1\sim4} \quad \dots\dots\dots (6.66)$$

i = 1~Ns
j = 1~MIACV

となった時、定常状態が得られたと判断される。Pは反復回数である。各ルーチンの許容誤差(ε_{1~4})と反復上限数(ε_{5~8})は入力で指定できる(7.2のEPSILONカード参照のこと)。また(6.66)式にて、x_j^{iP} ≤ 10⁻¹⁰の小さな値については判定が行なわれない。

EITRC1ルーチンを使う場合は、各段内での化学平衡をとらないで反復するので、若干条件をきびしくした方がよい。

EITRC2, STDYR1, STDYR2ルーチンの場合、各段内で化学平衡のための反復が行なわれるが、これも(6.66)式と同様に、

$$\frac{|x_j^P - x_j^{P-1}|}{x_j^P} \leq \gamma \quad \dots\dots\dots (6.67)$$

j = 1~MIACV

となる。γはε_{2~4}の1/2にセットされる。この反復上限は15回である。STDYR1ルーチン内ではプルトニウムのバランスを計算するためNewton法が用いられるが、これに対する許容誤差はε₃の1/10とする。

6.3 最適化の手順

PATRN, EXPLORルーチンでパターン探索法が実行される。回収率η, ξを1回計算するためには定常ルーチンIFLOWS, STEADYが呼ばれる。定常計算1回には1秒~10秒位かかるので、最適化計算はかなりの時間が必要である。このため定常計算の上限を50回に押え、計算時間が多くなることを防止している。

最適化の収束条件は、ステップサイズの半減回数が5回以上になった時とする。

入力はOPTIMIZEカードで行なわれる。

7. 入力仕様

7.1 Free Format 入力について

MIXSETの入力はすべてDATARDルーチンによるFree Formatである。これによりデータ入力は簡単になる。

カードの構成

入力カードはKeyword, Data と Separator の3つから成っている。

Keyword : 入力カードの種類を表わすもので、各カードの最初にパンチされていなければならない。Keyword が5文字以上の時、最初の5文字のみが意味をもつ。

Data : 入力データ。Separator によって区切られる。

数字とホレリス定数の2種類ある。

数字 : 整数と実数 (10.0, 1.0E+1, 10+1, 1+1等)

ホレリス : $nH\bigcirc\bigcirc\cdots\bigcirc$, ($n \leq 10$)

Separator : Keyword と Data 及び Data と Data の区切り。

ブランク, カンマ(,), カッコ(()), \$ のいずれでも良い(ただし\$は特別な意味をもつ)。

これらのSeparator が2つ以上あっても機能は同じである。

コラム1~72までがKeyword, Data, Separator の領域であり、73コラム以降はコメント領域である。

特殊 Character について

Asterisk * : このコラム以降がコメントであることを示す。

Keyword の代りに*を使うとこのカードがTitleカードとなる。

Titleカードが2枚以上の場合、最初のイメージのみがプリントされる。

Dollar \$: Separator であると同時に、Data が次のカードに続くことを意味する。

Repetition R : Data において1.0R4とパンチすると1.0が4個という意味になる。

同じdataが続く時にはこのRを使うと便利である。

次ページ以下に、各入力カードの詳細な説明がなされる。この中でSTAGE, COMPONENTカードは他のカードより先に入力されなければならない。その他のカード順序は自由であるが、後に入力されたものが優先される。このことは分配係数入力に際して注意を要する。

7.2 入力カードの説明

Free Format 入力によるので必要な項目についてのみ入力すればよく、入力の順序も自由で

ある。連続ランの時、前に入力したイメージがそのまま残っているので、変更したい項目だけ入力すればよい。入力カード項目は表 7.1 に示す 25 種類がある。

表 7.1 入力カード項目

番号	KEYWORD	内 容
1	STAGE	バンク数と段数
2	COMPONENT	成分数と種類
3	UNITS	各成分の入力単位と内部単位への換算係数
4	VOLUME	Mixer, Settler の各段の容積
5	CHARGE	TBP vol. 分率と各成分の電荷と TBP 配位数
6	CONTROL	計算制御データ
7	TAU	タイムステップ
8	EPSILON	許容誤差
9	HEIGHT	Settler の初期界面レベル
10	LEVEL	界面レベルの時間変化
11	FEEDS	供給液の流量と成分濃度
12	RECYCLE	水相のリサイクルフロー
13	COEFFICIENT	平衡定数の多項式係数群
14	EQUILIBRIUM	平衡定数
15	VDIST	分配係数 (表)
16	CDIST	分配係数 (定数)
17	REACTION	化学反応
18	INITIAL	初期値濃度
19	EFFICIENCY	段効率
20	OPTIMIZE	最適化オプション
21	TPLOT	濃度 VS. 時間プロット
22	SPLOT	段内濃度プロファイル
23	PRINT	過渡計算におけるプリント時間
24	BEGIN	1 ケースのデータ入力の終了と計算の開始を表示
25	ENDED	計算終了を示す最後のカード

1

STAGE NBNKS, NS 1, NS 2, IS 1, NS 3, IS 2

- NBNKS = Bank の数
 NS 1 = Bank 1 の Stage 数
 NS 2 = Bank 2 の Stage 数 (以下 NBNKS > 1 の時だけ)
 IS 1 = Bank 1 の有機相流が入る Bank 2 の Stage No
 NS 3 = Bank 3 の Stage 数 (以下 NBNKS = 3 の時だけ)
 IS 2 = Bank 2 の有機相流が入る Bank 3 の Stage No

2

COMPONENT NCOMP, ICOMP, (NDCAL (N), N=1~NBNKS),
 (NAME (J), J=1, NCOMP)

- NCOMP = 成分数 (≤ 8)
 ICOMP = 成分の設定フラッグ
 = 0 すべて入力する
 = 1 $H^+ - UO_2^{2+} - Pu(V) - Pu(III) - HAN - HNO_2 - HYD$ System
 = 2 $H^+ - UO_2^{2+} - Pu(V) - Pu(III) - U(V) - HNO_2 - HYD$ System

NDCAL (N) = Bank N の Interactive 成分数 (MIACV)

NAME (J) = 成分 J の名前 nH○○…○ と入力する。

注) COMPONENT カードが省略された時は NCOMP = 7, ICOMP = 2,
 NDCAL (N) = 5 とセットされる。

3

UNITS C₁, R₁, C₂, R₂, ……………, C₈, R₈, C₉, R₉, C₁₀, R₁₀, C₁₁, R₁₁

- C₁ = 成分 1 の単位 (ホレリス: nH○○…○○)
 R₁ = C₁ から内部単位への換算係数
 例えば成分 1 が U²³⁸ として入力単位 C₁ = g/l であり,
 なかの計算では Mole の時 R₁ = 1/238 とする。
 C₂, R₂, ……………, C₈, R₈ も同様それぞれの成分に対応する。
 C₉ = 時間の単位 (ホレリス)
 R₉ = Feed stream table の時間と反応速度定数の変換定数
 C₁₀ = 流量の単位 (ホレリス)
 R₁₀ = C₆ の内部単位への変換定数
 C₁₁ = 容積の単位
 R₁₁ = C₇ の内部単位への変換定数

注) MIXSET内部での基本単位は濃度 (mole/ℓ), 流量 (ℓ/hr), 時間 (hr) である。

UNITS カードが入力されない場合,

C_1	=	6 H (MOLE)	,	R_1	=	1.0
C_2	=	5 H (G/L)	,	R_2	=	4.202×10^{-3}
C_3	=	5 H (G/L)	,	R_3	=	4.184×10^{-3}
C_4	=	5 H (G/L)	,	R_4	=	4.184×10^{-3}
C_5	=	5 H (G/L)	,	R_5	=	4.202×10^{-3}
C_6	=	6 H (MOLE)	,	R_6	=	1.0
C_7	=	5 H (G/L)	,	R_7	=	3.125×10^{-2}
C_9	=	4 H (HR)	,	R_9	=	1.0
C_{10}	=	6 H (L/HR)	,	R_{10}	=	1.0
C_{11}	=	3 H (L)	,	R_{11}	=	1.0

の値が使われる。

4

VOLUME HMi (i=1~NST), HSi (i=1~NST)

HMi = Mixer の容積 (Bank 1 の Stage 1 から NST 個続けて入力する)

HSi = Settler の容積 (同上)

$$\text{ここで } NST = \sum_{i=1}^{NBKNS} NSi$$

5

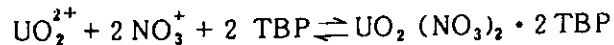
CHARGE CTBP, $n_1, m_1, \dots, n_j, m_j$

CTBP = TBP の Volume 分率 (0.30 default)

n_j = 成分 j の電荷

m_j = 成分 j の TBP 配位数, $j = 1 \sim NCOMP$

注) UO_2^{2+} (Uranyl) イオンの場合



と表わされるので, $n = 2, m = 2$ となる。

n_j, m_j は実数または整数どちらでもよい。

CTBPM (モル濃度) = $3.6538 \times CTBP$

6

CONTROL ICALC, IFLOW, INCON, TFINL, CPLIM

ICALC = 過渡計算のみ

- | | | |
|-------------|---|-----------------------------------|
| = 1 EITRC 1 | } | による定常計算, 自分で入力した場合
続けて過渡計算を行う。 |
| = 2 EITRC 2 | | |
| = 3 STDYR 1 | | |
| = 4 STDYR 2 | | |

IFLOW = 0 供給液流量, 濃度ともに一定

- = 1 $t = 0, t > 0$ の2種の供給液があり, 定常計算では $t = 0$ の供給液, 過渡計算では $t > 0$ の供給液を使う。
- = 2 $t > 0$ にて供給液の濃度のみが変化する。
- = 3 $t > 0$ にて供給液の濃度, 流量ともに変化する。

INCON = 0 初期濃度をゼロとする。

- = 1 前ケースの濃度分布を初期値とする。
- = 2 x_m の初期値のみを入力する。
- = 3 x_m, y_m, x_s, y_s の初期値をすべて入力する。

TFINL = 過渡計算の終了時間

CPLIM = CPU タイムリミット (sec)

注) NBNKS > 1 のとき, ICALC は各 Bank 毎に指定でき, ICALC は,

$$ICALC = \sum_{N=1}^{NBNKS} IC_N \cdot 10^{(NBNKS-N)}, \quad IC_N \text{ は } 1, 2, 3 \text{ or } 4$$

と入力する。例えば, Bank 1 を EITRC 1, Bank 2 を STDYR 1, Bank 3 を EITRC 2 で計算したい場合, ICALC = 132 とする。

7

TAU τ_1, τ_2, τ_3

- τ_1 = Bank 1 のタイムステップ
- τ_2 = " 2 "
- τ_3 = " 3 "

注) MIXSET コードは固定ステップ計算を行うので, τ_n は,

$$\tau_n \leq \frac{\text{Min. Mixer volume } (\ell)}{\text{Max. Flow rate } (\ell/h)} \\ \text{in Bank } n$$

とすること。TAU カードが省略された時, τ_n はプログラム内で自動的に計算される。

8

EPSILON I, $\epsilon(I)$,

各反復計算の収束の相対許容誤差 ϵ は反復の上限数を指定するカードであり、番号 I と $\epsilon(I)$ がペアで必要なものだけ入力できる。

- $\epsilon(1) =$ EITRC 1 計算の収束許容誤差 (10^{-5} default)
 $\epsilon(2) =$ EITRC 2 " (10^{-4} ")
 $\epsilon(3) =$ STDYR 1 " (10^{-3} ")
 $\epsilon(4) =$ STDYR 2 " (10^{-3} ")
 $\epsilon(5) =$ EITRC 1 計算の反復上限数 (200 default)
 $\epsilon(6) =$ EITRC 2 " (150 ")
 $\epsilon(7) =$ STDYR 1 " (150 ")
 $\epsilon(8) =$ STDYR 2 " (150 ")
 $\epsilon(9) =$ 過渡計算の段内反復の収束許容誤差 (10^{-3} default)
 $\epsilon(10) =$ 分配係数計算における Newton 法の許容誤差 (10^{-6} default)

9

HEIGHT HL_i (i = 1~NST)

HL_i = Settler の界面のレベル高さ (Fraction)

Bank 1 の Stage 1 から NST 個続ける。

Default Value はすべて 0.5 である。

10

LEVEL N, I, t₁, l₁, t₂, l₂,, t_n, l_n

N = Bank No (1~NBNKS)

I = Bank N の Stage No (1~NS_N)

(t_i, l_i) = 時間とレベル高さ (2つで組み)

最大 10 個入力可能

注) 全 Stage のレベル高さ変化入力が可能である。各 Stage 毎にこの LEVEL カードで入力する。初期のレベルは HEIGHT カードで規定されるから、不連続にならないようにすること。
 t₁ = 0 とし、少なくとも 2 組は入力する事。

11

FEEDS $I_B, N, I, t_1, F_1, C_1^1, \dots, C_{NCOMP}^1, t_2, F_2, C_1^2, \dots, C_{NCOMP}^2, \dots$

I_B = Feed Stream Block No (≤ 15)

N = Bank No

I = Feed streamが入力する Stage No

> 0 なら水相流

< 0 なら有機相流

t_1 = 時間

F_1 = 時間 t_1 における流量

C_j^1 = 時間 t_1 における成分 j の濃度
($j=1 \sim NCOMP$)

以下同様に最大 20 ステップまで入力できる。

注) 各 Feed Block 毎にこの FEEDS カードが必要である。

$t_1 = 0$ とすること。1 セットだけでも良い。

このカードの単位は UNITS カードにより決められる。

12

RECYCLE $N^1, I_1^1, I_2^1, W_R^1, N^2, I_1^2, I_2^2, W_R^2, \dots$

W_R = Recycle flow rate

Bank N の Stage $I_1 \sim I_2$ の間に W_R が存在する。

4 個で 1 組となり、いくつ入力しても良い。

入力しなければゼロとなる。

13

COEFFICIENT $N_B, J, I_B, ((C_{jm}, m=1, 4), j=1, MIACV)$

N_B = Bank No

J = 成分 No

I_B = 係数表の No $|I_B|$

$I_B < 0$ とした場合、 $|I_B|$ 番目の係数表は入力されていることを示し、 C_{jm} を省略する。

$$C_{jm} = K_j = C_{j1} + C_{j2} \cdot \mu + C_{j3} \cdot \mu^2 + C_{j4} \cdot \mu^3$$

の係数であり、成分 J の分配係数をフィットさせる係数群である。

注) 各成分毎に MIACV 個の係数セットが必要である。

係数は 10 個まで入力可能

14

EQUILIBRIUM $N_B, (K_j, j = 1 \sim MIACV), \dots\dots$
 ($N_B, K_1, \dots, K_{MIACV}$ がセットとなりバンク数だけ入力できる)

$N_B =$ Bank No

$K_j =$ 成分 J に適用される平衡定数

注) 平衡定数がイオン強度に依存せず一定の場合このカードを用いる。

15

VDIST $I_B, N, J, J_R, D_1, D_2, \dots, D_{NS}$ if $J_R = 0$
VDIST $I_B, N, J, J_R, C_1, D_1, C_2, D_2, \dots, C_n, D_n$ if $J_R > 0$

$I_B =$ 分配係数のブロック No (最大 10 個)

$N =$ Bank No

$J =$ 成分 No

$J_R \begin{cases} = 0 & \text{分配係数は Stage 毎に入力される。} \\ & \text{(NS は Bank N の Stage 数)} \\ > 0 & \text{成分 J の分配係数は成分 } J_R \text{ の関数である。} \\ < 0 & \text{ブロック } I_B \text{ はすでに入力されているので以下の表は省略する。} \end{cases}$

$D_i =$ Stage 1~NS の分配係数
 ($i = 1 \sim NS$)

$C_n =$ 成分 J_R の濃度

$D_n = C_n$ に対応する分配係数 ($n \leq 20$)

注) 当然 $J = J_R$ でも良い。 $J \geq J_R$ とすること。

Table のサイズにより, Stage 数が 21 個に押えられる。

16

CDIST $N, J, D, N, J, D, \dots\dots$

$N =$ Bank No

$J =$ 成分 No

$D =$ Bank N, 成分 J の一定の分配係数

注) 分配係数が一定の場合このカードを用いる。

N, J, D 3 個で 1 組となり, 必要なだけ入力できる。

17

REACTION N, J if NDATA = 2
REACTION N, J, K, k_a , k_o , ... if NDATA ≥ 5

NDATA (入力データ数) = 2 のとき,

N = Bank No
 J = 1 Bank N で Pu-HAN 反応が起こる。
 = 2 " Pu-U(N) "

NDATA ≥ 5 のとき, 1次反応定数を指定する。

N = Bank No
 J = 反応成分 No
 K = 成分 J が反応して成分 K になる。もし K = 0 または K = J とした場合は消滅反応となる。
 k_a = 水相中の成分 J の 1次反応速度定数 (1/hr)
 k_o = 有機相 "

18

INITIAL $N_B, J, M, (A(I), I=1 \sim N_S)$
 N_B, J = 初期値を入力する成分の No (J) と Bank No (NB)
 $M = 1 (XM(J, I), I=1 \sim N_S)$
 $2 (YM(J, I), I=1 \sim N_S)$
 $3 (XS(J, I), I=1 \sim N_S)$
 $4 (YS(J, I), I=1 \sim N_S)$ } を入力する。

19

EFFICIENCY $N_B, J, (EF(J, I), I=1 \sim N_S)$
 N_B = 段効率を入力する Bank No
 J = " 成分 No
 < 0 有機相について定義
 > 0 水相 "
 EF = 段効率 (0 ~ 1)

注) 反応成分について段効率を定義しないこと。

有機相について定義する場合, 定常計算の EITRC 1 ルーチンは使用不可。

20

OPTIMIZE $J_P, J_F, \eta_e, \xi_e, r_1, r_2, (M, J_s, F_{up}, F_{low}, F_{step}) \dots$

()内を続ける

J_P = Organic outlet により回収率(η)を設定する成分の No

J_F = Aqueous outlet により回収率(α)を設定する成分の No

η_e = 成分 J_P の目標回収率 ($\eta_e \rightarrow \text{ETA}$)

ξ_e = 成分 J_F の目標回収率 ($\alpha_e \rightarrow \text{DFR}$)

r_1, r_2 = 加重平均係数

M = 最適化すべき供給液ブロック No

J_s = 供給液ブロック M 中の変数

$J_s = 0$ 流量

> 0 成分 J_s の濃度

$F_{up}, F_{low}, F_{step}$ = 変数の上限値, 下限値及び最小増分値

注) 流量最適化は第 1 バンク のみに適用される。

$$\eta = \frac{B^{NS} \cdot y_S^{NS}(J_P)}{\sum_i (B_i^i \cdot y_i^i(J_P) + W_i^i \cdot x_i^i(J_P))}$$

$$\xi = \frac{W^i \cdot x_S^i(J_F)}{\sum_i (B_i^i \cdot y_i^i(J_F) + W_i^i \cdot x_i^i(J_F))}$$

つまり, 最小化される関数 F は,

$$F = r_1 (\eta_e - \eta)^2 + r_2 (\xi_e - \xi)^2$$

供給液ブロックの指定は 5 個まで, 上記の () 内の入力が 5 個に限られる。

21

T PLOT $N_B, N_S, J, N_{FIG}, N_{unit}, \dots$

N_B, N_S = Transient plot をする Bank 及び Stage No

$N_S > 0$ 水相をプロットする。

$N_S < 0$ 有機相 “

J = プロットする成分 No ($J \leq 4$ or $= 6$)

$J = 6$ ならば流量をプロットする。

N_{FIG} = プロットされる図 No

同じ No のものが 1 枚の中にプロットされる。

N_{unit} = このプロットの単位を示す成分 No, 1 枚の図中には 2 個の単位が可能。

以下 ($N_B, N_S, J, N_{FIG}, N_{unit}$) がセットとなり必要なだけ入力が続ける。
 プロットできる数は 20 本までであり、1 枚の図中には 4 本までプロットされる。

注) 横軸は時間となるが、この軸の最大値は TFINL となる。

22

SPLOT T, L_P, N_B, N_{unit}, J₁, ..., J_{L_P}, (同左)

T = Stage profile をプロットする時間

T は PRINT カードで指定した時間と一致しなければならない。

L_P = プロットする成分の数 (≤ 4)

N_B = プロットする Bank No

N_{unit} = 図の単位 No (J₁ ~ J_{L_P} の中から 1 つ選ぶ)

J₁ ~ J_{L_P} = プロットする成分 No

J_i > 0 水相濃度

J_i < 0 有機相濃度

注) 縦軸の単位は 1 個のみ、また Log スケールである。

Bank が異なる場合は別な図にプロットする。

時間 T は昇順であること、ただし同じ T が存在しても良い。

プロットできる最大数は 30 本、図の最大数は 10 枚である。

23

PRINT T_P¹, N_D¹, T_P², N_D²,

$$T_P^i, N_D^i = \Delta T_P = \frac{T_P^i - T_P^{i-1}}{|N_D^i|} \text{ とする。}$$

時間 T_Pⁱ⁻¹ と T_Pⁱ の間を ΔT_P 毎にプリントする。

もし N_Dⁱ < 0 とするなら、流量、相容積がプリントされる。

T_P⁰ = 0 となっている。

注) プリント数は最大 100 個までである。

ΔT_P とタイムステップ τ の関係について

$$\Delta T_P \geq \tau_{\max}$$

$$NBNKS > 1 \text{ ならば } \Delta T_P \leq 20 \tau_{\min}$$

24

BEGIN 1 ケース入力の終りを示し、実行が開始される。

25

ENDED 実行の終り。Data Cards の最後のカード。

8. プログラムについて

8.1 仕様

MIXSET コードの仕様は以下の通りである。

使用言語：FORTRAN-4 (CDC 6600 FORTRAN Extended)

使用機種：CDC 6600又はCYBER 74

プロッターはCALCOMP 1136

使用メモリー：CM 44 Kwords (60 bit/word)

8.2 サブルーチンの機能とその流れ

MIXSETには1個のメインプログラムと38個のサブプログラム(サブルーチン)がある。

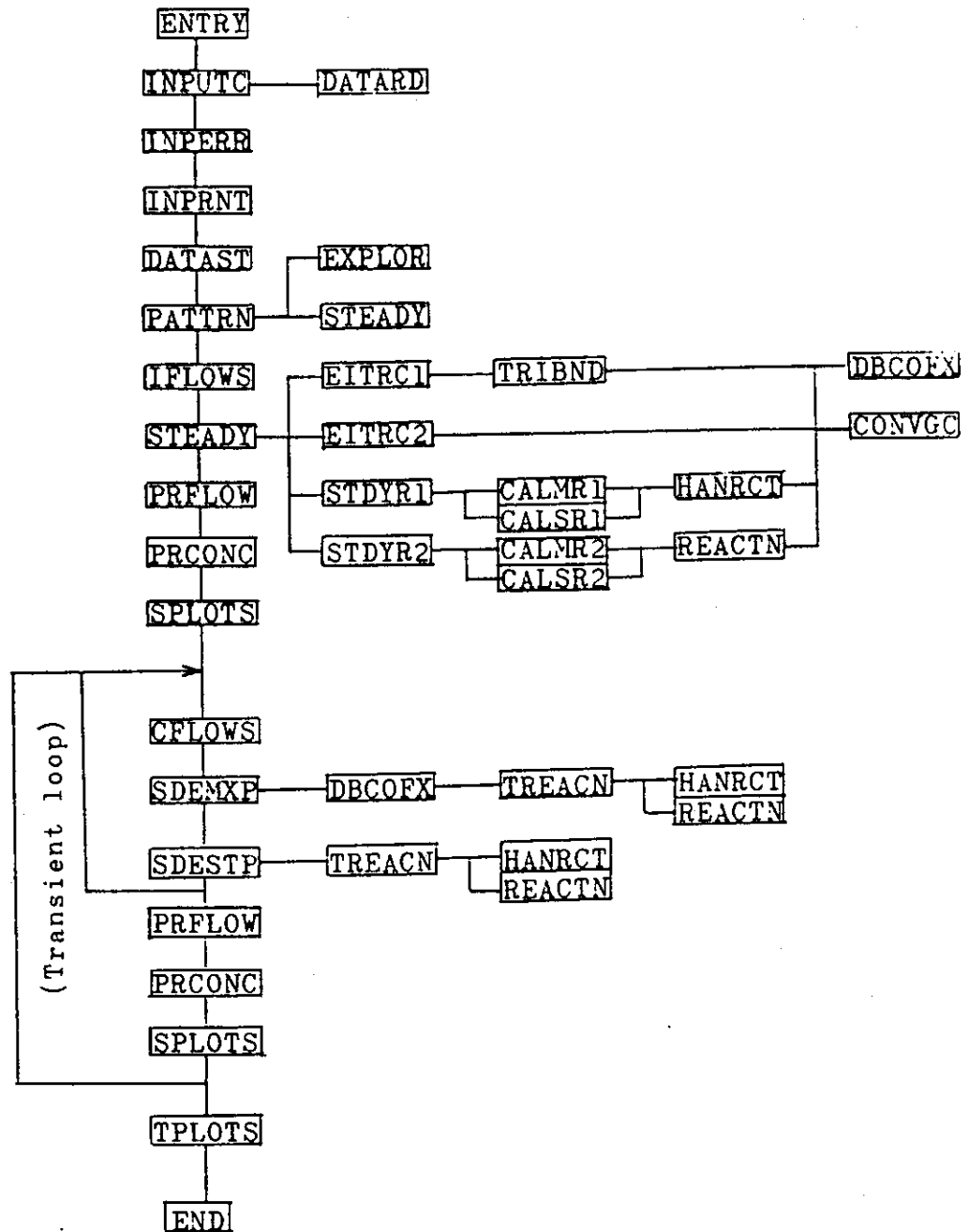
表8.1に各サブルーチンの機能の概略を示す。図8.1にメインプログラム(MIXSET)内での各サブルーチンの流れを示す。

表 8.1 各サブルーチンの機能

名 前	機 能	参照ルーチン名
MIXSET	メインプログラムであり、計算の制御を行う。	
CALMR 1	Pu-HAN反応のMixer部1段内のマスバランス式を解く。	STDYR 1
CALMR 2	Pu-U(N)反応のMixer部1段内のマスバランス式を解く。	STDYR 2
CALSR 1	Pu-HAN反応のSettler部1段内のマスバランス式を解く。	STDYR 1
CALSR 2	Pu-U(N)反応のSettler部1段内のマスバランス式を解く。	STDYR 2
CFLOWS	過渡計算時における流量と相容積を計算する。	MIXSET
CONVGC	定常計算の収束判定を行う。	EITRC 1, EITRC 2 STDYR 1, STDYR 2
DATARD	Free Format 入力ルーチン	INPUTC
DATAST	定数のセットと単位変換を行う。	MIXSET
DBCOPX	分配係数を計算する。	EITRC 1, EITRC 2 CALMR 1, CALMR 2 SDEMP
EITRC 1	定常状態の濃度分布をTRIBNDを使った反復法で解く。	STEADY
EITRC 2	定常状態の濃度分布を段内平衡計算をくり返して行く方法で解く。	STEADY

表 8.1 各サブルーチンの機能 (続き)

名 前	機 能	参照ルーチン名
EXPLOR	パターン決定を行う。	PATTRN
HANRCT	Pu-HAN 反応の速度定数を計算する。	CALMR 1, CALSR 1 TREACN
HEADWR	タイトルのプリント	
IFLOWS	初期流量と相容積を計算する。	MIXSET, PATTRN
INPERR	入力エラーのプリント	MIXSET
INPRNT	入力データのプリント	MIXSET
INPUTC	データ入力を行う。	MIXSET
ONEPRT	PRCONC の補助ルーチン	PRCONC
PATTRN	パターン探索法による最適化計算を行う。	MIXSET
PLDATA	プロット用データを保存する。	MIXSET
PRCONC	濃度分布のプリント	MIXSET
PRFLOW	流量と相容積のプリント	MIXSET
REACTN	Pu - U (IV) 反応の速度定数を計算する。	CALMR 2, CALSR 2 TREACN
REPLAC	タイムステップ毎に変数のおき換えを行う。	MIXSET
SCALE 1	濃度配列のスケールを行う。TPLOTS の補助ルーチン。	TPLOTS
SDEMXP	Mixer 部の差分方程式を解く。	MIXSET
SDESTP	Settler 部の差分方程式を解く。	MIXSET
SPLOTS	Stage プロファイルのプロットを行う。	MIXSET
STDYR 1	Pu-HAN 反応の起こるバンクの定常状態の濃度分布を計算する。	STEADY
STDYR 2	Pu - U (IV) 反応の起こるバンクの定常状態の濃度分布を計算する。	STEADY
STEADY	定常計算の制御, 係数群の計算, マイクロ成分の濃度計算を行う。	MIXSET, PATTRN
TERP	内挿ルーチン	DBCOFX, CFLOWS
TPLOTS	時間変化プロット	MIXSET
TREACN	1次反応定数を計算する。	SDEMXP, SDESTP
TRIBND	二重対行列の連立方程式を解く。	EITRC 1
TWOPRT	化学反応がある場合の反応バランスをプリントする。	PRCONC



8.1 MIXSET Gross Flowdiagram

9. 本文中に使用されている記号

B	=	有機相流量
B_f	=	有機相供給液流量
E	=	段効率
D	=	分配係数
h	=	Mixer 容積, Mixer 内相容積
H	=	Settler 容積, Settler 内相容積
L	=	Settler 界面レベル
k	=	反応速度定数
K	=	平衡定数
N_C	=	成分数
N_S	=	1 Bank 内の段数
N_B	=	Bank 数
t	=	時間
T	=	TBP 濃度
W	=	水相流量
W_f	=	水相供給液流量
W_R	=	水相リサイクル流量
x_m	=	Mixer 内水相濃度
x_s	=	Settler 内水相濃度
x_f	=	水相供給液濃度
y_m	=	Mixer 内有機相濃度
y_s	=	Settler 内有機相濃度
y_f	=	有機相供給液濃度
η	=	製品の回収率
ξ	=	廃品の回収率
τ	=	タイムステップ (Δt)

Subscript or Superscript

 i = Stage index j = Component index a = 水相を表わす。 o = 有機相を表わす。

例えば,

 $x_{mj}^i(t)$ は時間 t , Stage i における成分 j の Mixer 中の水相濃度。

10. あ と が き

Purexプロセスの還元剤を使用する工程、即ち分配工程とPu精製工程で起こる化学反応は複雑である。還元剤によるPu(IV)の還元反応、U(VI)の酸化反応、Pu(III)の再酸化反応、 N_2H_4 による HNO_2 の分解反応などが化学量論的に相互に関連して起こるから、単に H^+ 、U(VI)、Pu(IV)などの分配平衡データによるシミュレーションでは、これら抽出種の抽出器内の挙動を充分表現できない場合が多い。Revised MIXSETは、MIXSETの化学反応計算機能を拡大して、これらの要求に答えられるようにしたものである。この試みは、諸研究者によって従来から開発されているPurexプロセスのシミュレーションコードとしては初めてのものと思われる。

Revised MIXSETは、従来のMIXSETと同様の使い方ができるほか、利用法によってはさらに臨界等の有用な情報を得ることができるので、再処理工場の運転現場においても幅広く活用することが可能であると考えられる。

本報告で用いた反応速度定数には、適用範囲を少し拡大したものもあるため、(i)より適切なものへの置き換え、(ii)Appendix 1で指摘したようにPu(III)およびU(VI)の酸化反応式に関する問題点、(iii)平衡データ特にU(VI)の平衡データの信頼性などが課題として残されており、今後も改善の努力を続けてゆく必要がある。

11. 参 考 文 献

A. 抽出プロセスについて

1. 藤田重文, 他, "化学工学Ⅲ (物質移動操作)", 東京化学同人, 第2版 (1972).
2. G.S.Laddha, T.E. Degaleesan, "Transport Phenomena in Liquid Extraction", McGraw Hill (1976).

B. 分配係数, 計算コードについて

3. J. T. Lowe, "Calculation of the Transient Behavior of Solvent Extraction Processes", Ind. Eng. Chem. Process Design Develop. 7. No 3 (1968).
4. 加藤尚武, 他, "ミキサセトラ抽出装置の動特性モデルの検討", 化学工業, 38, No 6, 367~371 (June, 1975).
5. W. S. Groevier, "Calculation of the Transient Behavior of a Dilute-Purex Solvent Extraction Process Having Application to The Reprocessing of LMFBR fuels", ORNL-4746 (April, 1972).
6. W. C. Scotten, "SOLVEX, A Computer Program For Simulation of Solvent Extraction Processes", DP-1391 (Sep., 1975).
7. 星野忠也, "Pu-U-HNO₃-TBP系における濃度プロファイル計算コード", SN-841-71-32 (1972).
8. D. E. Horner, "A Mathematical Model and Computer Program for Estimating Distribution Coefficients for Pu, U and Nitric Acid in Extraction with Tri-n-Butyl Phosphate", ORNL-TM-2711 (Fev., 1970).

C. 最適化について

9. J. S. Kowalic, 他, "非線型最適化問題の反復解法", 培風館 (1977).

付録1 ミキサ・セトラ内におけるPurex
プロセス諸反応

付録1 ミキサ・セトラ内における Purexプロセス諸反応

プルトニウム(IV)の還元剤としてウラン(IV)を使用する場合とヒドロキシルアミンを使用する場合について、ミキサ・セトラ内で起こる諸反応を調査し、文献値から主な反応の反応速度式を誘導した。MIXSETに組込んだ化学反応を付表1, 2にまとめ、水相、有機相(30%TBP/n-Dodecane)における各反応速度式の誘導手順を Appendix A~G に示した。

なお、本付録で使用する濃度単位はすべてモル濃度(mol/l または M)とし、時間単位は特にことわりのない限り分(min)とする。

付表 1.1 還元剤として U(IV) を使用する時のミキサ・セトラ内反応

反 応 式	反 応 速 度 式		Appendix
	水 相	有 機 相	
1. Pu(IV)の還元 $U^{4+} + 2Pu^{4+} + 2H_2O \rightleftharpoons UO_2^{2+} + 2Pu^{3+} + 4H^+$	$-\frac{d(Pu(IV))}{dt} = \frac{1.5 \times 10^{-2} (Pu(IV)) (U(IV))}{(H^+)^2}$	$-\frac{d(Pu(IV))}{dt} = \frac{6.5 (Pu(IV)) (U(IV))}{(H^+)^2}$	Appendix A
2. Pu(III)のHNO ₂ 酸化 $2Pu^{3+} + 3H^+ + NO_2^- \rightleftharpoons 2Pu^{4+} + HNO_2 + H_2O$	<p>(HNO₂) < 10⁻⁴ Mの時</p> $-\frac{d(Pu(III))}{dt} = 5.1 \times 10^{-3} (Pu(III)) (H^+)^{1.8}$ <p>10⁻⁴ M ≤ (HNO₂) < 2.3 × 10⁻² Mの時</p> $-\frac{d(Pu(III))}{dt} = 10^{-(1.3 \log_{10}(H^+) + 0.54)} \times (Pu(III)) (HNO_2)^{(0.44 - 0.76 \log_{10}(H^+))}$ <p>(HNO₂) ≥ 2.3 × 10⁻² Mの時</p> $-\frac{d(Pu(III))}{dt} = 5.5 \times 10^{-2} (Pu(III))$	$-\frac{d(Pu(III))}{dt} = 1.5 \times 10^{-1} (Pu(III)) \times (HNO_2) (H^+)^{3.1}$	Appendix B
3. U(IV)のHNO ₂ 酸化 $U^{4+} NO_3^- + H_2O \rightleftharpoons UO_2^{2+} + HNO_2 + H^+$	<p>(H⁺) < 0.8 Mの時</p> $-\frac{d(U(IV))}{dt} = 2.5 \times 10^{-2} (U(IV)) (H^+)^{2.7} (HNO_2)^{0.38}$ <p>(H⁺) ≥ 0.8 Mの時</p> $-\frac{d(U(IV))}{dt} = 1.3 \times 10^{-2} (U(IV)) (HNO_2)^{0.38}$	<p>(H⁺) ≤ 0.34 Mの時</p> $-\frac{d(U(IV))}{dt} = 1.6 \times 10^{-2} (U(IV)) \times (HNO_2)^{0.49}$ <p>(H⁺) > 0.34 Mの時</p> $-\frac{d(U(IV))}{dt} = 4.0 \times 10^{-2} (U(IV)) \times (H^+)^{0.63} (HNO_2)^{0.49}$	Appendix C
4. U(IV)の空気(O ₂)酸化 $2U^{4+} + O_2 + 2H_2O \rightleftharpoons 2UO_2^{2+} + 4H^+$	$-\frac{d(U(IV))}{dt} = \frac{2.5 \times 10^{-4} (U(IV))}{(H^+)}$	$-\frac{d(U(IV))}{dt} = \frac{3.2 \times 10^{-3} (U(IV))}{(H^+)^{0.86}}$	Appendix D
5. HNO ₂ の分解 $N_2H_5^+ + HNO_2 \longrightarrow HN_3 + 2H_2O + H^+$	$-\frac{d(HNO_2)}{dt} = 3.7 \times 10^4 (HNO_2) (N_2H_5^+) (H^+)$	N ₂ H ₄ が有機相に抽出されないため、反応は起こらないとする。	Appendix E

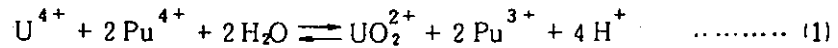
付表 1.2 還元剤としてヒドロキシルアミンを使用する時のミキサ・セトラ内反応

反 応 式	反 応 速 度 式		Appendix
	水 相	有 機 相	
1. Pu(IV)の還元 $2\text{NH}_2\text{OH}^+ + 2\text{Pu}^{4+} \rightleftharpoons 2\text{Pu}^{3+} + \text{N}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 4\text{H}^+$	$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{6.5[\text{Pu(IV)}]^2[\text{NH}_2\text{OH}^+]^2}{[\text{Pu(III)}]^2[\text{H}^+]^4(1+4.3[\text{NO}_3^-])^2}$	NH ₂ OH が有機相に抽出されな いため、反応は起こらないとする。	Appendix F
2. Pu(III)のHNO ₂ 酸化 $2\text{Pu}^{3+} + 3\text{H}^+ + \text{NO}_2^- \rightleftharpoons 2\text{Pu}^{4+} + \text{HNO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$[\text{HNO}_2] < 10^{-4} \text{ M の時}$ $-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.1 \times 10^{-3} [\text{Pu(III)}][\text{H}^+]^{1.8}$ $10^{-4} \text{ M} \leq [\text{HNO}_2] < 2.3 \times 10^{-2} \text{ M の時}$ $-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 10^{-(13 \log([\text{H}^+]) + 0.54)}$ $\times [\text{Pu(III)}][\text{HNO}_2]^{(0.44 - 0.76 \log([\text{H}^+]))}$ $[\text{HNO}_2] \geq 2.3 \times 10^{-2} \text{ M の時}$ $-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.5 \times 10^{-2} [\text{Pu(III)}]$	$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 1.5 \times 10^{-1} [\text{Pu(III)}]$ $\times [\text{HNO}_2][\text{H}^+]^{3.1}$	Appendix B
3. ヒドラジンによるHNO ₂ の分解 $\text{N}_2\text{H}_5^+ + \text{HNO}_2 \longrightarrow \text{HN}_3 + 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}^+$	$-\frac{d[\text{HNO}_2]}{dt} = 3.7 \times 10^4 [\text{HNO}_2][\text{N}_2\text{H}_5^+][\text{H}^+]$	N ₂ H ₄ が有機相に抽出されない ため反応は起こらないとする。	Appendix E
4. ヒドロキシルアミンによるHNO ₂ の分解 $\text{NH}_2\text{OH}^+ + \text{HNO}_2 \longrightarrow \text{N}_2\text{O} + 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}^+$	$-\frac{d[\text{HNO}_2]}{dt} = 3.2 \times 10^2 [\text{HNO}_2][\text{NH}_2\text{OH}^+]$ $\times [\text{H}^+]$	NH ₂ OH が有機相に抽出されな いため反応は起こらないとする。	Appendix G

Appendix A U(IV) によるPu(IV)の還元反応¹⁾

(1) 反応式

U(IV)によるPu(IV)の還元反応式として(1)式が示されている¹⁾



Pu(IV) 1モルが還元されることによって、H⁺ 2モルが生成する。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

P. Biddleらによる実験値 (付表 1. 3) から²⁾ U(IV)によるPu(IV)の還元反応速度式を導いた。

付表 1. 3 ミキサ・セトラの代表段におけるPu(IV)の還元速度定数

Stage No	[HNO ₃] _a (M)	[HNO ₃] _o (M)	[U(IV)] _a (M)	[U(IV)] _o (M)	k _a (min ⁻¹)	10 k _o (min ⁻¹)
1	0.13	—	5×10 ⁻⁴	8×10 ⁻⁶	4.47	—
3	0.57	4.27×10 ⁻²	5×10 ⁻³	1.3×10 ⁻⁴	2.40	4.65
5	0.95	6.65×10 ⁻²	8×10 ⁻³	2.5×10 ⁻⁴	1.34	3.77
7	1.2	9.00×10 ⁻²	1.6×10 ⁻²	3.0×10 ⁻⁴	1.68	2.41
9	1.8	13.5×10 ⁻²	1.7×10 ⁻²	4.0×10 ⁻⁴	0.79	1.43

(a : 水相, o : 有機相)

水相, 有機相における還元反応が [Pu(IV)] に関してともに1次反応であるので³⁾、水相では(2)式の反応速度式が成立する。

$$-\frac{d [Pu(IV)]}{dt} = k_a [Pu(IV)] \quad \dots\dots\dots (2)$$

k_a に対して(3)式が与えられているので²⁾

$$k_a = \frac{k' [U(IV)]}{[H^+]^2} \quad \dots\dots\dots (3)$$

(3)式に付表 1. 3の実験値を代入してk'を計算すると k' = 1.5 × 10² mol/l・min が得られる。これを(2)式に代入すると水相における還元反応速度式として(4)式が導かれる。

• 以下本付録文中では、化学反応式では U(IV), Pu(IV)などを U⁴⁺, Pu⁴⁺ のように表わし、反応速度式では [U(IV)], [Pu(IV)] の形で用いる。

$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{1.5 \times 10^2 [\text{Pu(IV)}][\text{U(IV)}]}{[\text{H}^+]^2} \quad \dots\dots\dots (4)$$

なお、付表 1.3 の実験値と動燃で得られている実験値をプロットした付図 1.1 から、 $k_a = 1.3 [\text{H}^+]^{-1} \text{ min}^{-1}$ が導かれ、 $[\text{U(IV)}]$ の影響を消去した場合の還元反応速度式として(5)式が求められる。

$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{1.3 [\text{Pu(IV)}]}{[\text{H}^+]} \quad \dots\dots\dots (5)$$

有機相における反応速度式

水相の場合と同様に、P. Biddle らの実験値²⁾ から還元反応速度式を誘導した。付表 1.3 の k_o に対して(6)式が与えられているので、

$$k_o = \frac{k''[\text{U(IV)}]}{[\text{H}^+]^2} \quad \dots\dots\dots (6)$$

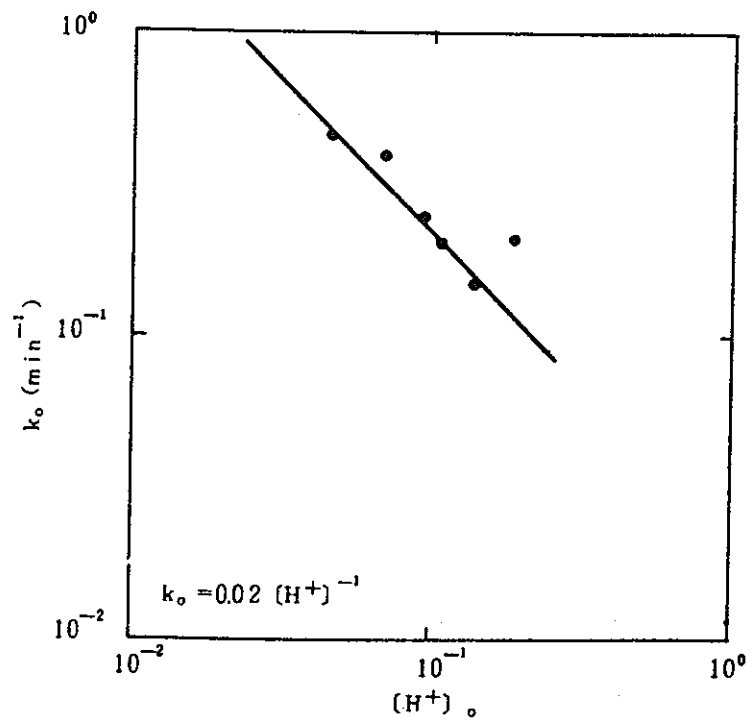
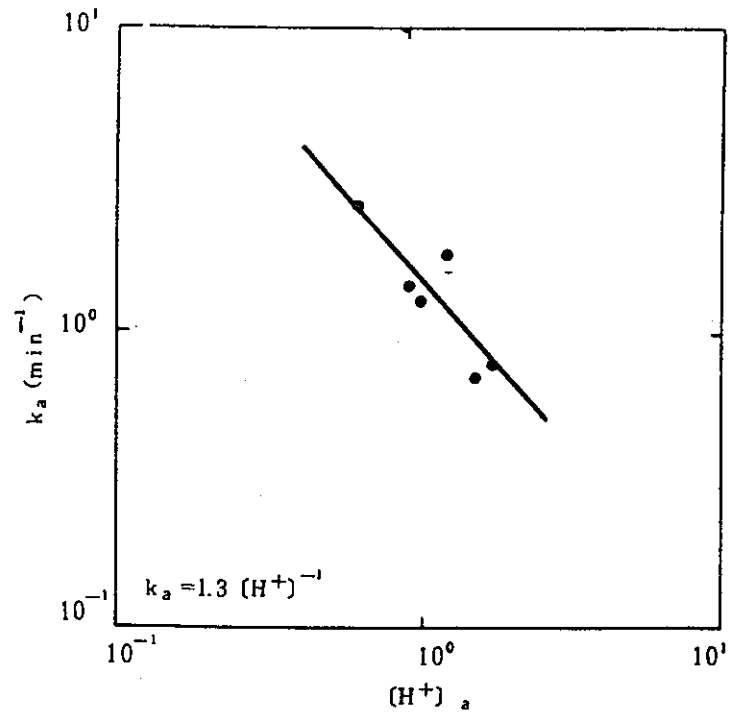
付表 1.3 の実験値を用いて k'' を計算すると $k'' = 6.5 \text{ mol/l} \cdot \text{min}$ が得られる。

還元反応が $[\text{Pu(IV)}]$ に関して 1 次反応であるので、(6)式を用いて有機相における還元反応速度式を導くと(7)式が得られる。

$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = k_o [\text{Pu(IV)}] = \frac{6.5 [\text{Pu(IV)}][\text{U(IV)}]}{[\text{H}^+]^2} \quad \dots\dots\dots (7)$$

なお、水相の場合と同様に、付図 1.1 から $k_o = 0.02 [\text{H}^+]^{-1} \text{ min}^{-1}$ が得られ、 $[\text{U(IV)}]$ の影響を消去した場合の還元反応速度式として(8)式を導くことができる。

$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{0.02 [\text{Pu(IV)}]}{[\text{H}^+]} \quad \dots\dots\dots (8)$$

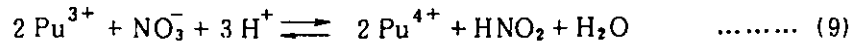


付図 1.1 水相、有機相中のPu (IV) の還元反応速度定数

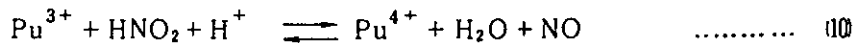
Appendix B 亜硝酸によるPu(III)の酸化反応

(1) 反応式

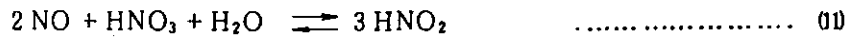
HNO₂によるPu(III)の酸化反応式として、自動触媒機構よりなる次式が示されている¹⁾。まず、反応速度の遅い(9)式がおりHNO₂が発生する。



次いで反応速度の早い(10)式がおこる。

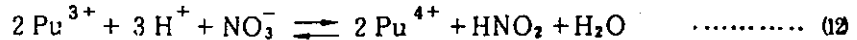


(10)式で生成するNOは、硝酸濃度 3.5 N 以下の雰囲気では、(10)式によりHNO₂の供給源となり、



(10)、(11)式の間でPu(III)が急速に酸化される。

これらの反応を一つの式に書き表わすことは意味論的に見ても困難であるが、便宜上(9),(10),(11)式を単純に加えた(12)式をPu(III)のHNO₂による酸化反応式とする。



(12)式によれば、Pu(III) 1モルの酸化に対してH⁺が1.5モル消費されることになるが、より実際に近い結果を得るためには、(12)式について再検討を行なう必要が将来あろう。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

水相における反応速度式は複雑である。ここでは、栢、広木¹⁾の実験値から数式化を試みる。

HNO₂濃度と反応速度定数kとの関係を付図 1. 2 に示す。HNO₂が存在しない場合には、HNO₃濃度とkとは付図 1. 3 に示す関係になる。付図 1. 3 の関係で示すPu(III)とHNO₃の反応がHNO₂を発生し、これがHNO₂によるPu(III)の酸化開始反応の引き金となり、さらにPu(III)を酸化し、付図 1. 2 の関係が得られるものとする。

開始反応が[Pu(III)]に関して1次反応であるとみなすと¹⁾、付図 1. 3 から(13)式の反応速度式が導ける。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.1 \times 10^{-3} [\text{Pu(III)}] [\text{H}^+]^{1.8} \quad \dots\dots\dots (13)$$

HNO₂が存在する場合には、HNO₂以外の濃度が同一の場合に(13)式で計算される反応速度式

よりも速くなるはずである。ところが、HNO₂が存在する場合の反応速度式として付図 1. 2 から誘導した(14)式では、

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = \frac{5.5 \times 10^{-2} [\text{Pu(III)}] [\text{HNO}_2]^{2.2(1-[\text{H}^+])}}{[\text{H}^+]^{4.8}} \dots\dots (14)$$

となり、ある領域、特にHNO₂濃度が低い領域では(14)式から計算される値よりも小さな値となるため、適正な結果が得られない。このため、ここでは(14)式の適用範囲を[HNO₂] < 10⁻⁴ M とし、この範囲内ではHNO₂濃度に関係なく(14)式に従うものとする。

[HNO₂] ≥ 10⁻⁴ Mの領域、つまり付図 1. 2 に実線で示されている実験値を、(14)式との連続性をくずさず数式化するのは困難である。そこで、多少実験値から逸脱するが、実験値のかわりに点([HNO₂] = 10⁻⁴ M, k = 5.1 × 10⁻³ [H⁺]^{1.8} min⁻¹)と点([HNO₂] = 2.3 × 10⁻² M, k = 5.5 × 10⁻² min⁻¹)を結ぶ関係線について数式化を行なうことにした。一例として、付図 1. 2 に [H⁺] = 0.5 Mの場合を破線で示す。実験値との差は小さく、オーダ的には問題がない。結局、[HNO₂] ≥ 10⁻⁴ Mの領域に対して(15)式が得られる。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 10^{-(1.3 \log_{10} [\text{H}^+] + 0.54)} [\text{Pu(III)}] [\text{HNO}_2]^{(0.44 - 0.76 \log_{10} [\text{H}^+])} \dots\dots (15)$$

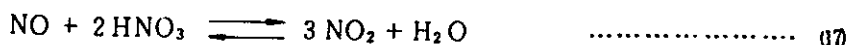
HNO₂がある値よりも高くなるとkの増加に鈍化傾向が見られることから¹⁾、[HNO₂] ≥ 2.3 × 10⁻² Mの領域ではk = 5.5 × 10⁻² min⁻¹とするのが妥当である。従って[HNO₂] ≥ 2.3 × 10⁻² Mにおける反応速度式としては (16)式を用いることにする。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 5.5 \times 10^{-2} [\text{Pu(III)}] \dots\dots\dots (16)$$

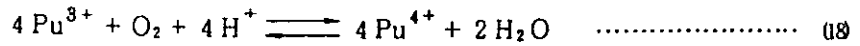
Pu(III)の酸化は、まず(14)式の数値によってHNO₂が生成し、続いて(15)式あるいは(16)式に示す速度でPu(III)のHNO₂による酸化反応が進むと考えられる。

ここに誘導した反応速度式には、実験方法、条件からみて¹⁾ HNO₂酸化の他に空気酸化(O₂酸化)も含まれているようである。U(IV)の酸化では、Appendix C, D に示すようにHNO₂酸化と空気酸化を区別して取扱ったが、Pu(III)では区別しなかった。

HNO₂による酸化は、HNO₂と急速に反応するヒドラジン(N₂H₄)の添加によって抑制することができるが、Pu(III)は水相のHNO₃濃度が2.5 M以上の領域で、N₂H₄が存在していても酸化がおこる⁴⁾。理由については述べられていないが、高いHNO₃濃度([H⁺] > 3.5 M)では(11)式がおきるかわりに(17)式の反応がおき、



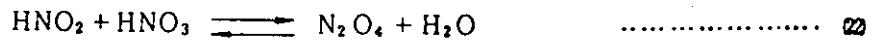
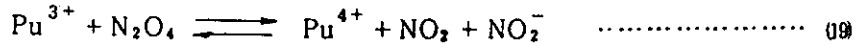
HNO₂による自動触媒作用が消える⁵⁾。このため、この条件下では (16)式に示す空気酸化反応が優先的におきているか、



(19)式の反応速度が非常に速くなるかのどちらかが考えられる。水相の硝酸濃度が2.5 M以上では、(18), (19), (16)式の適用はできないものと思われる。

有機相における反応速度式

Pu(III)の分配係数が小さいため、有機相でおこる酸化反応の重要性はそれほど大きくないと考えられるが、P. Biddleらの考えに従い反応速度式を誘導した²⁾。まず酸化反応式として(19)~(22)式を仮定する。



酸化反応速度式が(19)式に従うとして、

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = k[\text{Pu(III)}][\text{N}_2\text{O}_4] \quad \dots\dots\dots (23)$$

反応速度定数kを以下に示す手順によって推定する。

(22)式の平衡状態では、(20)式の化学平衡式が成立する。

$$\frac{[\text{HNO}_2][\text{HNO}_3]}{[\text{N}_2\text{O}_4][\text{H}_2\text{O}]} = \text{constant} \quad \dots\dots\dots (24)$$

[HNO₃]と[H₂O]は一定とみなせるから、(24)式は(25)式に変形できる。

$$[\text{HNO}_2] = \alpha [\text{N}_2\text{O}_4] \quad \dots\dots\dots (25)$$

ここで、 $k = k^*(1 + \alpha)$ とおき、(25)式を(23)式に代入すると(26)式が導かれる。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = k^*(1 + \alpha)[\text{Pu(III)}] \frac{[\text{HNO}_2]}{\alpha} = k^*[\text{Pu(III)}][\text{HNO}_2] \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right) \quad \dots\dots\dots (26)$$

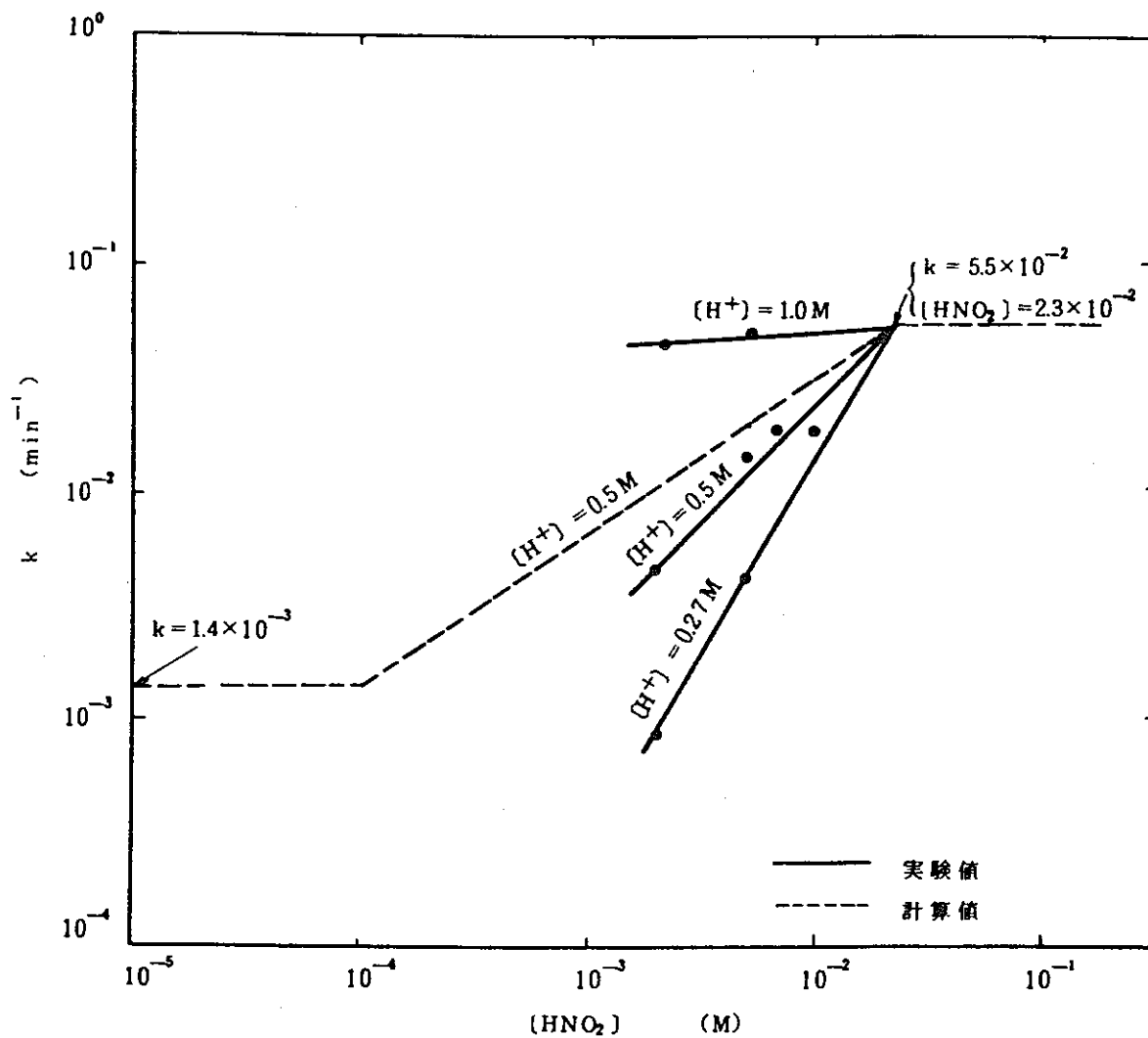
$\alpha \gg 1$ であるから、 $1/\alpha \approx 0$ とみなせる。従って(26)式は(27)式に変形できる。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = k^*[\text{Pu(III)}][\text{HNO}_2] \quad \dots\dots\dots (27)$$

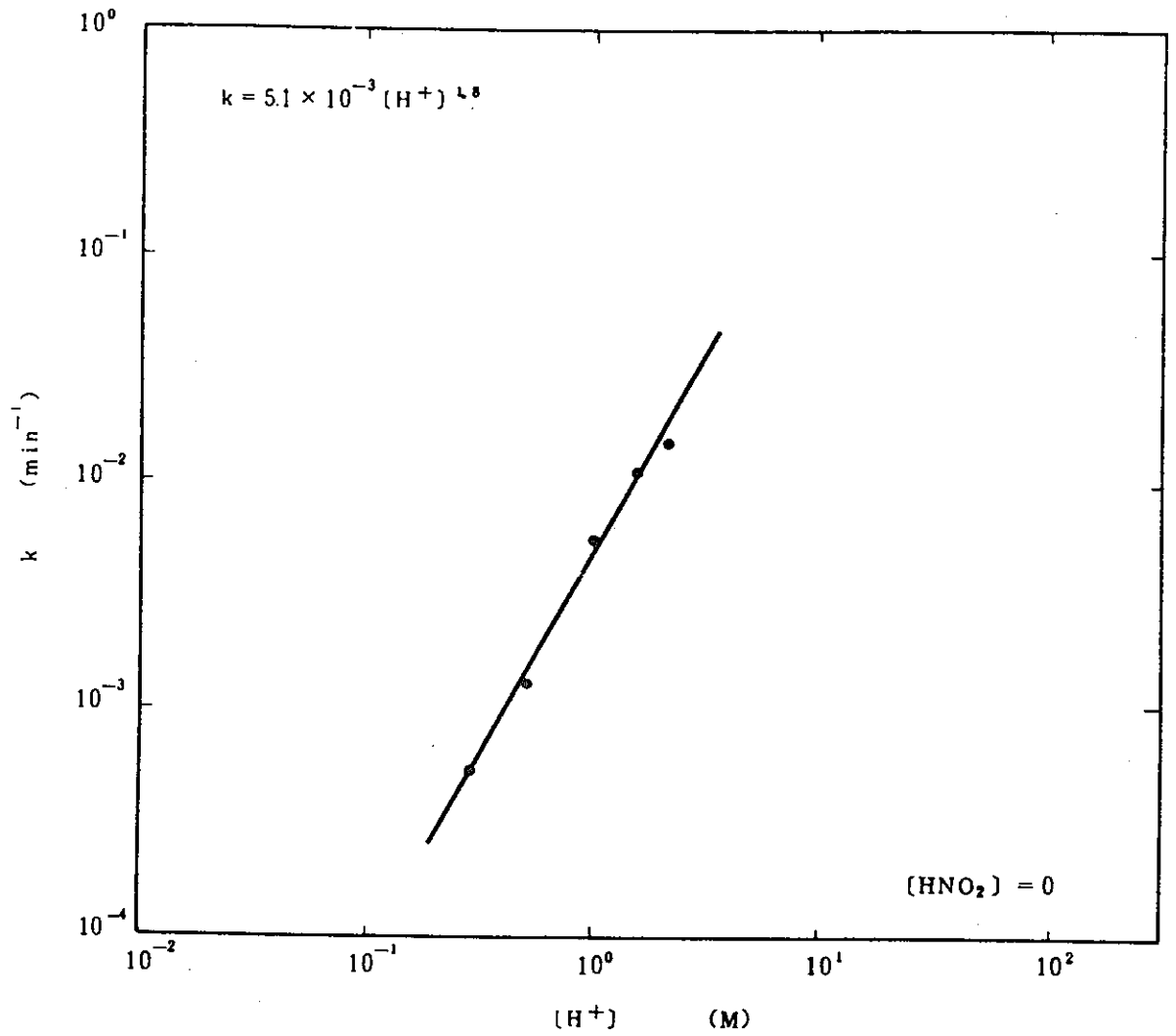
有機相のHNO₃濃度とk*との関係が別に実験的に与えられているので、これを付図1.4に示す。これより $k^* = 1.5 \times 10^{-1} [\text{H}^+]^{3.1} / \text{mol} \cdot \text{min}$ が得られ、(27)式に代入すると結局(28)式を導くことができる。

$$-\frac{d[\text{Pu(III)}]}{dt} = 1.5 \times 10^{-1} [\text{Pu(III)}][\text{HNO}_2][\text{H}^+]^{3.1} \quad \dots\dots\dots (28)$$

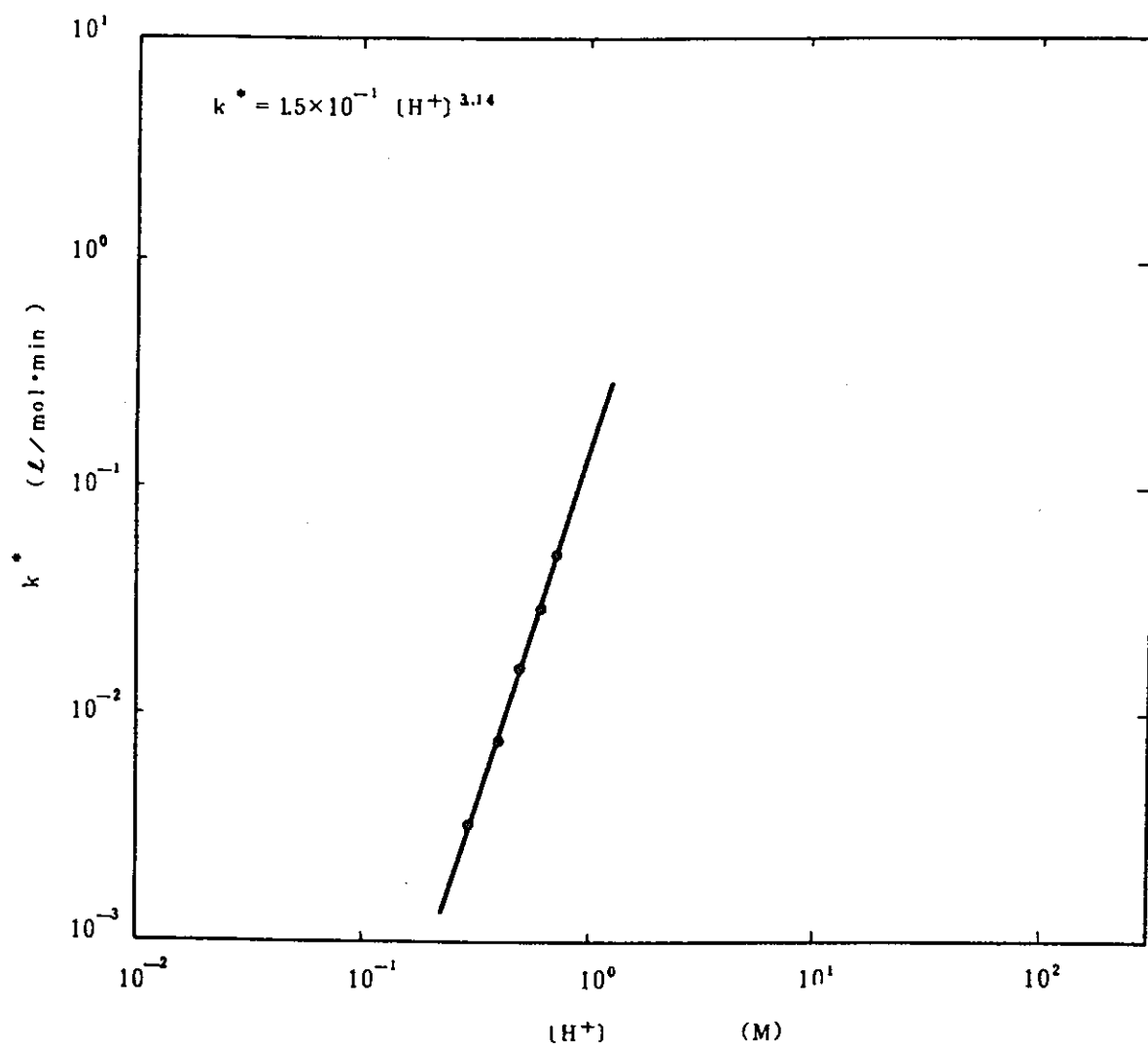
なお、(28)式は有機相として30% TBP/HPT (Hydrogenated Propylene Tetramer)を用いて得られたものである。



付図 1. 2 水相中の HNO_2 濃度と Pu(III) の酸化反応速度定数の関係



付図 1.3 水相中のHNO₃濃度とPu(III)の酸化反応速度定数の関係

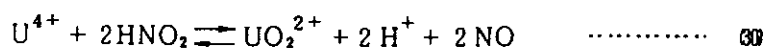
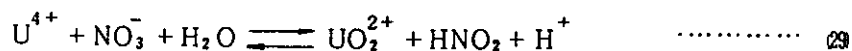


付図 1.4 Pu(III) の HNO₂ 酸化反応における有機相の HNO₃ 濃度と k* の関係

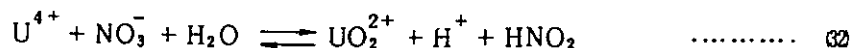
Appendix C HNO₂によるU(IV)の酸化反応

(1) 反応式

HNO₂によるU(IV)の酸化は、Pu(III)の酸化と同様に(29~31)式からなる自動触媒機構が示されている。⁵⁾



Pu(III)のHNO₂酸化と同様に、これらの式を単純に加えることは問題があるが、便宜上加えて一つの式とし、(32)式をもってU(IV)のHNO₂による酸化反応式とする。



Pu(III)の場合と異なり、1モルのU⁴⁺が酸化されることによって、1モルのH⁺が生成する。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

A. L. Slade⁶⁾による実験値から反応速度式を誘導した。HNO₃濃度をパラメータにとり、HNO₂濃度と反応速度定数kとの関係を付図1.5に示す。HNO₃濃度0.86~3.72Mの範囲では、HNO₃濃度に関係なくHNO₂濃度とkが一本の直線関係にまとめられるから(付図1.5のk₁)、[H⁺] ≥ 0.8MではHNO₃濃度の影響を受けずにHNO₂酸化されるとした。[H⁺] < 0.8Mでは実験値が少ないので、HNO₂濃度とkとの関係はすべてk₁と勾配の同じ直線関係にあると仮定した(付図1.5のk₂, k₃)。

反応初期においては、[U(IV)]に関して1次反応となるので⁶⁾、反応速度式は(33)式ようになる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = k[U(IV)] \quad \dots\dots\dots (33)$$

付図1.5から、[H⁺] ≥ 0.8Mでは、k = k₁ = 1.3 × 10⁻² [HNO₂]^{0.38} min⁻¹となるので、(33)式に代入すると(34)式が導かれる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = 1.3 \times 10^{-2} [U(IV)][HNO_2]^{0.38} \quad \dots\dots\dots (34)$$

[H⁺] < 0.8Mの領域では、k = k' [HNO₂]^{0.38}と置き、k'とHNO₃濃度の関係式をまず導く。付図1.5に示されているk₁, k₂, k₃各式のk'の値とHNO₃濃度の関係を付図1.6に描く。これよりk'とHNO₃濃度の関係が(35)式に導かれる。

$$k' = 2.5 \times 10^{-2} [H^+]^{2.7} \dots\dots\dots (35)$$

(35)式から、kの値は(36)式のようになる。

$$k = k' [HNO_2]^{0.38} = 2.5 \times 10^{-2} [H^+]^{2.7} [HNO_2]^{0.38} \dots\dots\dots (36)$$

(36)式を(33)式に代入すれば、 $[H^+] < 0.8 \text{ M}$ の反応速度式として最終的に(37)式が導かれる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = 2.5 \times 10^{-2} [U(IV)][H^+]^{2.7} [HNO_2]^{0.38} \dots\dots\dots (37)$$

HNO_2 によるU(IV)の酸化反応には、かなり長期の誘導期間があり、十分量の HNO_2 が発生するまでは反応がほとんど進行しない⁶⁾。しかし、Pu(III)と共存する場合には、Pu(III)の HNO_2 酸化によって発生する HNO_2 がU(IV)と反応するために(Pu(III)の場合には誘導期間がないため⁵⁾、ただちに反応が進んで HNO_2 が発生する)、ここでは誘導期間がないと仮定する。

なお、(34)、(37)式は HNO_2 酸化反応に対して安定化作用のある SO_4^{2-} の存在下で得られた実験値から導かれたものであるため、実際よりは少し遅い反応速度式になっていると思われるが、A. L. Sladeの実験範囲では影響が小さい。

有機相における反応速度式

水相の場合と同様にA. L. Sladeの実験値⁶⁾から式を誘導した。有機相中の HNO_2 濃度、 HNO_3 濃度と酸化反応速度定数kとの関係を付図1.7に示す。 $[H^+]$ が0.035~0.34 Mの範囲では、kにおよぼす HNO_3 濃度の影響がみられないので、 HNO_2 濃度とkとは一本の直線関係にまとめられる(付図1.7の k_2)。これを $[H^+] \leq 0.34 \text{ M}$ における反応速度定数とする。

$$k = k_2 = 1.6 \times 10^{-2} [HNO_2]^{0.49} \dots\dots\dots (38)$$

反応初期には、 $[U(IV)]$ に関して1次反応となるので、(38)式に示す反応速度式が得られる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = 1.6 \times 10^{-2} [U(IV)][HNO_2]^{0.49} \dots\dots\dots (39)$$

$[H^+] > 0.34 \text{ M}$ の領域では、一旦 $k = k' [HNO_2]^{0.49}$ と置き、 k' と HNO_3 濃度との関係式を求めてから、kの関係式を導く。付図1.7の k_1, k_2 式に示される各 k' の値と HNO_3 濃度の関係を付図1.8に描くと、(40)式が得られる。

$$k' = 4.0 \times 10^{-2} [H^+]^{0.63} \dots\dots\dots (40)$$

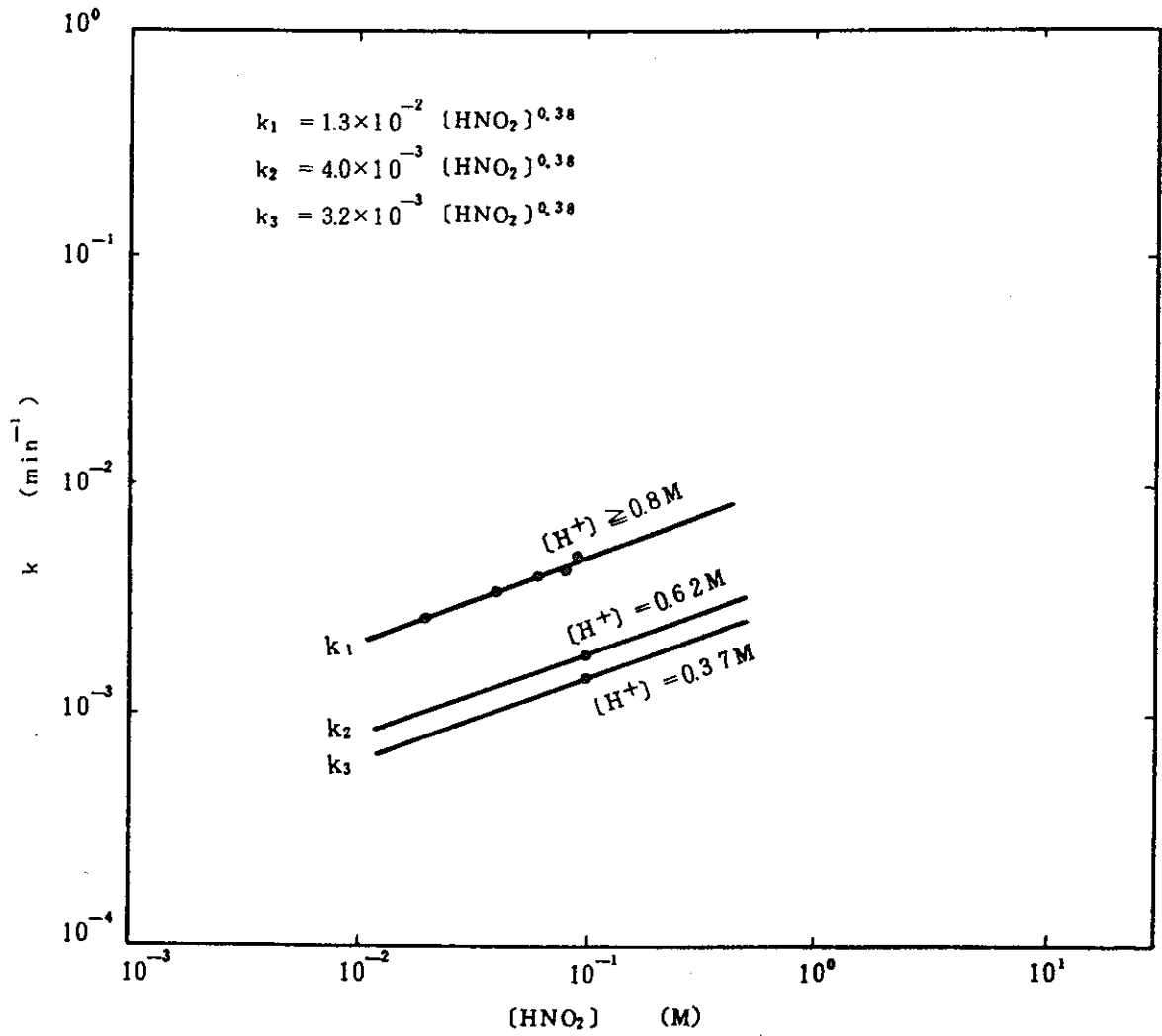
これよりkは(41)式のようになる。

$$k = 4.0 \times 10^{-2} [H^+]^{0.63} [HNO_2]^{0.49} \dots\dots\dots (41)$$

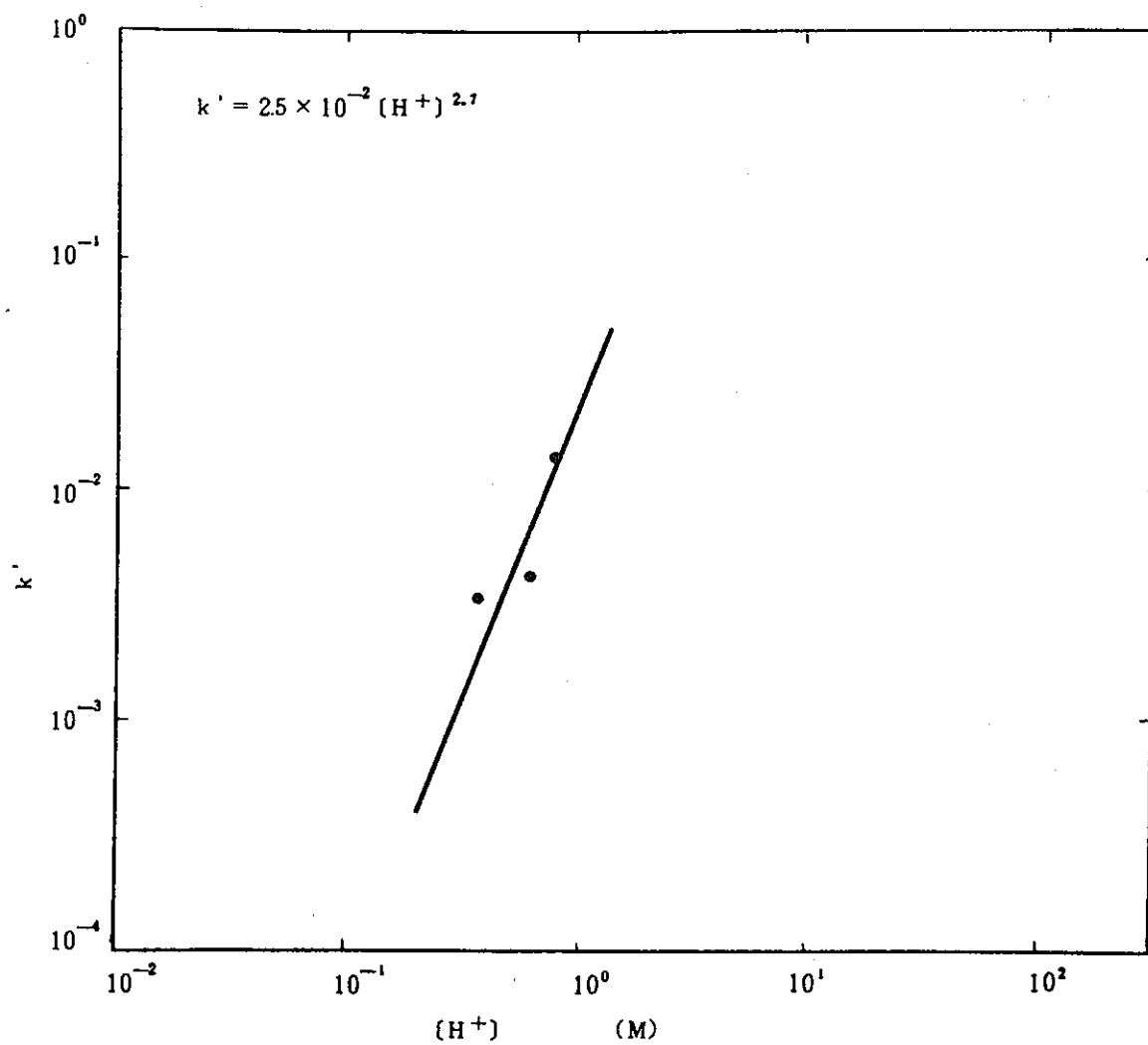
(41)式から、 $[H^+] > 0.34 \text{ M}$ における酸化反応速度式として(42)式が導かれる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = 4.0 \times 10^{-2} [U(IV)][H^+]^{0.63} [HNO_2]^{0.49} \dots\dots\dots (42)$$

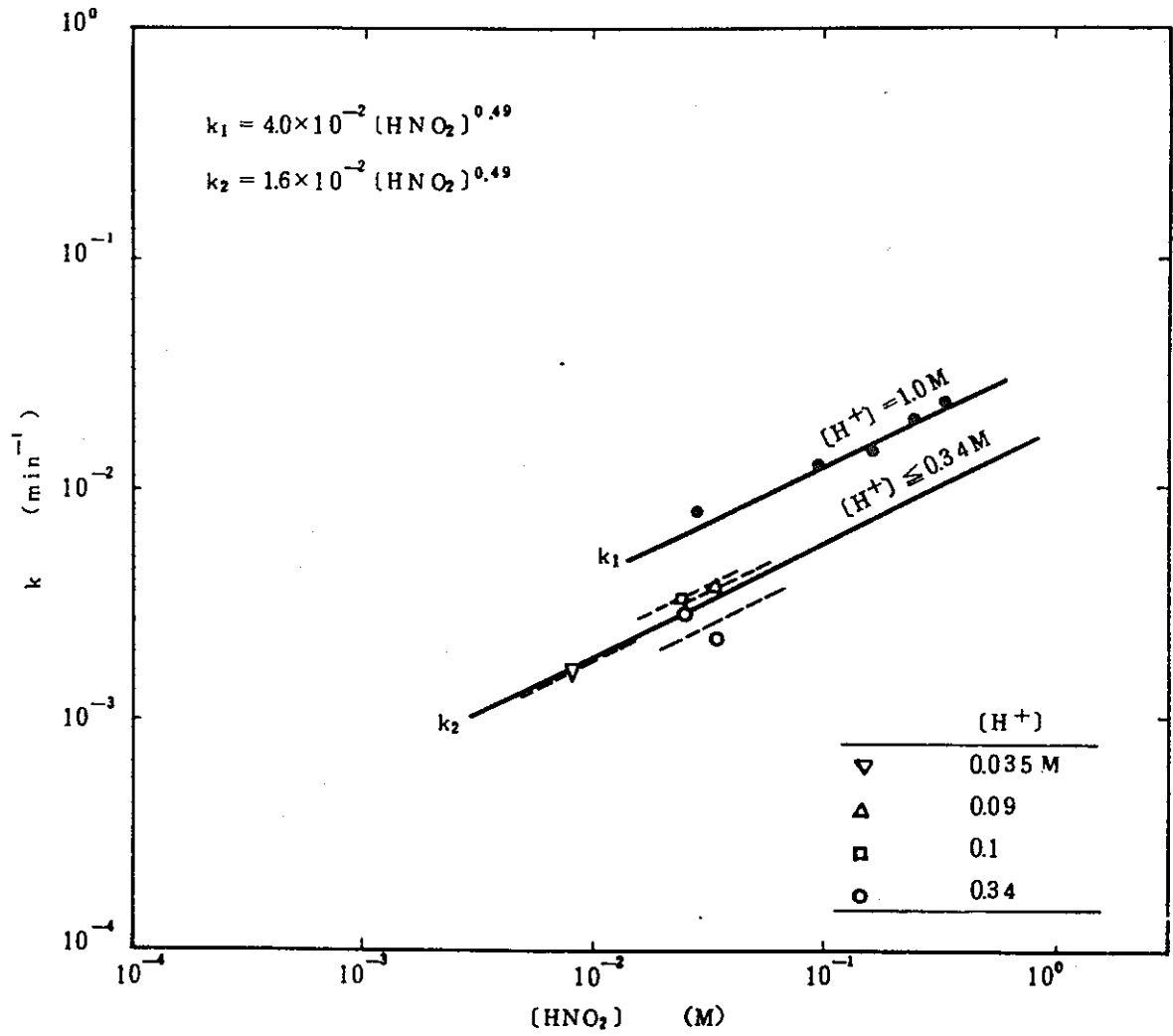
反応初期にみられる誘導期間については、水相の場合と同様に考え、誘導期間はないと仮定する。



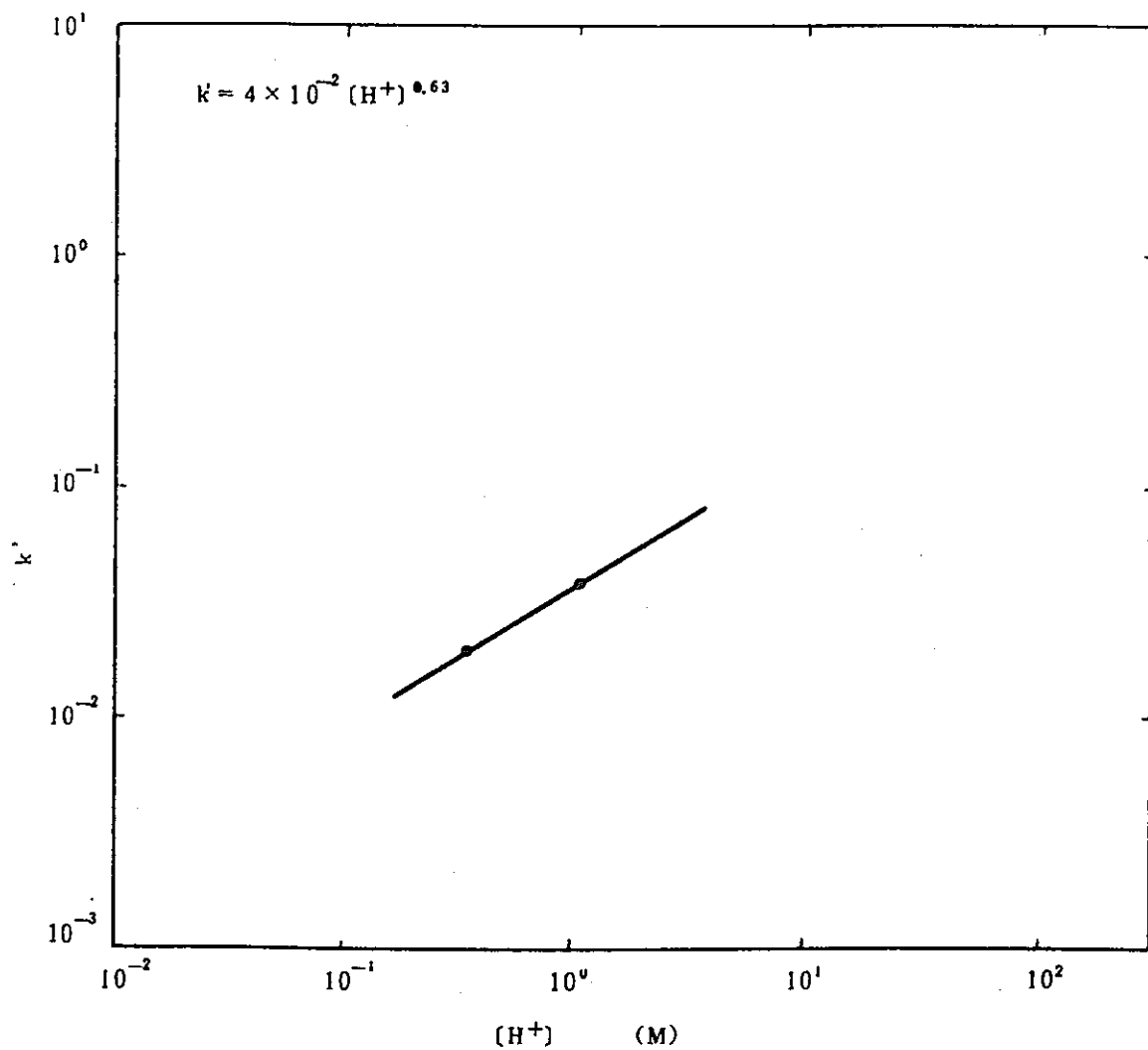
付図 1.5 水相中の HNO_2 濃度と U (IV) の酸化反応速度定数の関係



付図1. 6 U (IV) の HNO_2 酸化反応における水相の HNO_3 濃度と k' の関係



付図 1.7 U (IV) の HNO_2 酸化反応における有機相の HNO_2 濃度, HNO_2 濃度と反応速度定数の関係

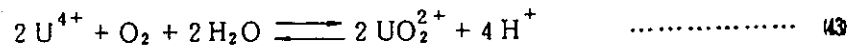


付図1.8 U(IV)の HNO_2 酸化反応における有機相の HNO_3 濃度と k' の関係

Appendix D 空気(O₂)によるU(IV)の酸化

(1) 反応式

O₂酸化反応式として、43式が考えられている⁴⁾



反応の結果、U(IV)1モルに対して2モルの硝酸が発生する。O₂酸化反応にはHNO₂が介在しないので、ヒドラジン(N₂H₄)を添加しても抑制効果は期待できない。つまり、十分量のN₂H₄が存在する場合にはHNO₂による酸化を抑制できるが、O₂による酸化は抑制できない。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

水相における反応速度は、有機相における反応速度に比べてかなり小さいので⁴⁾、重要性は低いと考えられるが、J. Halpernらの実験値⁷⁾に従い反応速度式を誘導した。

反応速度が[U(IV)]に関して1次反応になるので⁷⁾、見かけ反応速度定数をk'とすると44式が得られる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = k' [U(IV)] \quad \dots\dots\dots 44$$

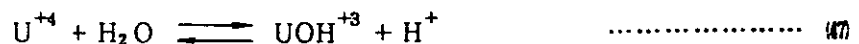
付図 1.9 (a)にO₂分圧とk'の関係を示す。この図から空気中のO₂分圧、即ち0.2気圧の時のk'を各過塩素酸(HClO₄)濃度に対して読み取る。この値を付図 1.9 (b)に示すHClO₄濃度とk'の関係図に、O₂分圧0.2気圧の関係としてプロットすると45式が得られる。

$$k' = 2.5 \times 10^{-4} [H^+]^{-1} \quad \dots\dots\dots 45$$

45式を44式に代入すると、O₂酸化速度式として46式が導かれる。

$$-\frac{d[U(IV)]}{dt} = \frac{2.5 \times 10^{-4} [U(IV)]}{[H^+]} \quad \dots\dots\dots 46$$

46式は、HClO₄系で得られた反応速度式であるため、厳密に言えばHNO₃系の反応速度式とは異なると思われる。HClO₄系のU(IV)の空気酸化が47式に示す加水分解反応を経由して進むと考えられるため⁷⁾



HClO₄よりも電離度の高いHNO₃の場合には、同濃度でもU(IV)の加水分解がおこりにくい。このため、HNO₃系では46式よりもさらに反応速度が遅くなることが予想される。

有機相における反応速度式

H. A. C. Mckay らの実験値⁴⁾から反応速度式を誘導した。HNO₃濃度とO₂酸化によるU(IV)の半減時間の関係とそれから計算した反応速度定数 k を付表 1.4 に示す。

付表 1.4 激しく攪拌した時の有機相におけるU(IV)の空気酸化

[HNO ₃] _a (M)	[HNO ₃] _o (M)	t ½ (min)	k (min ⁻¹)
1.5	0.36	150	4.6 × 10 ⁻³
1.0	0.24	48	1.1 × 10 ⁻²
0.2	0.048	11.5	6.0 × 10 ⁻²
0.04	0.0096	3.5	2.0 × 10 ⁻¹
0.03	0.0072	2.6	2.7 × 10 ⁻¹
0.02	0.0048	2.0	3.5 × 10 ⁻¹
0.01	0.0024	1.3	5.3 × 10 ⁻¹

• 分配係数 K_{dH} = 0.24 として, [HNO₃]_a から計算した。

付表 1.4 の結果は、有機相と水相が共存する条件下で得られたものであるが、水相における反応速度が遅いので⁴⁾これを無視し、全反応が有機相でおこったと仮定する。O₂酸化反応が[U(IV)]に関して1次反応であるとする、付表 1.4 の反応速度定数は $k = \ln 2 / t_{1/2}$ から計算することができる。

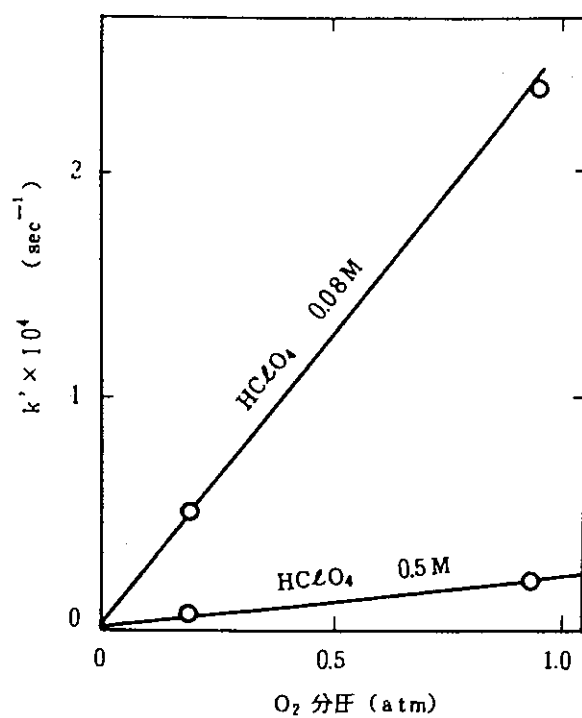
有機相のHNO₃濃度と k との関係を図 1.10 に描き、k とHNO₃濃度の関係式を求める。

$$k = 3.2 \times 10^{-3} [H^+]^{-0.86} \quad \dots\dots\dots 48$$

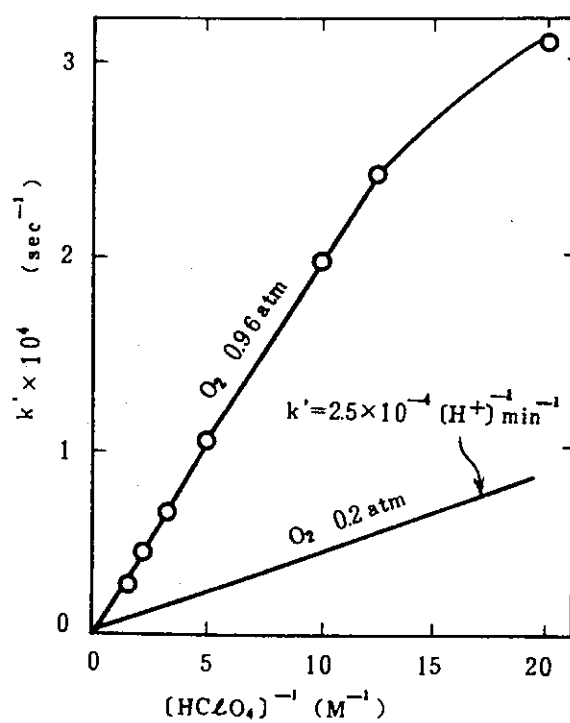
48式を用いて、有機相における反応速度式を導くと49式が得られる。

$$\frac{d[U(IV)]}{dt} = \frac{3.2 \times 10^{-3} [U(IV)]}{[H^+]^{0.86}} \quad \dots\dots\dots 49$$

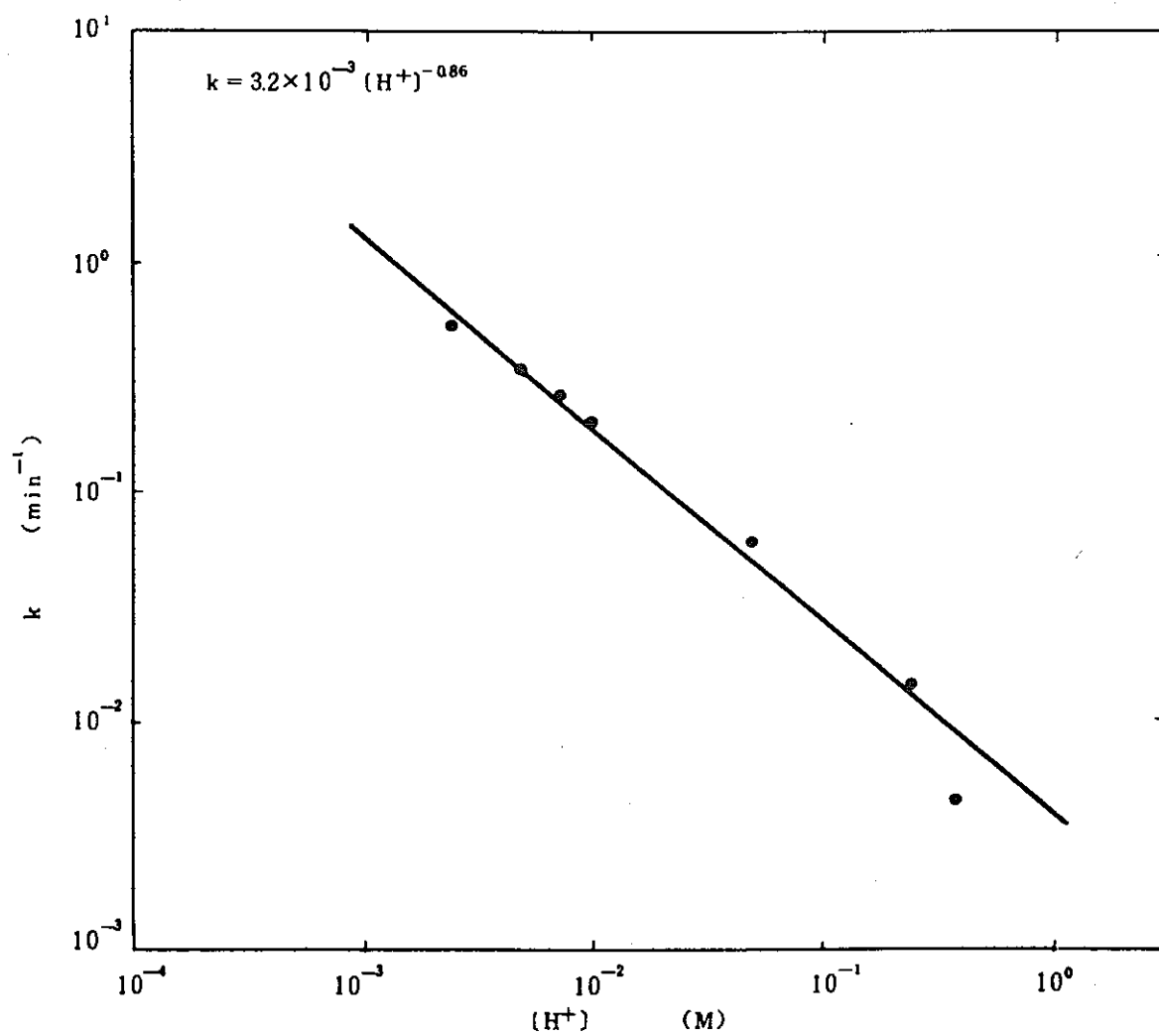
有機相におけるU(IV)のO₂酸化速度は再現性が悪いと言われているので、⁴⁾実験値と実際のミキサ・セトラ内でおこる反応量とが異なる可能性が高い。各ミキサ・セトラに固有の式として、49式を変更する必要性が将来生ずることが考えられる。



付図 1. 9 (a) O_2 分圧とU(IV)の空気酸化反応速度定数



付図 1. 9 (b) 水相中の $HClO_4$ 濃度とU(IV)の空気酸化反応速度定数

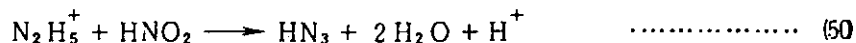


付図1.10 有機相のHNO₃濃度とU (IV)の空気酸化反応速度定数の関係

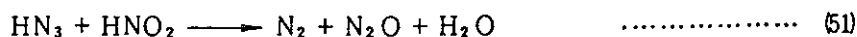
Appendix E N_2H_4 による HNO_2 の分解反応

(1) 反応式

HNO_2 とヒドラジン(一般には硝酸塩として $N_2H_5NO_3$ の化学形で使用される)とは50式に従い急速に反応し⁸⁾、アジ化水素(HN_3)を生成する。



HN_3 も HNO_2 と(51)式により反応するが、



反応速度が遅く、 HN_3 が HNO_2 に対して比較的安定であるので⁹⁾、ここでは(51)式による反応を無視する。(50)式によれば、 $N_2H_5NO_3$ 1モルと HNO_2 1モルが反応して、1モルの H^+ が生成する。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

J. R. Perrott らの研究により⁸⁾、 $N_2H_5NO_3$ が大過剰に存在する時の反応速度式として(52)式が導かれている。

$$-\frac{d[HNO_2]}{dt} = 3.7 \times 10^4 [HNO_2][N_2H_5^+][H^+] \quad \dots\dots\dots (52)$$

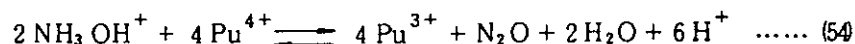
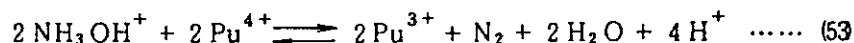
有機相における反応速度式

$N_2H_5NO_3$ が有機相(30%TBP/n-Dodecane)に入りにくいので、有機相では反応がおこらないとする。しかし、有機相に抽出された HNO_2 とは、水相と有機相の界面で激しく反応すると言われている²⁾。

Appendix F HANによるPu(IV)の還元反応

(1) 反応式

ヒドロキシルアミン（一般には硝酸塩として NH_3OHNO_3 の化学形で使用されるので、以下HANと略称する）によるPu(IV)の還元反応は、HANが過剰に存在する時には(53)式に従い、不足する時には(54)式に従う。^{(10),(11)}



Pu(IV)を還元する時には、HANの過剰量を加えるのが普通であるため、反応式として(53)式をとる。これによれば、Pu(IV)1モルが還元されて2モルの H^+ が生成する。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

G. S. Barney⁽¹⁰⁾, G. L. Richardson⁽¹²⁾ によって、(53)式に示す還元反応速度式が導かれている。

$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{k' [\text{Pu(IV)}]^2 [\text{NH}_3\text{OH}^+]^2}{[\text{Pu(III)}]^2 [\text{H}^+]^4 (1 + \beta_1 [\text{NO}_3^-])^2} \quad \dots\dots (55)$$

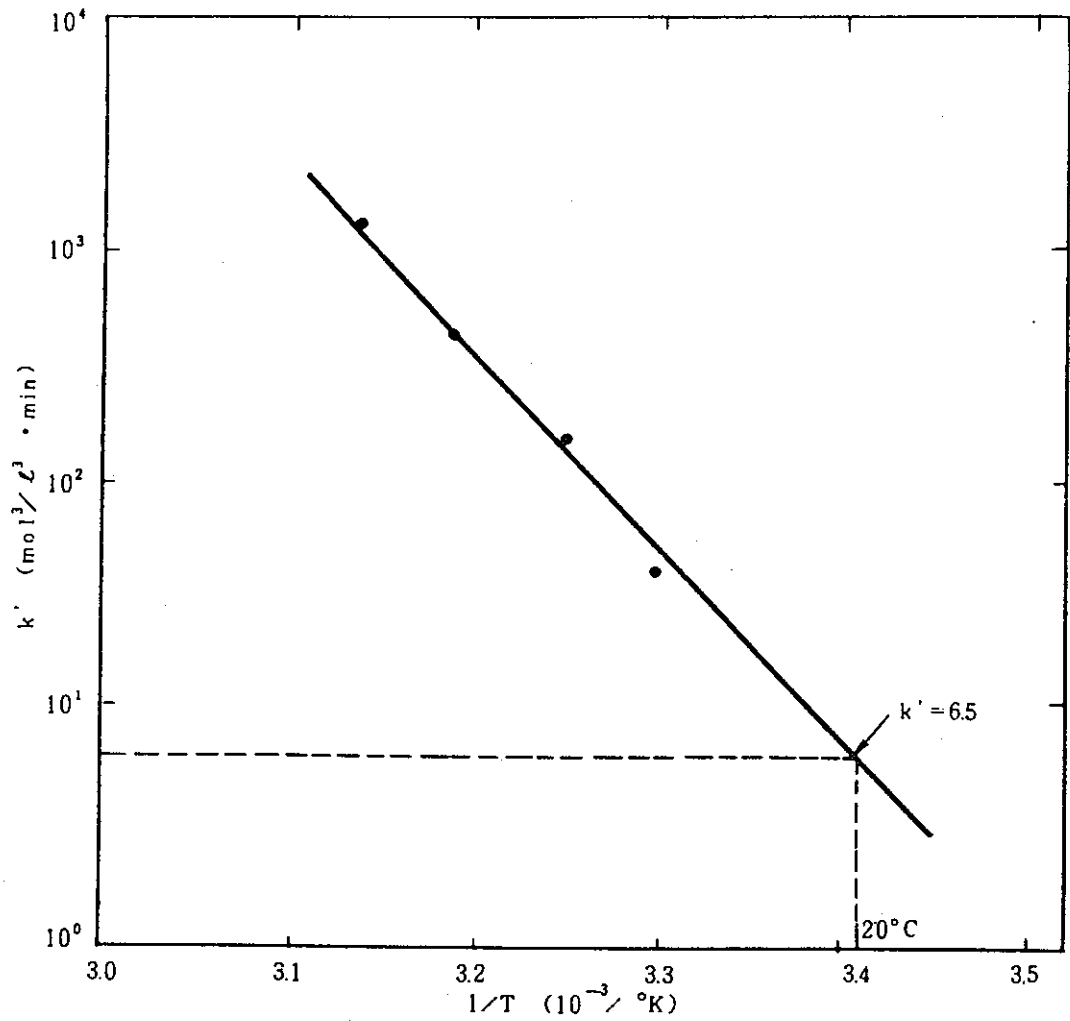
ここで、 k' は総括反応速度定数、 β_1 は反応中間体である PuNO_3^{+3} の安定度定数である。

反応温度と k' 、 β_1 の関係⁽¹²⁾をそれぞれ付図1.11, 1.12にArrheniusプロットし、20℃における値を求めた。付図1.11から $k' = 6.5 \text{ mol}^3/\text{l}^3 \cdot \text{min}$ 、付図1.12から $\beta_1 = 4.3 \text{ l/mol}$ が得られ、(55)式に代入すると(56)式の還元速度式となる。

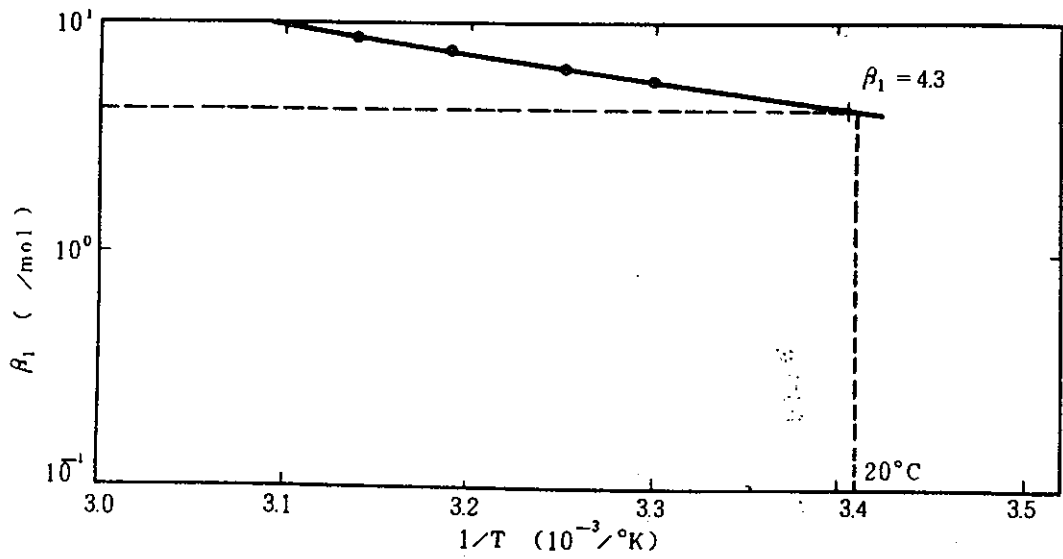
$$-\frac{d[\text{Pu(IV)}]}{dt} = \frac{6.5 [\text{Pu(IV)}]^2 [\text{NH}_3\text{OH}^+]^2}{[\text{Pu(III)}]^2 [\text{H}^+]^4 (1 + 4.3 [\text{NO}_3^-])^2} \quad \dots\dots (56)$$

有機相における反応速度式

HANが有機相(30%TBP/n-Dodecane)に抽出されない⁽¹²⁾ので、還元反応はおこらないとする。



付図 1.11 HAN による Pu (IV) の還元反応における温度と総括
反応速度定数の関係

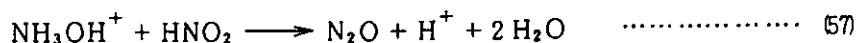


付図 1.12 HAN による Pu (IV) の還元反応における温度と β の関係

Appendix G HANによるHNO₂の分解反応

(1) 反応式

HAN は N₂H₄ と同様に HNO₂ と反応し、(57)式に従って HNO₂ を分解する¹³⁾



HAN 1 モルと HNO₂ 1 モルが反応して、1 モルの H⁺ が生成する。

(2) 反応速度式

水相における反応速度式

G. S. Barney によって、HAN が過剰に存在する場合の反応速度式として(58)式が示されている¹³⁾。

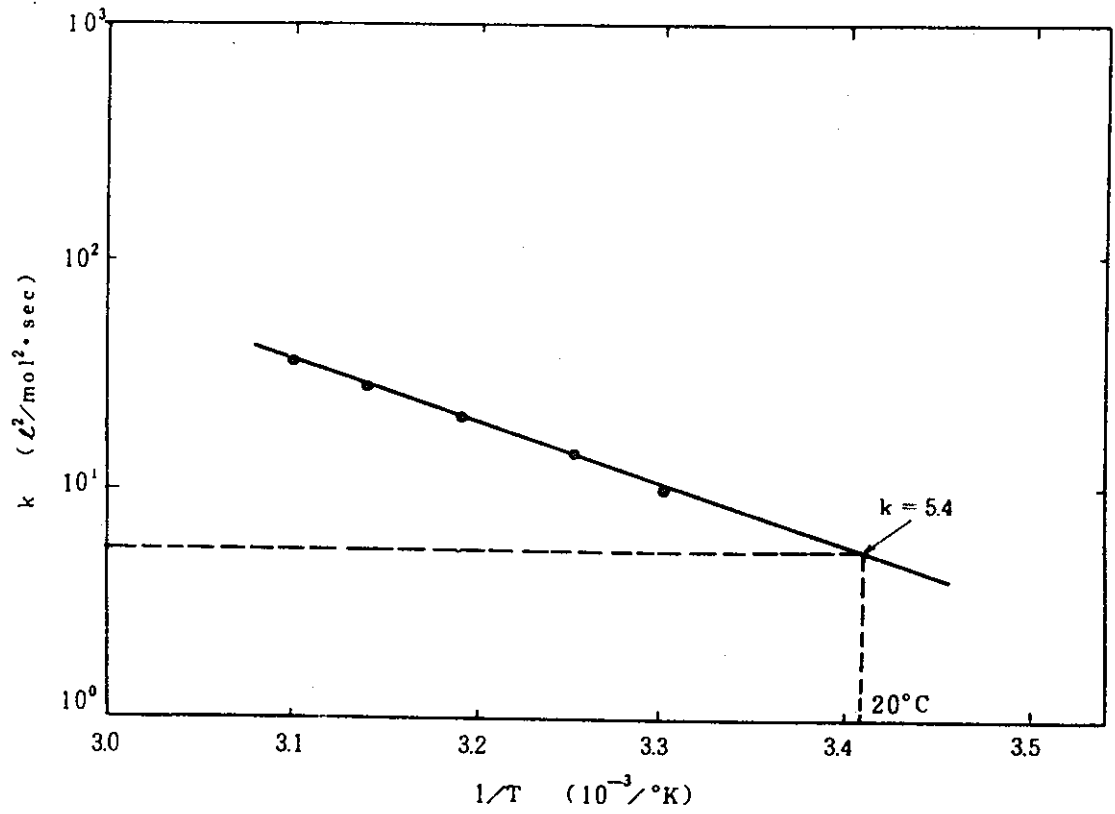
$$-\frac{d(\text{HNO}_2)}{dt} = k(\text{HNO}_2)(\text{NH}_3\text{OH}^+)(\text{H}^+) \quad \dots\dots\dots (58)$$

反応温度と k の関係を G. S. Barney の実験値¹³⁾ から付図 1. 13 に Arrhenius プロットし、20℃における反応速度定数 k を求めると、 $k = 3.2 \times 10^2 \text{ l}^2/\text{mol}^2 \cdot \text{min}$ が得られる。これを(58)式に代入すると (59)式の反応速度式が得られる。

$$-\frac{d(\text{HNO}_2)}{dt} = 3.2 \times 10^2 (\text{HNO}_2)(\text{NH}_3\text{OH}^+)(\text{H}^+) \quad \dots\dots\dots (59)$$

有機相における反応速度式

HAN が有機相 (30% TBP/n-Dodecane) に抽出されない¹²⁾ので、還元反応はおこらないとする。



付図 1. 13 HAN による HNO_2 の分解反応における温度と反応速度定数の関係

引用文献

- 1) 栢, 広木, " 湿式再処理の分離, 精製に関する研究 (プルトニウムの原子価調整とその応用) "; PNCT-3152 (1969).
- 2) P. Biddle, H.A.C. McKay and J.H. Miles, "The Role of Nitrous Acid in the Reduction of Plutonium(IV) by Uranium(IV) in TBP Systems", Solvent Extraction Chemistry of Metals, p. 133 (Macmillan, London, 1965).
- 3) T.W. Newton, "The Kinetics of the Reaction between Pu(IV) and U(IV)", J. Phys. Chem., 63, 1493 (1959).
- 4) H.A.C. McKay, R.J.W. Streeton and A.G. Wain, "Mixer-settler Runs to Study Uranium(IV) as a Reductant in Uranium/Plutonium Separation", AERE-R 4381 (1963).
- 5) 辻野, 八木, 栢, " ウラナス [U(IV)] によるプルトニウムの還元分離工程 ", JAERI - memo - 2428 (1966).
- 6) A.L. Slade, "Oxidation of Uranium(IV) by Oxygen and Nitrous Acid", U.S. AEC Report, DP-554 (1961).
- 7) J. Halpern and J.G. Smith, "Kinetics of the Oxidation of Uranium(IV) by Molecular Oxygen in Aqueous Perchloric Acid Solution", Can. J. Chem., 34, 1419 (1956).
- 8) J.R. Perrott, G. Stedman and N. Uysal, "Kinetic and Product Study of the Reaction between Nitrous Acid and Hydrazine", J. Chem. Soc., Dalton Trans., 1976, 2058.
- 9) A.D. Kelmers and D.N. Browning, "Hydrazoic Acid Distribution Coefficients in PUREX Processing", EPDA Rep. (U.S.A.), Conf. 770506-2.
- 10) G.S. Barney, "A Kinetic Study of the Reaction of Plutonium(IV) with Hydroxylamine", ARH-SA-207 (1975).

- 11) R.J.W. Streeton and E.N. Jenkins, "The Preparation, Stabilisation and Analysis of Uranium(IV) Nitrate Solutions", AERE-R3938 (1962).
- 12) G.L. Richardson and J.L. Swanson, "Plutonium Partitioning in the PUREX Process with Hydrazine-Stabilized Hydroxylamine Nitrate", HEDL-TME-75-31 (1975).
- 13) G.S. Barney, "The Reaction of Hydroxylamine with Nitrous Acid", ARH-SA-97 (1971).

付録2 プログラムリスト

```

C      PROGRAM MIXSET (INPUT,OUTPUT,TAPL5=INPUT,TAPL6=OUTPUT,TAPL7)
C      MIXSET CODE      AUGUST 30,1977      CODED BY SHOJI FUKUJOA
C      -----
C      A MULTI-PURPOSE COMPUTER PROGRAM FOR THE SIMULATION OF SOLVENT
C      EXTRACTIION PROCESS WITH MULTI-COMPONENTS
C      MIXSET
C      REVISED IN NOVEMBER 30,1978
C      -----
C      PLUTONIUM REDUCTION ROUTINE IS ADDED
C      MIXSET
C      COMMON/SOLUTE/NCOMP      ,ICOMP      ,NDCAL(3)      ,CNAME(8)
1,UNIT(11)      ,CNVSN(11)
C      COMMON/STAGES/NBNKS      ,NSTGS(3)      ,NFRST(3)      ,LEVEL(50)
1,IAQFD(50)      ,IOGFD(50)      ,HM(50)      ,HS(50)      ,HMA(50)
2,HMO(50)      ,HMAV(50)      ,HMOV(50)      ,HSA(50)      ,HSO(50)
3,HSAP(50)      ,HSOP(50)      ,HL(50)      ,HLP(50)      ,WRCL(50)
C      COMMON/REACTN/IREAC(3)      ,JREAC(8,3)      ,ARATE(8,3)      ,ORATE(8,3)
C      COMMON/TOLERC/EPSTR(10)
C      COMMON/PURXEQ/CTBP      ,CTBPM      ,NCHFG(9)      ,SCHRG(8)
1,NEXTC(8)      ,SEXTC(8)      ,EQLCT(8,3)      ,COEFF(4,8,4)      ,STRNG(8)
C      COMMON/DBCOEF/IDREF(8,3)      ,DBCNT(8,3)      ,IDBLK(10)      ,DBTJL(21,2,10)
C      COMMON/FEE DSR/IDXFD(15)      ,FDTBL(21,10,15)      ,HLTBL(11,2,50)
C      COMMON/OGFLOT/TBANK(10,2)      ,BFOUT(100,2)      ,YFOUT(100,8,2)      ,ISOFL(2)
C      COMMON/EFFICY/IEFFN(8,3)      ,EF(8,50)
C      COMMON/CONTRL/ICALC(3)      ,IFLOW      ,INCON      ,TFINL
1,CPLIM      ,TAU(3)      ,PRIM(100)      ,ILOPT(100)      ,NPLT(10)
COMMON      ,W(50)      ,B(50)      ,WAV(50)      ,BAV(50)
1,WP(50)      ,BP(50)      ,WFAV(50)      ,JFAV(50)      ,XM(8,50)
2,YM(8,50)      ,XS(8,50)      ,YS(8,50)      ,XFAV(8,50)      ,YFAV(8,50)
3,XINP(8,50)      ,XMP(8,50)      ,YMP(8,50)      ,XSP(8,50)      ,YSP(8,50)
COMMON/NPLOTS/MPLT      ,MPSTG(20)      ,MPFIG(20)      ,MPCOM(20)
1      ,MPSCL(20)      ,MPCNT(23)
COMMON/SPLOTS/LPNUM      ,TSPLT(10)      ,LPLOT(10)      ,LPJNK(10)
1      ,LPSC(10)      ,LPCMP(30)      ,LPCNT      ,JPCNT
COMMON/OPTIMZ/IFOPT      ,JPR      ,JFP      ,ETA
1,DFR      ,IFLWN(5)      ,FLWUP(5)      ,FLWLH(5)      ,DTFLW(5)
2,FDJPR      ,FDJFP      ,WTFR1      ,WTFR2      ,NSS
3,IFSPC(5)
COMMON PLBUF(106,23)      ,BUFR(1024)
COMMON DUMMY(1100)
COMMON/ERRORS/IEPOR,ITNOM(21),ITNOS(21)
COMMON/TITLE /LINE,TIT(8),DAY,NPAGE
C      -----
C      **** PROCESSING OF INPUT DATA ****
C      CALL MEMSET(0,W,8262)
C      CALL SECON(CPUTI)
5 CONTINUE
IF(LINE.GT.0) WRITE(6,6000)
6000 FORMAT(IH1)
CALL INPUTC
CALL INPERR
C      -----
C      IF(LINE.NE.-100) CALL INPRNT
C      INITIAL SET FOR PLOT ROUTINE

```


	STOP	MIXSET
95	CONTINUE	MIXSET
	IF(DCPU.LT.CPLIM) GOTO 25	MIXSET
	WRITE(6,6030) DCPU	MIXSET
6030	FORMAT(/20H *** CPU TIME LIMIT ,F6.1,8H SECONDS)	MIXSET
	STOP	MIXSET
C		MIXSET
	END	MIXSET

	P6=F(6)+0.5*DPU3	CALMR1
	P5=F(5)-DPU4	CALMR1
	DX7=AMIN1(F(7),P6)	CALMR1
	K4=1.E12	CALMR1
	IF(X(6).GT.0.) CALL HANRCT(4,X,H,K4)	CALMR1
	DX5=AMIN1(P5,P6-DX7,K4)	CALMR1
	DX6=DX5+DX7	CALMR1
	X(5)=(P5-DX5)/A	CALMR1
	X(7)=(F(7)-DX7)/A	CALMR1
	X(6)=(P6-DX6)/(A+D(6)*0)	CALMR1
	Y(6)=X(6)*D(6)	CALMR1
	30 X(1)=(F(1)+2.*DPU4-1.5*DPU3+DX6)/(A+D(1)*0)	CALMR1
	Y(1)=X(1)*D(1)	CALMR1
	X(2)=F(2)/(A+D(2)*0)	CALMR1
C	IF(IT.EQ.0) GOTO 50	CALMR1
	EMAX=0.	CALMR1
	DO 40 J=1,5	CALMR1
	E=0.	CALMR1
	IF(X(J).GT.CLW) E=ABS(X(J)-T(J))/X(J)	CALMR1
	IF(E.LT.EMAX) GOTO 40	CALMR1
	EMAX=E	CALMR1
40	CONTINUE	CALMR1
	IF(IT.GT.ITM.OR.EMAX.LT.EPS) GOTO 50	CALMR1
	CALL MEMOVE(X,T,NC)	CALMR1
	GOTO 10	CALMR1
C	50 CONTINUE	CALMR1
	Y(2)=X(2)*D(2)	CALMR1
C	RETURN	CALMR1
	END	CALMR1

	SUBROUTINE CALSR1(X,H,R,F,IT,EPS,NC)	CALSR1
C		CALSR1
	CALSR1 CALCULATES CONC.OF SETTLER WITH PU-HAN REACTION	CALSR1
C		CALSR1
	DIMENSION X(8),F(9),T(8)	CALSR1
	REAL K1,K2,K4	CALSR1
	DATA ITM,NEW/15,12/,CLW/1.0E-15/	CALSR1
C		CALSR1
	X3 = PU(III)	CALSR1
C	X4 = PU(IV)	CALSR1
	IT=0	CALSR1
	EPN=EPS*0.2	CALSR1
	CALL MEMOVE(X,T,NC)	CALSR1
	ENTRY RCLSR1	CALSR1
	P=F(4)+F(3)	CALSR1
	P3=F(4)	CALSR1
	X3=X(4)	CALSR1
	X4=X(3)	CALSR1
10	IT=IT+1	CALSR1
	CALL HANRCT(1,X,H,K1)	CALSR1
	CALL HANRCT(2,X,H,K2)	CALSR1
	IF(K1.EQ.0.) GOTO 22	CHEM06
C		CALSR1
	M=0	CALSR1
20	M=M+1	CALSR1
	X3=(P-R*X4)/P	CALSR1
	FY4=K1*X4*X4-((R+K2)*X3-P3)*X3*X3	CALSR1
	FDX4=2.*K1*X4+(3.*(R+K2)*X3-2.*P3)*X3	CALSR1
	E=0.	CALSR1
	IF(FDX4.NE.0.) E=FY4/FDX4	CALSR1
	X4=X4-E	CALSR1
	IF(ABS(E).GT.EPN*X4.AND.M.LT.NEW) GOTO 20	CALSR1
	IF(X4.LT.0.) X4=1.E-30	CALSR1
C		CALSR1
	X3=(P-X4*R)/R	CALSR1
	DPU4=0.	CALSR1
	IF(X3.GT.0.) DPU4=K1*X4*X4/(X3*X3)	CALSR1
	DPU3=K2*X3	CALSR1
	GOTO 24	CHEM06
22	DPU4=0.	CHEM06
	DPU3=0.	CHEM06
	X3=F(4)/R	CHEM06
	X4=F(3)/R	CHEM06
24	CONTINUE	CHEM06
	X(4)=X3	CALSR1
	X(3)=X4	CALSR1
C		CALSR1
	DX6=0.	CALSR1
	P6=F(6)+0.5*DPU3	CALSR1
	P5=F(5)-DPU4	CALSR1
	DX7=AMIN1(F(7),P6)	CALSR1
	K4=1.E12	CALSR1
	IF(X(6).GT.0.) CALL HANRCT(4,X,H,K4)	CALSR1
	DX5=AMIN1(P5,P6-DX7,K4)	CALSR1
	DX6=DX7+DX5	CALSR1
	X(5)=(P5-DX5)/R	CALSR1

	X(6)=(P6-DX6)/P	CALSR1
	X(7)=(F(7)-DX7)/R	CALSR1
30	X(1)=(F(1)+2.*OPU4-1.5*OPU3+DX6)/R	CALSR1
C	IF(IT.EQ.0) GOTO 50	CALSR1
	EMAX=0.	CALSR1
	DO 40 J=1,5	CALSR1
	IF(J.EQ.2) GOTO 40	CALSR1
	F=0.	CALSR1
	IF(X(J).GT.CLW) E=ABS(X(J)-T(J))/X(J)	CALSR1
	IF(E.LT.EMAX) GOTO 40	CALSR1
	EMAX=E	CALSR1
40	CONTINUE	CALSR1
	IF(IT.GT.ITM.OR.EMAX.LT.EPS) GOTO 50	CALSR1
	CALL MEMOVE(X,T,5)	CALSR1
	GOTO 10	CALSR1
50	CONTINUE	CALSR1
	X(2)=F(2)/R	CALSR1
C	RETURN	CALSR1
	END	CALSR1


```

SUBROUTINE CALSR2(X,H,R,F,IT,EPS,NC,NPS)
C
C CALSR2 CALCULATES CONC. OF SETTLER WITH PU-URANOUS REACTION.
C IF NPS.LT.0, THEN ORGANIC PHASE
C IF NPS.LT.0, THEN AQUEOUS PHASE
C
C -----
C DIMENSION X(8),F(8),T(8)
C REAL K(4),K34
C DATA MIT/15,CLW/1.0E-15/
C DATA ICAL/1/
C -----
C
C IT=0
C CALL MEMOVE(X,T,NC)
C ENTRY RCLSR2
C P=F(3)+F(4)
10 IT=IT+1
C CALL REACTN(NPS,X,H,K)
C K34=K(3)+K(4)
C RK=K34+R
C
C IF(ICAL.EQ.0) GOTO 15
C A=K(1)*R+K(1)*K(2)
C B=RK*(R+K(2))+K(1)*(F(5)-0.5*F(3))-0.5*K(1)*K(2)*P/R
C C=RK*(F(3)+K(2)*P/R)
C IF(A.LE.0..OR.C.LT.CLW) GOTO 12
C X(3)=(SQRT(9*B+2.*A*C)-B)/A
C GOTO 14
12 IF(B.EQ.0.) GOTO 14
C X(3)=C/B
14 IF(X(3).LE.0.) X(3)=1.0E-30
C X(5)=F(5)/(RK+0.5*K(1)*X(3))
C X(4)=(P-R*X(3))/R
C GOTO 18
16 CONTINUE
C X(3)=(F(3)+K(2)*T(4))/(R+K(1)*T(5))
C X(4)=(F(4)+K(1)*T(3)*T(5))/(R+K(2))
C X(5)=F(5)/(RK+0.5*K(1)*T(3))
18 CONTINUE
C
C PP=0.
C IF(NC.LT.6) GOTO 20
C P6=0.5*K(2)*X(4)+K(3)*X(5)
C P6=F(6)+P6
C IF(NPS.GT.0) PP=AMIN1(P6,F(7))
C X(6)=(P6-PP)/P
C X(7)=(F(7)-PP)/R
20 X(1)=(F(1)+2.*K(1)*X(3)*X(5)-1.5*K(2)*X(4)+(K(3)+2.*K(4))*X(5)+PP)
1 /R
C IF(X(1).LT.0.) X(1)=CLW
C
C IF(IT.LE.0) GOTO 40
C EMAX=0.
C DO 30 J=1,5
C E=0.
C IF(X(J).GT.CLW) E=ABS(X(J)-T(J))/X(J)

```

```
-----
      IF(E.LT.EMAX)                GOTO 30
      EMAX=E
30  CONTINUE                       CALSR2
      IF(EMAX.LT.EPS.OR.IT.GT.MIT) CALSR2
      CALL MEMOVE(X,T,NC)          CALSR2
      GOTO 10                       CALSR2
-----
C
40  CONTINUE                       CALSR2
      X(2)=(F(2)+F(5)-R*X(5))/R    CALSR2
      RETURN                       CALSR2
      END                           CALSR2
```


40	CONTINUE	CFLOWS
C		CFLOWS
C	*** ORGANIC STREAM FLOW ***	CFLOWS
C		CFLOWS
	DO 90 K=1,NS	CFLOWS
	I=N+K-1	CFLOWS
	BF=0.0	CFLOWS
	M=IOGFD(I)	CFLOWS
	IF(M.LE.0)	CFLOWS
	GOTO 60	CFLOWS
	BF=TERP(FDTBL(1,2,M),FDTBL(1,1,M),T)	CFLOWS
	BFAV(I)=TERP(FDTBL(1,2,M),FDTBL(1,1,M),TMID)	CFLOWS
	DO 50 J=1,NCOMP	CFLOWS
	JJ=J+2	CFLOWS
	YFAV(J,I)=TERQ(FDTBL(1,JJ,M),0,0)*BFAV(I)	CFLOWS
50	CONTINUE	CFLOWS
60	CONTINUE	CFLOWS
C		CFLOWS
C	--- STREAM FROM PREVIOUS BANK ---	CFLOWS
	IF(NB.LE.1)	CFLOWS
	GOTO 80	CFLOWS
	L=NB-1	CFLOWS
	IS=ISOFL(L)	CFLOWS
	IF(IS.NE.K)	CFLOWS
	GOTO 80	CFLOWS
	BB=TERP(BFOUT(1,L),TOBNK(1,L),T)	CFLOWS
	BF=BF+BB	CFLOWS
	BB=TERP(BFOUT(1,L),TOBNK(1,L),TMID)	CFLOWS
	BFAV(I)=BFAV(I)+BB	CFLOWS
	DO 70 J=1,NCOMP	CFLOWS
	YY=TERQ(YFOUT(1,J,L),0,0)	CFLOWS
	YFAV(J,I)=YFAV(J,I)+YY	CFLOWS
70	CONTINUE	CFLOWS
80	CONTINUE	CFLOWS
	BIN=BF	CFLOWS
	IF(K.GT.1) BIN=BIN+B(I-1)	CFLOWS
	B(I)=BIN	CFLOWS
90	CONTINUE	CFLOWS
C		CFLOWS
C	*** EFFECT DUE TO LEVEL HEIGHT CHANGE ***	CFLOWS
C		CFLOWS
	DO 110 K=1,NS	CFLOWS
	I=N+K-1	CFLOWS
	LL=LEVEL(I)	CFLOWS
	IF(LL.LE.0)	CFLOWS
	GOTO 110	CFLOWS
	HL(I)=TERP(HLTBL(1,2,LL),HLTBL(1,1,LL),T)	CFLOWS
	HSA(I)=HS(I)*HL(I)	CFLOWS
	HSO(I)=HS(I)-HSA(I)	CFLOWS
	H=HS(I)*(HL(I)-HLP(I))/DT	CFLOWS
	DO 100 M=1,NS	CFLOWS
	IF(M.LE.K) HACHG(M)=HACHG(M)+H	CFLOWS
	IF(M.GE.K) HOCHG(M)=HOCHG(M)+H	CFLOWS
100	CONTINUE	CFLOWS
110	CONTINUE	CFLOWS
	DO 120 K=1,NS	CFLOWS
	I=N+K-1	CFLOWS
	WAV(I)=(W(I)+WP(I))*0.5+HACHG(K)	CFLOWS
	BAV(I)=(B(I)+BP(I))*0.5+HOCHG(K)	CFLOWS
	WP(I)=W(I)	CFLOWS
	BP(I)=B(I)	CFLOWS

	W(I)=W(I)+HACHG(K)	CFLOWS
	B(I)=B(I)+HOCHG(K)	CFLOWS
	120 CONTINUE	CFLOWS
C		CFLOWS
C	*** PHASE VOLUME OF MIXER ***	CFLOWS
C		CFLOWS
	DC 130 K=1,NS	CFLOWS
	I=N+K-1	CFLOWS
	F=WAV(I)+BAV(I)+WRCL(I)	CFLOWS
	FW=WFAV(I)+WRCL(I)	CFLOWS
	IF(K.LI.NS) FW=FW+WAV(I+1)	CFLOWS
	HMAV(I)=HM(I)*FW/F	CFLOWS
	HMOV(I)=HM(I)-HMAV(I)	CFLOWS
	F=W(I)+B(I)+WRCL(I)	CFLOWS
	HMA(I)=HM(I)*(WP(I)+WRCL(I))/F	CFLOWS
	HMO(I)=HM(I)-HMA(I)	CFLOWS
	130 CONTINUE	CFLOWS
	GOTO 250	CFLOWS
C		CFLOWS
C		CFLOWS
C	*** CONC. OF FEEDS ARE VARIABLELL ***	CFLOWS
	140 CONTINUE	CFLOWS
	IF(IFLOW.EQ.2) GOTO 130	CFLOWS
	150 L=NB-1	CFLOWS
	I=ISOFL(L)+N-1	CFLOWS
	K=IFLOW+1	CFLOWS
	M=IOGFD(I)	CFLOWS
	IF(M.EQ.0) BFAV(I)=0.	CFLOWS
	BFAV(I)=BFAV(I)+R(N-1)	CFLOWS
	DC 170 J=1,NCOMP	CFLOWS
	YY=0.	CFLOWS
	IF(M.LE.0) GOTO 160	CFLOWS
	IF(K.LE.2) YY=FDTBL(K,J+2,M)*BFAV(I)	CFLOWS
	IF(K.EQ.3) YY=YFAV(J,I)	CFLOWS
	160 YFAV(J,I)=YY+TERP(YFOUT(1,J,L),TDBNK(1,L),TMID)	CFLOWS
	170 CONTINUE	CFLOWS
	GOTO 250	CFLOWS
C		CFLOWS
	180 CONTINUE	CFLOWS
	DO 220 M=1,15	CFLOWS
	K=IDXF0(M)	CFLOWS
	I=IABS(K)	CFLOWS
	IF(K.EQ.0) GOTO 230	CFLOWS
	IF(I.LI.N.OP.I.GE.N+NS) GOTO 220	CFLOWS
	IF(K.GT.0) GOTO 200	CFLOWS
	BFAV(I)=TERP(FDTBL(1,2,M),FDTUL(1,1,M),TMID)	CFLOWS
	DO 190 J=1,NCOMP	CFLOWS
	190 YFAV(J,I)=TERP(FDTBL(1,J+2,M),FDTUL(1,1,M),TMID)*BFAV(I)	CFLOWS
	GOTO 220	CFLOWS
	200 DC 210 J=1,NCOMP	CFLOWS
	210 XFAV(J,I)=TERP(FDTBL(1,J+2,M),FDTUL(1,1,M),TMID)*WFAV(I)	CFLOWS
	220 CCNTINUE	CFLOWS
	230 CONTINUE	CFLOWS
	IF(NB.GT.1) GOTO 150	CFLOWS
C		CFLOWS
	250 CONTINUE	CFLOWS
	RETURN	CFLOWS
	END	CFLOWS

		x(J,I)=XN	
	70	CONTINUE	CONVGC
	80	CONTINUE	CONVGC
		GOTO 50	CONVGC
C		CONVERGED	CONVGC
	90	CONTINUE	CONVGC
		ICONV=1	CONVGC
		GOTO 110	CONVGC
C		FAILURE TO CONVERGE AFTER MAXIMUM ITRATIONS	CONVGC
	100	CONTINUE	CONVGC
		ICONV=0	CONVGC
C			CONVGC
	110	RETURN	CONVGC
		END	CONVGC

NR.	SEVERITY	DETAILS	DIAGNOSIS OF PROBLEM
32	I		THERE IS NO PATH TO THIS STATEMENT.

	SUBROUTINE DATARD(KEYWD,NDATA,DATAV)	DATARD
CCC	COMMON DUMMY(4800)	DATARD
	COMMON ICARD,IC,IEROR,IESRG(2,50)	DATARD
	DIMENSION DATAV(1)	DATARD
	DIMENSION NCHAR(90)	DATARD
	EQUIVALENCE (VALUE,NALUE)	DATARD
C	-----	DATARD
C	NINPT=5	DATARD
	NTOUT=6	DATARD
	NDATA=0	DATARD
	KEYWD=0	DATARD
	KWCNT=0	DATARD
	KWCHK=0	DATARD
	DO 10 N=1,400	DATARD
10	DATAV(N)=0.0	DATARD
	IC=0	DATARD
C	-----	DATARD
C	15 READ(NINPT,2000) NCHAR	DATARD
	IF(EOF(NINPT).NE.0.0) STOP	DATARD
	IC=IC+1	DATARD
	WRITE(NTOUT,1000) NCHAR	DATARD
	NCOLM=0	DATARD
	NCONT=0	DATARD
C	-----	DATARD
C	20 VALUE=0.0	DATARD
	MREAD=0	DATARD
	NSIGN=0	DATARD
	NP CNT=1	DATARD
	NESGN=0	DATARD
	NEXPV=0	DATARD
	KALPH=0	DATARD
	NRPET=1	DATARD
	KRPET=0	DATARD
C	-----	DATARD
C	25 NCOLM=NCOLM+1	DATARD
	IF(NCOLM.GT.73) GOTO 120	DATARD
	IF(NCOLM.EQ.73) GOTO 50	DATARD
	MARKX=NCHAR(NCOLM)	DATARD
	IF(MARKX.LE. 26) GOTO 30	DATARD
	IF(MARKX.LE. 36) GOTO 40	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R+) GOTO 50	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R-) GOTO 60	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R) GOTO 75	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R,) GOTO 75	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R)) GOTO 75	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R() GOTO 75	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R.) GOTO 95	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R\$) GOTO 100	DATARD
	IF(MARKX.EQ.1R*) GOTO 105	DATARD
	IF(NREAD.LE. 0) GOTO 35	DATARD
C	-----	DATARD
C	27 CONTINUE	DATARD
	IEROR=IEROR+1	DATARD
	IESRG(1,IEROR)=NCOLM	DATARD

	IESRG(2,IEROR)=ICARD+IC	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
30	IF(KWCHK.GT.0) GOTO 35	DATARD
32	IF(NCHAR(NCOLM+1).GT.36) KWCHK=1	DATARD
	IF(KWCNT.GE.5) GOTO 25	DATARD
	KWCNT=KWCNT+1	DATARD
	KEYWD=KEYWD*64+MARKX	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
35	IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RE) GOTO 55	DATARD
	IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RR) GOTO 110	DATARD
	IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RH) GOTO 36	DATARD
	GOTO 27	DATARD
36	N=VALUE	DATARD
	N1=NCOLM+1	DATARD
	N2=NCOLM+N	DATARD
	NCOLM=N2	DATARD
	ENCODE(N,2000,VALUE) (NCHAR(I),I=N1,N2)	DATARD
	KALPH=1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
40	IF(KWCHK.LE.0) GOTO 32	DATARD
	IF(KRPET.GT.0) GOTO 115	DATARD
	IF(NESGN.NE.0) GOTO 45	DATARD
	NREAD=1	DATARD
	VALUE=VALUE*10+MARKX-27	DATARD
	IF(NPCNT.GE.1) GOTO 25	DATARD
	NPCNT=NPCNT-1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
45	NEXPV=NEXPV*10+MARKX-27	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
50	IF(NREAD.GT.0) GOTO 55	DATARD
	NSIGN=1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
55	NESGN=1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
60	IF(NREAD.GT.0) GOTO 65	DATARD
	NSIGN=-1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
65	NESGN=-1	DATARD
	GOTO 25	DATARD
C		DATARD
CCC		DATARD
75	IF(NREAD.LE.0.AND.KALPH.LE.0) GOTO 25	DATARD
	IF(KALPH.GT.0) GOTO 90	DATARD
80	IF(NPCNT.GE.0) GOTO 85	DATARD
	VALUE=VALUE*0.1	DATARD
	NPCNT=NPCNT+1	DATARD
	GOTO 80	DATARD
85	IF(NSIGN.LT.0) VALUE=-VALUE	DATARD
	IF(NEXPV.LE.0) GOTO 90	DATARD
	IF(NESGN) 86,90,87	DATARD
86	E=1.0/10.0**NEXPV	DATARD


```

SUBROUTINE DATAST                                     DATAST
C                                                     DATAST
C   *PURPOSE OF DATAST                               DATAST
C   TO SET THE DEFAULT VALUES OF INPUT VARIABLES   DATAST
C   TO CALCULATE ESSENTIAL CONSTANTS                DATAST
C   TO CONVERT THE INPUT VALUES INTO INTERNAL UNITS DATAST
C                                                     DATAST
COMMON/SOLUTE/NCOMP      ,ICOMP      ,NDCAL(3)  ,CNAME(8)  COM01
1,UNIT(11)      ,CNVSN(11)                                     COM01
COMMON/STAGES/NBNKS      ,NSTGS(3)  ,NFRST(3)  ,LEVEL(50)  COM02
1,IAQFD(50)      ,IOGFD(50)  ,HM(50)      ,HS(50)      ,HMA(50)  COM02
2,HMQ(50)      ,HMAV(50)    ,HMOV(50)    ,HSA(50)    ,HSQ(50)  COM02
3,HSAP(50)      ,HSOP(50)   ,HL(50)     ,HLP(50)    ,HRCL(50)  COM02
COMMON/REACTN/IRFAC(3)  ,JREAC(8,3)  ,ARATE(8,3)  ,ORATE(8,3)  COM03
COMMON/TOLERC/EPSTR(10)                                     COM03
COMMON/PURXEQ/CTHP      ,CTBPM      ,NCHRG(8)  ,SCHRG(8)  COM04
1,NEXTC(8)      ,SEXTC(8)  ,EQLCT(8,3)  ,COEFF(4,8,4)  ,STRNG(8)  COM04
COMMON/DBCOEF/IDREF(8,3) ,DBCNT(8,3)  ,IDULK(10)  ,DBTBL(21,2,10) COM04
COMMON/FEEDSR/IOXFD(15) ,FDTBL(21,10,15) ,HLTBL(11,2,50) COM05
COMMON/OGFLOT/TDRNK(101,2) ,BFOUT(100,2) ,YFOUT(100,8,2) ,ISOFL(2)  COM05
COMMON/EFFICY/IEFFN(8,3) ,EF(8,50)                                     COM06
COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3) ,IFLOW      ,INCON      ,TFINL      COM07
1,CPLIM      ,TAU(3)      ,PRTIM(100)  ,IPOINT(100)  ,NPLT(10)  COM07
COMMON      ,W(50)      ,B(50)      ,WAV(50)      ,BAV(50)  COM08
1,WP(50)      ,BP(50)      ,WFAV(50)    ,JFAV(50)    ,XM(8,50)  COM08
2,YM(8,50)    ,XS(8,50)    ,YS(8,50)    ,XFAV(8,50)  ,YFAV(8,50)  COM08
3,XINP(8,50)  ,XMP(8,50)  ,YMP(8,50)  ,XSP(8,50)  ,YSP(8,50)  COM08
COMMON/TITLE /LINE,TIT(8)                                     DATAST
-----
C   DATA EPSTR/1.E-5,1.E-4,1.E-3,1.E-3,200.,3*150.,1.E-3,1.E-6/ DATAST
C   DATA HL,HLP/100*0.5/                                       DATAST
C   DATA CNAME/4HHN03,5HU(VI),6HPU(IV),7HPU(III),5HU(IV),4HHN02,3HHYD, DATAST
1   1H /                                                         DATAST
C   DATA UNIT/6H(MOLE),4*5H(G/L),6H(MOLE),5H(G/L),1H ,4H(HR),6H(L/HR) DATAST
1   ,5H (L) /                                                  DATAST
C   DATA CNVSN/1.0,4.202E-3,2*4.184E-3,4.202E-3,1.0,3.125E-2,4*1.0/ DATAST
C   DATA NCHRG/1,2,2,3,4,0,1,0/                                 DATAST
C   DATA TIT/8*1H /                                             DATAST
C   DATA EF/400*1.0/                                           DATAST
C   DATA NCOMP,ICOMP,NDCAL/5,2,5,5,5/                          DATAST
C   DATA CTBP,CTBPM/0.30,1.0961321/                            DATAST
-----
C   OTHER VARIABLES ARE SET TO ZERRO.                            DATAST
C   -----                                                    DATAST
C   DO 10 J=1,NCOMP                                             DATAST
C   C=NCHRG(J)+SCHRG(J)                                         DATAST
C   STRNG(J)=0.5*(C+1.)*C                                       DATAST
10 CONTINUE                                                    DATAST
C   CONVERSION OF FEED STREAMS                                   DATAST
C   JJ=NCOMP+2                                                  DATAST
C   DO 35 M=1,15                                               DATAST
C   IF(M.EQ.0) GOTO 40                                          DATAST
C   IF(FDTBL(21,1,M).LT.-1.0) GOTO 35                          DATAST
C   DO 30 J=1,JJ                                              DATAST
C   IF(J.GT.NCOMP) GOTO 15                                       DATAST

```


R=CNVSN(J)		DATAST
DO 90 I=1,50		DATAST
IF(INCON.EQ.3)	GOTO 83	DATAST
XM(J,I)=XINP(J,I)*R		DATAST
YM(J,I)=0.		DATAST
XS(J,I)=0.		DATAST
YS(J,I)=0.		DATAST
GOTO 90		DATAST
88 YM(J,I)=YM(J,I)*R		DATAST
YS(J,I)=YS(J,I)*R		DATAST
XS(J,I)=XS(J,I)*R		DATAST
90 CONTINUE		DATAST
95 CONTINUE		DATAST
100 CONTINUE		DATAST
CALL MEMSET(0,TDBNK,2002)		DATAST
TDBNK(101,1)=-1.0		DATAST
TDBNK(101,2)=-1.0		DATAST
RETURN		DATAST
END		DATAST

```

SUBROUTINE DBCOFX(NB,I,J,XTRY,YTRY,DTRY)
C
C   DOFX PROVIDES A DISTRIBUTION COEFFICIENT(DTRY) FOR GIVEN VALUES
C   OF AQUEOUS PHASE SOLUTE CONC.(X) ACCODING TO OPTION(IDREF).
C
C   IDREF= 0  USE BUILT IN EQUILIBRIUM DATA(DEFAULT OPTION)
C           =100 USE CONSTANT EQUILIBRIUM DATA(EQLCT)
C           =200 USE CONSTANT DISTRIBUTION COEFF.(DBCNT)
C           =1-10 USE TABULATED DISTRIBUTION COEFF.(DBTBL)
C           =NEG. USE POLYNOMIAL FUNCTIONS OF IONIC STRENGTH WHICH
C                 EXPRESS EQUILI.CONST.(COEFF)
C
C   DIMENSION XTRY(8),YTRY(8),DTRY(8),A(3),GK(8)
C   COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)
C   1,UNIT(11) ,CNVSN(11)
C   COMMON/PURXEQ/CTBP ,CTBPM ,NCHRG(8) ,SCHRG(8)
C   1,NE XTC(8) ,SEXTC(8) ,EQLCT(8,3) ,COEFF(4,8,4),STRNG(8)
C   COMMON/DBCDEF/IDREF(8,3) ,DBCNT(8,3) ,IDBLK(10) ,DBIWL(21,2,10)
C   COMMON/TOLERC/EPSTR(10)
C   EQUIVALENCE (EPSTR(10),EPS)
C
C   DATA MAXIT/20/
C
C   MIACV=NDCAL(NB)
C   M=IDREF(J,NB)
C   IF(M.NE.0) GOTO 100
C
C   USE BUILT-IN EQUILIBRIUM DATA
C   IF(J.GT.1.AND.J.LE.MIACV) GOTO 250
C   DATA IFRST/0/
C   IF(IFRST.GT.0) GOTO 10
C   TEMPC=25.
C   TEMPRK=1000./(TEMPC+273.16)
C   DRT=TEMPRK-3.3539
C   DRTU=EXP(2.5*DRT)
C   DRTP=EXP(-0.2*DRT)
C   DRTH=EXP(0.34*DRT)
C   F=CTBP
C   10 CONTINUE
C   TNM=0.
C   DO 20 N=1,NCOMP
C   IF(XTRY(N).LT.0.) XTRY(N)=0.
C   20 TNM=TNM+XTRY(N)*(NCHRG(N)+SCHRG(N))
C   UAM=XTRY(2)
C   PUAM=XTRY(3)
C   HAM=XTRY(1)
C   PU3AM=XTRY(4)
C   UK=3.7*TNM**1.57+1.4*TNM**3.9+0.011*TNM**7.3
C   UK=UK*(4.*F**(-0.17)-3.)
C   PUK=UK*(0.2+0.55*F**1.25+0.0074*TNM**2)
C   HK1=0.135*TNM**0.82+0.0052*TNM**3.44
C   HK1=HK1*(1.-0.54*EXP(-15.*F))
C   IF(TEMPC.EQ.25.) GOTO 30
C   UK=UK*DRTU
C   PUK=PUK*DRTP
C   HK1=HK1*DRTH

```

30	CONTINUE		DBCOFX
	HK2=HK1		DBCOFX
	PU3K=0.04*TNM**1.8+0.000156*F*TNM**7.		DBCOFX
	AA=2.*(UK*UAM+PUK*PUAM+HK2*HAM+PU3K*PU3AM)		DBCOFX
	B=HK1*HAM+1.		DBCOFX
	C=CTBPM		DBCOFX
	IF(ICOMP.NE.2)	GOTO 40	DBCOFX
	UK4=AMIN1(600.,EXP(1.9336*TNM-3.3360))		DBCOFX
	AA=AA+2.*UK4*XTRY(5)		DBCOFX
40	CONTINUE		DBCOFX
	IF(AA) 50,50,60		DBCOFX
50	IF=CTBPM		DBCOFX
	GOTO 70		DBCOFX
60	IF=(SQRT(B*B+4.*AA*C)-B)/(2.*AA)		DBCOFX
70	CONTINUE		DBCOFX
	TF2=TF**2		DBCOFX
	DTRY(1)=HK1*TF+HK2*TF2		DBCOFX
	DTRY(2)=UK*TF2		DBCOFX
	DTRY(3)=PUK*TF2		DBCOFX
	DTRY(4)=PU3K*TF2		DBCOFX
	IF(ICOMP.EQ.2) DTRY(5)=UK4*TF2		DBCOFX
	GOTO 250		DBCOFX
C			DBCOFX
CCC	USE CONSTANT EQUILIBRIUM DATA		DBCOFX
100	IF(M.NE.100)	GOTO 170	DBCOFX
	IF(J.GT.1.AND.J.LE.MIACV)	GOTO 250	DBCOFX
	CALL MEMOVE(EQLCT(1,NB),GK,MIACV)		DBCOFX
110	TNM=0.		DBCOFX
	DO 120 N=1,NCOMP		DBCOFX
	IF(XTRY(N).LT.0.) XTRY(N)=0.		DBCOFX
120	TNM=TNM+XTRY(N)*(NCHRG(N)+SCHRG(N))		DBCOFX
	DO 130 N=1,MIACV		DBCOFX
	EN=NEXTC(N)+SEXTC(N)		DBCOFX
	A(N)=GK(N)*XTRY(N)*TNM**NCHRG(N)		DBCOFX
	IF(SCHRG(N).GT.0.) A(N)=A(N)*TNM**SCHRG(N)		DBCOFX
130	A(N)=A(N)*EN		DBCOFX
C			DBCOFX
	IT=0.		DBCOFX
	T1=CTBPM		DBCOFX
140	T=T1		DBCOFX
	FX=0.		DBCOFX
	DX=0.		DBCOFX
	DO 150 N=1,MIACV		DBCOFX
	NE=NEXTC(N)		DBCOFX
	NE1=NE-1		DBCOFX
	EN=NE+SEXTC(N)		DBCOFX
	E=A(N)*T**NE		DBCOFX
	G=EN*A(N)		DBCOFX
	IF(NE1.GT.0) G=G*T**NE1		DBCOFX
	IF(SEXTC(N).LE.0.)	GOTO 145	DBCOFX
	SNT=T**SEXTC(N)		DBCOFX
	E=E*SNT		DBCOFX
	G=G*SNT		DBCOFX
145	FX=FX+E		DBCOFX
	DX=DX+G		DBCOFX
150	CONTINUE		DBCOFX
	FX=FX-CTBPM*T		DBCOFX

CCC	FAILURE TO CONVERGE AFTER MAXIMUM ITERATIONS	EITRC1
100	CONTINUE	EITRC1
	WRITE(6,6000) IT,NB,I,J,EMAX	EITRC1
	GOTO 130	EITRC1
CCC	CONVERGENCE IS ATTAINED.	EITRC1
110	CONTINUE	EITRC1
	WRITE(6,6010) IT,NB,I,J,EMAX	EITRC1
C		EITRC1
130	RETURN	EITRC1
6000	FORMAT(40H0 * FAILURE TO CONVERGE IN EITRC1, IT=,I3,5H NB=,I1,	EITRC1
1	4H I=,I2,4H J=,I1, 7H EMAX=,1PE11.4)	EITRC1
6010	FORMAT(40H0 * SUCCESS TO CONVERGE IN EITRC1, IT=,I3,5H NB=,I1,	EITRC1
1	4H I=,I2,4H J=,I1,7H EMAX=,1PE11.4)	EITRC1
9000	FORMAT(5X,A5,1P10E12.4/(10X,10E12.4))	EITRC1
	END	EITRC1

C	CHECK THE CONVERGENCE OF CHEMICAL EQUIL. IN STAGE	EITRC2
	EMAX=0.	EITRC2
	DO 70 J=1,NC	EITRC2
	E=0.	EITRC2
	IF(XNEW(J).GT.CLOW) E=ABS(XNEW(J)-XOLD(J))/XNEW(J)	EITRC2
	IF(E.LE.EMAX) GOTO 70	EITRC2
	EMAX=E	EITRC2
70	CONTINUE	EITRC2
	IF(EMAX.LT.EPS) GOTO 90	EITRC2
	IF(IIT.GE.15) GOTO 90	EITRC2
	DO 80 J=1,NC	EITRC2
	T=XNEW(J)	EITRC2
	XNEW(J)=(XOLD(J)+T)*0.5	EITRC2
	XOLD(J)=T	EITRC2
80	CONTINUE	EITRC2
	GOTO 40	EITRC2
C		EITRC2
90	CONTINUE	EITRC2
	CALL MEMOVE(XNEW,XM(1,I),NC)	EITRC2
	DO 120 J=1,NC	EITRC2
	CALL OBCGFX(NB,I,J,XNEW,DUMMY,D(1,I))	EITRC2
	IF(NP(J)) 100,110,110	EITRC2
100	IF(NP(J).EQ.-2) YM(J,I)=C1(J,I)*D(J,I)*XNEW(J)+C2(J,I)	EITRC2
1	*YM(J,I-1)+C3(J,I)	EITRC2
1	IF(NP(J).EQ.-1) YM(J,I)=C1(J,I)*D(J,I)*XNEW(J)+C2(J,I)	EITRC2
	*D(J,I)*XM(J,I+1)+C3(J,I)*D(J,I)	EITRC2
	GOTO 120	EITRC2
110	YM(J,I)=D(J,I)*XNEW(J)	EITRC2
120	CONTINUE	EITRC2
130	CONTINUE	EITRC2
C		EITRC2
CCC	CHECK THE CONVERGENCE OF MASS BALANCL IN BANK.	EITRC2
	ICONV=-2	EITRC2
	EMAX=EPSTR(2)	EITRC2
	CALL CONVGC(XM,XP,NS,NC,EMAX,I,J,ICONV,IT,MAXIT)	EITRC2
	IF(ICONV) 140,150,160	EITRC2
140	CONTINUE	EITRC2
	GOTO 10	EITRC2
CCC	FAILURE TO CONVERGE AFTER MAXIMUM ITERATIONS	EITRC2
150	WRITE(6,6000) IT,NB,I,J,EMAX	EITRC2
	GOTO 170	EITRC2
CCC	CONVERGENCE IS ATTAINED.	EITRC2
160	CONTINUE	EITRC2
	WRITE(6,6010) IT,NB,I,J,EMAX	EITRC2
C		EITRC2
170	RETURN	EITRC2
6000	FORMAT(40H0 * FAILURE TO CONVERGE IN EITRC2, IT=,I3,5H NB=,I1,	EITRC2
1	4H I=,I2,4H J=,I1,7H EMAX=,1PE11.4)	EITRC2
6010	FORMAT(40H0 * SUCCESS TO CONVERGE IN EITRC2, IT=,I3,5H NB=,I1,	EITRC2
1	4H I=,I2,4H J=,I1,7H EMAX=,1PE11.4)	EITRC2
9000	FORMAT(5X,A5,1P10E12.4/(10X,10E12.4))	EITRC2
	END	EITRC2

```

SUBROUTINE EXPLOR(X0,X,DX,F0,F,IFAIL,NFUNC)
C
C   EXPLORATORY SEARCH IN PATTERN INVESTIGATION.
C   FIND NEW BASE POINT
C
COMMON/FEEDSR/IDXFD(15) ,FDTBL(21,10,15) ,HLTBL(11,2,50) COM05
COMMON/OGFLOT/TDBNK(101,2),BFOUT(100,2),YFOUT(100,8,2),ISOFL(2) COM05
COMMON W(50) ,B(50) ,WAV(50) ,BAV(50) COM08
1,WP(50) ,BP(50) ,WFAV(50) ,BFAV(50) ,XM(8,50) COM08
2,YM(8,50) ,XS(8,50) ,YS(8,50) ,XFAV(8,50) ,YFAV(8,50) COM08
3,XINP(8,50) ,XMP(8,50) ,YMP(8,50) ,XSP(8,50) ,YSP(8,50) COM08
COMMON/OPTIMZ/IFOPT ,JPR ,JFP ,ETA COM11
1,DFR ,IFLWN(5) ,FLWUP(5) ,FLWLW(5) ,DTFLW(5) COM11
2,FDJPR ,FDJFP ,WFR1 ,WFR2 ,NSS COM11
3,IFSPC(5) COM11
DIMENSION X0(5),X(5),DX(5)
EQUIVALENCE (WFR1,R1),(WFR2,R2),(NSS,NS)
C
C-----
C
FB=F0
CALL MEMOVE(X0,X,IFOPT)
IFAIL=-1
C
CCC BEGIN VARIABLE LOOP FOR EXPLORATORY
DO 50 I=1,IFOPT
M=IFLWN(I)
J=IFSPC(I)
X(I)=X0(I)+DX(I)
IF(X(I).GT.FLWUP(I)) GOTO 25
INCR I=1
CCC CALCULATE FUNCTION VALUE
20 CONTINUE
FDTBL(1,J,M)=X(I)
C CALC. CONCENTRATION PROFILE
CALL IFLOWS
CALL STEADY
NFUNC=NFUNC+1
E=B(NS)*YS(JPR,NS)/FDJPR
D=W(1)*XS(JFP,1)/FDJFP
IF(E.GE.ETA.AND.D.GE.DFR) GOTO 60
F=R1*(ETA-E)**2+R1*(DFR-D)**2
C CHECK THE DIRECTION OF MOVE
IF(F.LT.FB) GOTO 40
IF(INCRT.LT.0) GOTO 3J
25 CONTINUE
X(I)=X0(I)-DX(I)
IF(X(I).LT.FLWLW(I)) GOTO 30
INCR I=-1
GOTO 20
30 CONTINUE
X(I)=X0(I)
F=FB
FDTBL(1,J,M)=X(I)
GOTO 50
C
C-----
40 CCNTINUE
FB=F

```

	IFAIL=0	EXPLOR
50	CONTINUE	EXPLOR
C	END OF LOOP	EXPLOR
	GOTO 70	EXPLOR
CCC	RECOVERY RATIO AND D.F. HAVE SATISFIELD THE REQUIREMENT, SO THERE	EXPLOR
C	IS NO NEED OF OPTIMIZATION.....	EXPLOR
60	CONTINUE	EXPLOR
	IFAIL=1	EXPLOR
70	CONTINUE	EXPLOR
	RETURN	EXPLOR
	END	EXPLOR

```

SUBROUTINE HANRCT(NRC,X,H,K)
C
C   HANRCT PROVIDES REACTION RATE CONST. OF PU-REDUCTION REACTION
C   WITH HYDRAZINE-STABILIZED HYDROXYAMINE NITRATE
C
COMMON/SOLUTE/NCOMP      ,ICOMP      ,NDCAL(3)  ,CNAME(8)
1,UNIT(11)  ,CNVSN(11)
REAL K
DIMENSION X(8)
DATA ALOW,CLOW/1.0E-6,1.0E-20/
C
K=0.
N=IABS(NRC)
GOTO (10,20,70,80) N
C
C----- REACTION-1      2*NH3OH+2*PU(IV) = 2*PU(III)+N2+2*H2O+4*H
10 CONTINUE
IF(X(1).LT.ALLOW)          GOTO 90
IF(X(3).LT.CLOW.OR.X(5).LT.CLOW) GOTO 90
TNM=X(1)+2.*X(2)+4.*X(3)+3.*X(4)+X(5)+X(7)
K=(1.+4.3*TNM)**2*X(1)**4
K=390.*X(5)**2/K
K=K*H
GOTO 90
C
C----- REACTION-2      2*PU(III)+3*H+N2O3 = 2*PU(IV)+HNO2+H2O
20 CONTINUE
IF(NCOMP.LT.6)            GOTO 90
IF(NRC.LT.0)              GOTO 60
IF(X(1).LT.ALLOW.OR.X(4).LT.CLOW) GOTO 90
IF(X(6).GT.1.E-4)        GOTO 30
K=0.306*X(1)**1.8
GOTO 50
30 IF(X(6).GT.2.3E-2)      GOTO 40
AH=ALOG10(X(1))
K=60.*X(6)**(0.44-AH)/(10.**((1.3*AH+0.54)))
GOTO 50
40 K=3.3
50 K=K*H
GOTO 90
60 IF(X(1).LT.ALLOW.OR.X(5).LT.CLOW) GOTO 90
K=9.*X(6)*X(1)**3.1
GOTO 50
C
C----- REACTION-3      N2H5+HNO2 = HN3+2*H2O+H
70 CONTINUE
K=2.22E6*X(1)*X(7)*X(6)
K=K*H
GOTO 90
C
C----- REACTION-4      NH3OH+HNO2 = N2O+H+2*H2O
80 CONTINUE
K=1.92E4*X(1)*X(5)*X(6)
K=K*H
90 CONTINUE
RETURN
END

```

```
-----  
SUBROUTINE HEADWR  
C  
C PRINT HEAD TITLE  
C  
COMMON/TITLE/LINE,TIT(8),DAY,NPAGE  
C  
-----  
NPAGE=NPAGE+1  
LINE=60  
WRITE(6,1000) TIT,DAY,NPAGE  
1000 FORMAT(1H1,9X,8A10,5X,A10,5X,4HPAGE,I6)  
RETURN  
-----  
END  
-----
```

HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR
HEADWR


```

SUBROUTINE IFLWS(NF)
C
C      *PURPOSE
C      TO CALCULATE INITIAL FLOW RATES AND PHASE VOLUMES
C      IFLWS IS CALLED AT THE BEGINNING OF TIME STEP LOOP
C
COMMON/SOLUTE/NCOMP      ,ICOMP      ,NDCAL(3)      ,CNAME(8)
1,UNIT(11)      ,CNVSN(11)
COMMON/STAGES/NBNKS      ,NSTGS(3)      ,NFRST(3)      ,LEVEL(50)
1,IAQFD(50)      ,IOGFD(50)      ,HM(50)      ,HS(50)      ,HMA(50)
2,HMO(50)      ,HMAV(50)      ,HMOV(50)      ,HSA(50)      ,HSO(50)
3,HSAP(50)      ,HSOP(50)      ,HL(50)      ,HLP(50)      ,HPQL(50)
COMMON/FEEDSR/IDXFD(15)      ,FDTBL(21,10,15)      ,HLTJL(11,2,50)
COMMON/OGFLOT/TOBNK(101,2),BFOUT(100,2),YFOUT(100,8,2),ISOFL(2)
COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3),IFLOW      ,INCON      ,TFINL
1,CPLIM      ,TAU(3)      ,PRTIM(100)      ,IPCPT(100)      ,NPLOT(10)
COMMON      ,W(50)      ,B(50)      ,WAV(50)      ,BAV(50)
1,WP(50)      ,BP(50)      ,WFAV(50)      ,BFAV(50)      ,XM(8,50)
2,YM(8,50)      ,XS(8,50)      ,YS(8,50)      ,XFAV(8,50)      ,YFAV(8,50)
3,XINP(8,50)      ,XMP(8,50)      ,YMP(8,50)      ,XSP(8,50)      ,YSP(8,50)
-----
C
C      JF=0
C      DO 20 N=1,NBNKS
C      NS=NSTGS(N)
C      IF=NFRST(N)
C
C      DO 10 K=1,NS
C      I=NS+IF-K
C      J=IF+K-1
C      WW=0.0
C      M=IAQFD(I)
C      IF(M.LE.0) GOTO 4
C      WW=FDTBL(NF,2,M)
C      WFAV(I)=WW
C      DO 2 JJ=1,NCOMP
C      XFAV(JJ,I)=FDTBL(NF,JJ+2,M)*WW
2 CONTINUE
C      IF(K.GT.1) WW=WW+W(I+1)
C      W(I)=WW
C      QB=0.0
C      M=IOGFD(J)
C      IF(M.LE.0) GOTO 8
C      BB=FDTBL(NF,2,M)
C      BFAV(J)=BB
C      DO 6 JJ=1,NCOMP
C      YFAV(JJ,J)=FDTBL(NF,JJ+2,M)*BB
6 CONTINUE
C      IF(K.GT.1) BB=BB+B(J-1)
C      IF(K.EQ.JF) BB=BB+BI
C      B(J)=BB
10 CONTINUE
-----
C
C      HOLD=1.0E12
C      DO 15 K=1,NS

```

	I=IF+K-1	IFLOWS
	HSA(I)=HS(I)*HL(I)	IFLOWS
	HSO(I)=HS(I)-HSA(I)	IFLOWS
	HMA(I)=(W(I)+WRCL(I))/(W(I)+WRCL(I)+B(I))*HM(I)	IFLOWS
	HMAV(I)=HMA(I)	IFLOWS
	HMO(I)=HM(I)-HMA(I)	IFLOWS
	HMOV(I)=HMO(I)	IFLOWS
C	FIND MINIMUM HOLDUP TIME	IFLOWS
	H=HMA(I)/(W(I)+WRCL(I))	IFLOWS
	IF(H.LT.HOLD) HOLD=H	IFLOWS
15	CONTINUE	IFLOWS
	IF(TAU(N).LE.0.0) TAU(N)=HOLD	IFLOWS
C	CALL MEMOVE(HSA(IF),HSAP(IF),NS)	IFLOWS
	CALL MEMOVE(HSO(IF),HSOP(IF),NS)	IFLOWS
	CALL MEMOVE(W(IF),WP(IF),NS)	IFLOWS
	CALL MEMOVE(B(IF),BP(IF),NS)	IFLOWS
	CALL MEMOVE(W(IF),WAV(IF),NS)	IFLOWS
	CALL MEMOVE(B(IF),BAV(IF),NS)	IFLOWS
	IF(N.EQ.NBANKS) GOTO 20	IFLOWS
	JF=ISOFL(N)	IFLOWS
	BI=B(IF+NS-1)	IFLOWS
C	20 CONTINUE	IFLOWS
C	RETURN	IFLOWS
	END	IFLOWS

45	IF(LINE.LT.1) CALL HEADWR	INPRNT
	LINE=LINE-1	INPRNT
	IF(L.GT.1) GOTO 50	INPRNT
	WRITE(6,1091) M,N,I,PHS,(FDTBL(L,J,1),J=1,NC)	INPRNT
	GOTO 55	INPRNT
50	WRITE(6,1092) (FDTBL(L,J,M),J=1,NC)	INPRNT
55	L=L+1	INPRNT
	IF(FDTBL(L,1,M).GT.0.) GOTO 45	INPRNT
60	IF(M.GE.15) GOTO 65	INPRNT
	M=M+1	INPRNT
	GOTO 25	INPRNT
65	CONTINUE	INPRNT
	NPLOT(4)=1	INPRNT
67	CONTINUE	INPRNT
	IF(IFD.GT.0) GOTO 220	INPRNT
C		INPRNT
	IPECO=0	INPRNT
	IPECT=0	INPRNT
	IB=0	INPRNT
	IPDCT=0	INPRNT
	CALL MEMSET(0,IPTBL,15)	INPRNT
	DO 95 N=1,NBANKS	INPRNT
	DO 95 J=1,NCOMP	INPRNT
	M=IDREF(J,N)	INPRNT
	IF(M.EQ.0) GOTO 95	INPRNT
	IF(M.EQ.100) GOTO 85	INPRNT
	IF(M.EQ.200) GOTO 75	INPRNT
	IF(M.LT.0) GOTO 90	INPRNT
	IB=IB+1	INPRNT
	IPTBL(IB)=M	INPRNT
	GOTO 95	INPRNT
75	IPDCT=1	INPRNT
	GOTO 95	INPRNT
85	IPECT=1	INPRNT
	GOTO 95	INPRNT
90	IPECO=1	INPRNT
95	CONTINUE	INPRNT
C		INPRNT
	IF(IB+IPDCT.EQ.0) GOTO 140	INPRNT
	IF(NPLOT(5).GT.0) GOTO 140	INPRNT
	IF(LINE.LT.4) CALL HEADWR	INPRNT
	LINE=LINE-4	INPRNT
	WRITE(6,1095)	INPRNT
	IF(IPDCT.EQ.0) GOTO 105	INPRNT
	IF(LINE.LT.2) CALL HEADWR	INPRNT
	WRITE(6,1100) (J,J=1,NCOMP)	INPRNT
	LINE=LINE-2	INPRNT
	DO 100 N=1,NBANKS	INPRNT
	IF(LINE.LT.1) CALL HEADWR	INPRNT
	WRITE(6,1102) N,(DBCNT(J,N),J=1,NCOMP)	INPRNT
	LINE=LINE-1	INPRNT
100	CONTINUE	INPRNT
C		INPRNT
105	IF(IB.EQ.0) GOTO 140	INPRNT
	IF(LINE.LT.2) CALL HEADWR	INPRNT
	WRITE(6,1105)	INPRNT
	LINE=LINE-2	INPRNT

	DO 135 I=1,IB	INPRNT
	M=IPTBL(I)	INPRNT
	J=IDBLK(M)	INPRNT
	NN=-DBTBL(21,1,M)	INPRNT
	N1=1	INPRNT
107	N2=N1+9	INPRNT
	IF(N2.GT.NN) N2=NN	INPRNT
	IF(LINE.LT.3) CALL HEADWR	INPRNT
	LINE=LINE-3	INPRNT
	IF(J.EQ.0) GOTO 120	INPRNT
	IF(N1.GT.1) GOTO 110	INPRNT
	WRITE(6,1110) M,J,(DBTBL(N,1,M),N=N1,N2)	INPRNT
	GOTO 115	INPRNT
110	WRITE(6,1115) J,(DBTBL(N,1,M),N=N1,N2)	INPRNT
115	WRITE(6,1120) (DBTBL(N,2,M),N=N1,N2)	INPRNT
	GOTO 130	INPRNT
120	IF(N1.GT.1) GOTO 125	INPRNT
	WRITE(6,1125) M,(N,N=N1,N2)	INPRNT
	GOTO 115	INPRNT
125	WRITE(6,1130) (N,N=N1,N2)	INPRNT
	GOTO 115	INPRNT
130	CONTINUE	INPRNT
	IF(N2.EQ.NN) GOTO 135	INPRNT
	N1=N2+1	INPRNT
	GOTO 107	INPRNT
135	CONTINUE	INPRNT
C		INPRNT
140	IF(IPECT+IPECO.EQ.0) GOTO 165	INPRNT
	IF(NPLOT(6).GT.0) GOTO 167	INPRNT
	IF(LINE.LT.3) CALL HEADWR	INPRNT
	WRITE(6,1135)	INPRNT
	LINE=LINE-3	INPRNT
	IF(IPECT.EQ.0) GOTO 150	INPRNT
	IF(LINE.LT.3) CALL HEADWR	INPRNT
	LINE=LINE-2-NBNKS	INPRNT
	WRITE(6,1140) (J,J=1,NCOMP)	INPRNT
	DO 145 N=1,NBNKS	INPRNT
145	WRITE(6,1102) N,(EQLCT(J,N),J=1,NCOMP)	INPRNT
150	IF(IPECO.EQ.0) GOTO 165	INPRNT
	IF(LINE.LT.2) CALL HEADWR	INPRNT
	WRITE(6,1145)	INPRNT
	LINE=LINE-2	INPRNT
	N1=1	INPRNT
155	N2=N1+1	INPRNT
	IF(LINE.LT.6) CALL HEADWR	INPRNT
	LINE=LINE-6	INPRNT
	WRITE(6,1150) N1,((6H C,J),J=1,4),N2,((6H C,J),J=1,4)	INPRNT
	I=1	INPRNT
	WRITE(6,1155) I,(COEFF(J,I,N1),J=1,4),I,(COEFF(J,I,N2),J=1,4)	INPRNT
	DO 160 I=2,4	INPRNT
160	WRITE(6,1160) I,(COEFF(J,I,N1),J=1,4),I,(COEFF(J,I,N2),J=1,4)	INPRNT
	IF(N2.GE.4) GOTO 165	INPRNT
	N1=N2+1	INPRNT
	IF(COEFF(1,1,N1).EQ.0.0) GOTO 165	INPRNT
	GOTO 155	INPRNT
165	CONTINUE	INPRNT
C		INPRNT

I2=I1+LP-1	INPRNT
WRITE(6,12A0) ISPL(I),LP,LPBANK(L),LPSGL(L),(LPCMP(I),I=I1,I2)	INPRNT
I1=I2+1	INPRNT
210 CONTINUE	INPRNT
220 CONTINUE	INPRNT
C	
1000 FORMAT(T61,15HINPUT DATA LIST/T59,19(1H*))	INPRNT
1005 FORMAT(1H0,4),19HSTAGE SPECIFICATION/5X,19(1H-))	INPRNT
1010 FORMAT(10X,17HNUMBER OF BANKS =,I2,T41,26HNUMBER OF STAGES IN BANK 1 =,3I5)	INPRNT
1015 FORMAT(T28,6HVOLUME,T46,11HFEED STREAM,T63,7HRECYCLE,T76,7HINITIAL 1T86,12HLEVEL HEIGHT,T100,4HBANK/T11,17HBANK STAGE MIXER,T33,7HSEY 2TLER,T48,5HINDEX,T63,9HFLOW RATE,T77,5HLEVEL,T87,5HTABLE,T100,7HLI 3NKAGE)	INPRNT
1016 FORMAT(20X,2A10,2X,7HAQUEOUS,3X,7HORGANIC,3X,A10,T76,6HHEIGHT,T87, 15HINDEX,T100,5HINDEX/T13,1H-,4X,2H--,3X,2(8(1H-),2X),2(7(1H-),3X), 210(1H-),T76,6H-----,T87,5H-----,T100,5H-----)	INPRNT
1020 FORMAT(I13,I6,1X,1P2E10.2,I6,I10,E16.4,0PE7.2,I10,9X,A5)	INPRNT
1025 FORMAT(1H)	INPRNT
1030 FORMAT(1H0,4X,23HCOMPONENT SPECIFICATION/5X,23(1H-))	INPRNT
1035 FORMAT(1H,4X,6HNCOMP=,I2,5X,6HICOMP=,I2,5X,6HNDCAL=,3I3)	INPRNT
1040 FORMAT(1H,19X,13HCOMPONENT NO.,7X,8(I6,6X))	INPRNT
1045 FORMAT(40X,8(A10,2X))	INPRNT
1050 FORMAT(20X,A4,16X,8(A10,2X))	INPRNT
1055 FORMAT(20X,16HCONVERSION RATIO,4X,8(1PE10.3,2X))	INPRNT
1060 FORMAT(20X,2A10,8(I6,6X))	INPRNT
1061 FORMAT(20X,2A10,8(I2,F3.2,7X))	INPRNT
1065 FORMAT(12X,18HBANK --STATUS----	INPRNT
1070 FORMAT(1H+,I14)	INPRNT
1075 FORMAT(1H0,4X,12HFEED STREAMS/ 5X,12(1H-),I51,21HSOLUTE CONCENTRAT 1IONS)	INPRNT
1080 FORMAT(T29,17HTIME FLOW RATE ,8(A10,1X))	INPRNT
1085 FORMAT(7X,21HNO. BANK STAGE PHASE ,A7,8(A10,1X))	INPRNT
1090 FORMAT(7X,A10,A9,1X,A6,9(2X,A9))	INPRNT
1091 FORMAT(I9,I4,I6,2X,A4,F8.3,1P9E11.3)	INPRNT
1092 FORMAT(25X,F8.3,1P9E11.3)	INPRNT
1095 FORMAT(1H0,4X,25HDISTRIBUTION COEFFICIENTS/5X,25(1H-))	INPRNT
1100 FORMAT(I41,9HCOMPONENT/7X,24H** DBCNT(CONSTANT) BANK,8(I6,4X))	INPRNT
1102 FORMAT(20X,I8,2X,1P8E10.2)	INPRNT
1105 FORMAT(7X,15H** DBTBL(TABLE))	INPRNT
1110 FORMAT(1H0,9X, 9HBLOCK NO. ,I2,4X,2HX(,I1,2H) ,1P10E10.2)	INPRNT
1115 FORMAT(1H0,24X,2HX(,I1,2H) ,1P10E10.2)	INPRNT
1120 FORMAT(25X,2HDB,3X,1P10E10.2)	INPRNT
1125 FORMAT(1H0,9X,9HBLOCK NO.,I2,4X,5HSTAGE,10(I6,4X))	INPRNT
1130 FORMAT(1H0,24X,5HSTAGE,10(I6,4X))	INPRNT
1135 FORMAT(1H0,4X,33HMASS ACTION EQUILIBRIUM CONSTANTS/5X,33(1H-))	INPRNT
1140 FORMAT(40X,9HCOMPONENT/8X,23H** EQLCT(CONSTANT), NO.,8(I6,4X))	INPRNT
1145 FORMAT(1H0,7X,38H** COEFFICIENTS OF POLYNOMIAL EQUATION)	INPRNT
1150 FORMAT(1H0,9X,2(3HNO.,I1,6X,4(A6,I1,5X),2X))	INPRNT
1155 FORMAT(10X,2(2X,6HCOMP0.,I1,1X,1P4E12.4,2X))	INPRNT
1160 FORMAT(8X,2(I11,1X,1P4E12.4))	INPRNT
1165 FORMAT(1H0,4X,23HREACTION RATE CONSTANTS/5X,23(1H-))	INPRNT
1170 FORMAT(T41,13HCOMPONENT NO./30X,8(I7,5X))	INPRNT
1175 FORMAT(10X,4HBANK,I2,12H AQ. PHASE - ,1P8E12.4)	INPRNT
1180 FORMAT(16X, ,12H OG. PHASE - ,1P8E12.4)	INPRNT
1185 FORMAT(1H0,4X,18HLEVEL HEIGHT TABLE/5X,18(1H-))	INPRNT
1190 FORMAT(1H0,9X,5HBLOCK, I2,3X,3HT =,10(F7.2,3X))	INPRNT

```

1195 FORMAT(20X,3HH =,10(F7.2,3X)) INPRNT
1200 FORMAT(1H0,4X,12HCONTROL DATA/5X,12(1H-)) INPRNT
1205 FORMAT(1H0,9X,8HTAU(1) =,F8.3,I31,24HTIME STEP SIZE IN BANK 1,T66, INPRNT
1 7HCP LIM =,F5.0,4X,19HCPU TIME LIMIT(SEC) INPRNT
1210 FORMAT(10X,8HTAU(2) =,F8.3,I31,24HTIME STEP SIZE IN BANK 2,T66, INPRNT
1 7HTFINL =,F7.2) INPRNT
1215 FORMAT(10X,8HTAU(3) =,F8.3,I31,24HTIME STEP SIZE IN BANK 3, INPRNT
1T66,*UNIT OF TIME IS*,A10) INPRNT
1220 FORMAT(10X,8HICALC =,I4,* 0/1/2/3/4 : TRANSIENT ONLY/EITRC1/EIT INPRNT
1RC2/STOYR1/STOYR2 (SUCCESSIVE TRANSIENT CALC. IF NEGATIVE* INPRNT
2/10X,8HIFLOW =,I4,* 0/1/2/3 : CONST.FEED IF ZERO, VARIABLE FE INPRNT
3ED IF POSIIVE.* INPRNT
4/10X,8HINCON =,I4,* 0/1/2/3 : ZERO/PREVIOUS PROB./INPUT XM/IN INPRNT
5PUT ALL FOR INITIAL CONCENTRATIONS*) INPRNT
1225 FORMAT(10X,8HCTBP =,F12.6,5X,*TBP VOLUME FRACTION* / INPRNT
1 10X,8HCTBPM =,F12.6,5X,*TBP MOLLARITY(MOL/L)*) INPRNT
1230 FORMAT((10X,5(6HEPSTR(,I2,2H)=,1PE8.2,2X))) INPRNT
1240 FORMAT(1H0,7X,22H* PRINTOUT TIMES = ,10(F7.1,I3)/(30X,10(F7.1, INPRNT
1 I3))) INPRNT
1250 FORMAT(1H0,7X,24H* TRANSIENT PROFILE PLOT,5X,7HM PLOT =,I3) INPRNT
1260 FORMAT(10X,A5,2H =,3X,20I5) INPRNT
1270 FORMAT(1H0,7X,20H* STAGE PROFILE PLOT ) INPRNT
1280 FORMAT(10X,6HTIME =,F6.2,3X,7HLPLOT =,I2,3X,6HBANK =,I2,3X,7HLP SCL INPRNT
1 =,I2,3X,11HCOMPONENT =,4(I2,2X)) INPRNT
1290 FORMAT(1H0,4X,58HINITIAL AQUEOUS CONCENTRATIONS FOR INTERACTIVE CO INPRNT
1MPONENTS / 5X,30(1H- ) INPRNT
1300 FORMAT(5X,1H(,I1,1H, ,I2,1H),1P12E10.2/(11X,12E10.2)) INPRNT
1310 FORMAT(72H0 STAGE EFFICIENCY (J : NEGATIVE FOR ORGANIC, POSIT INPRNT
1IVE FOR AQUEOUS) / 5X,16(1H- ) INPRNT
C INPRNT
END INPRNT

```

CARD NR. SEVERITY DETAILS DIAGNOSIS OF PROBLEM

369 I 31CD 369 FIELD WIDTH OF A CONVERSION DESCRIPTOR SHOULD BE AS LARGE AS THE MINIMUM SPECIFIED FOR THAT DESCRIPTOR.

C	SUBROUTINE INPUTC	INPUTC
C	INPUT ROUTINE OF MIXSET-3 CODE	INPUTC
C	DATA CARDS ARE READ IN FREE FORMAT(DATARD ROUTINE)	INPUTC
C		INPUTC
C		INPUTC
	-----	INPUTC
	COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)	COM01
	1,UNIT(11) ,CNVSN(11)	COM01
	COMMON/STAGES/NBNKS ,NSTGS(3) ,NFRST(3) ,LEVEL(50)	COM02
	1,IAQFD(50) ,IOGFD(50) ,HM(50) ,HS(50) ,HMA(50)	COM02
	2,HMO(50) ,HMAV(50) ,HMOV(50) ,HSA(50) ,HSO(50)	COM02
	3,HSAP(50) ,HSOP(50) ,HL(50) ,HLP(50) ,HRCL(50)	COM02
	-----	COM03
	COMMON/REACTN/IREAC(3) ,JREAC(8,3) ,ARATE(8,3) ,ORATE(8,3)	COM03
	COMMON/TOLERC/EPSTR(10)	COM03
	COMMON/PURXEQ/CTBP ,CTBPM ,NCHRG(8) ,SCHRG(8)	COM04
	1,NE XTC(8) ,SEXTC(8) ,EQLCT(8,3) ,COEFF(4,8,4) ,STRNG(8)	COM04
	COMMON/DBCDEF/IDREF(8,3) ,DBCNT(8,3) ,IDBLK(10) ,DBTBL(21,2,10)	COM04
	COMMON/FEECSR/IDXF(15) ,FDTBL(21,10,15) ,HLTBL(11,2,50)	COM05
	-----	COM05
	COMMON/OGFLOT/TDBNK(10,2) ,BFOUT(100,2) ,YFOUT(100,8,2) ,ISOFL(2)	COM05
	COMMON/EFFICY/IEFFN(8,3) ,EF(8,50)	COM06
	COMMON/CONTRL/ICL ,ICALC(3) ,IFLOW ,INCON ,TFINL	COM07
	1,CPLIM ,TAU(3) ,PRTIM(100) ,IPOPT(100) ,NPLT(10)	COM07
	COMMON ,W(50) ,B(50) ,WAV(50) ,BAV(50)	COM08
	1,WP(50) ,BP(50) ,WFAV(50) ,BFAV(50) ,XM(8,50)	COM08
	2,YM(8,50) ,XS(8,50) ,YS(8,50) ,XFAV(8,50) ,YFAV(8,50)	COM08
	3,XINP(8,50) ,XMP(8,50) ,YMP(8,50) ,XSP(8,50) ,YSP(8,50)	COM08
	COMMON/NPLOTS/MPLT ,MPSTG(20) ,MPFIG(20) ,MPCOM(20)	COM09
	1 ,MPSCL(20) ,MPCNT(23)	COM09
	-----	COM10
	COMMON/SPLOTS/LPNUM ,TSPLT(10) ,LPLOT(10) ,LPBANK(10)	COM10
	1 ,LPSCL(10) ,LPCMP(30) ,LPCNT ,JPCNT	COM10
	-----	COM11
	COMMON/OPTIMZ/TFOPT ,JPR ,JFP ,ETA	COM11
	1,DFR ,IFLWN(5) ,FLWUP(5) ,FLWLW(5) ,DTFLW(5)	COM11
	2,FDJPR ,FDJFP ,WFR1 ,WFR2 ,NSS	COM11
	3,IFSPC(5)	COM11
	COMMON/TITLE/LINE ,TIT(8) ,DAY ,NPAGE	INPUTC
	COMMON ICARD ,IC ,IEROR ,IESRG(2,50) ,KEROR ,KESRG(3,50) ,NEROR ,	INPUTC
	1 NESRG(3,50) ,DATAV(500)	INPUTC
C	-----	INPUTC
	DIMENSION KWTBL(30)	INPUTC
	DATA (KWTBL(I),I=1,24)	INPUTC
	1,SRTITLE,SRSTAGE,SRCONTR,SRCOMPO,SRUNITS,SRCHARG,SRVOLUM,SRHEIGHT	INPUTC
	2,SRLEVEL,SRFEEDS,SRRECYC,SRCOEFF,SRREQUIL,SRVDIST,SRCDIST,SRREACT	INPUTC
	3,SRFFIC,SRPRINT,SRPLOT,SRBEGIN,SRRENDED,SRSPLOT,SROPTIM,SRINITI/	INPUTC
	DATA (KWTBL(I),I=25,30)	INPUTC
	1,SRPSIL,3RTAU ,SRSUPPR,5K ,5R ,5R /	INPUTC
C	-----	INPUTC
C	CALL DATE(DAY)	INPUTC
	CALL MEMSET(I,ICARD,905)	INPUTC
	10 ICARD=ICARD+IC	INPUTC
	CALL DATARD(KEYWD,NDATA,DATAV)	INPUTC
C	-----	INPUTC
	DO 15 J=1,30	INPUTC
	ITEM=J	INPUTC
	IF(KEYWD.EQ.KWTBL(J)) GOTO 20	INPUTC
	15 CONTINUE	INPUTC
C	-----	INPUTC

	KEROR=KEPOR+1	INPUTC
	KESRG(1,KEROR)=KEYWD	INPUTC
	KESRG(2,KEROR)=ICARD+1	INPUTC
	KESRG(3,KEROR)=ICARD+IC	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C	-----	INPUTC
C	20 GOTO (25, 30, 40, 55, 65, 75, 85, 95,105,115,140,150,165,185,210,	INPUTC
	1 220,250,255,280,300,305,310,320,330, 45, 50,340) ITEM	INPUTC
C	TITLE OR COMMENT CARD	INPUTC
C	FIRST CARD BECOMES TITLE	INPUTC
C	25 IF(ICARD.GT.0) GOTO 10	INPUTC
	CALL MEMOVE(DATAV,TIT,8)	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C	STAGE CARD	INPUTC
C	30 NBNKS=DATAV(1)	INPUTC
	IF(NDATA.NE.(2+(NBNKS-1)*2)) GOTO 350	INPUTC
	NSTGS(1)=DATAV(2)	INPUTC
	NST=0	INPUTC
	NFRST(1)=1	INPUTC
	NST=NST+NSTGS(1)	INPUTC
	IF(NDATA-3.LE.0) GOTO 10	INPUTC
	NSTGS(2)=DATAV(3)	INPUTC
	ISOFL(1)=DATAV(4)	INPUTC
	NFRST(2)=NST+1	INPUTC
	NST=NST+NSTGS(2)	INPUTC
	IF(NDATA-5.LE.0) GOTO 10	INPUTC
	NSTGS(3)=DATAV(5)	INPUTC
	ISOFL(2)=DATAV(6)	INPUTC
	NFRST(3)=NST+1	INPUTC
	NST=NST+NSTGS(3)	INPUTC
	NPLOT(1)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C	CONTROL CARD	INPUTC
C	40 ICL =DATAV(1)	INPUTC
	IFLOW=DATAV(2)	INPUTC
	INCON=DATAV(3)	INPUTC
	TFINL=DATAV(4)	INPUTC
	CPLIM=DATAV(5)	INPUTC
	NN=IABS(ICL)	INPUTC
	IBIAS=10**((NBNKS-1)	INPUTC
	ICP=0	INPUTC
	DC 42 N=1,NBNKS	INPUTC
	IC=(NN-ICP)/IBIAS	INPUTC
	ICALC(N)=IC	INPUTC
	ICP=ICP+IC*IBIAS	INPUTC
	IBIAS=IBIAS/10	INPUTC
	M=-(IC-2)	INPUTC
	IF(M.LT.0) CALL MEMSET(M,JREAC(1,N),NCOMP)	INPUTC
	IF(M.LT.0) IREAC(N)=M	INPUTC
C	42 CONTINUE	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
CEPSILON CARD	INPUTC
C	45 NN=NDATA/2	INPUTC

	DO 48 J=1,NN		INPUTC
	N=2*J-1		INPUTC
	I=DATAV(N)		INPUTC
	EPSTR(I)=DATAV(N+1)		INPUTC
	48 CONTINUE		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
CTIME STEP(TAU) CARD		INPUTC
	50 CALL MEMOVE(DATAV,TAU,NBNKS)		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C	COMPONENT CARD		INPUTC
C	55 NCOMP=DATAV(1)		INPUTC
	ICOMP=DATAV(2)		INPUTC
	IF(ICOMP.NE.1) GOTO 56		INPUTC
	CNAME(5)=3HHAN		INPUTC
	CNVSN(5)=3.03E-2		INPUTC
	NCHRG(5)=1		INPUTC
	56 IF(NDATA.EQ.2) GOTO 10		INPUTC
	DO 58 N=1,NBNKS		INPUTC
	58 NOCAL(N)=DATAV(2+N)		INPUTC
	N=NBNKS+3		INPUTC
	IF(NDATA.LT.N) GOTO 10		INPUTC
	I=NDATA-N+1		INPUTC
	CALL MEMOVE(DATAV(N),CNAME,I)		INPUTC
	NPLOT(3)=0		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C	UNITS CARD		INPUTC
C	65 NN=NDATA/2		INPUTC
	IF(NDATA.NE.NN*2) GOTO 350		INPUTC
	DO 70 N=1,NN		INPUTC
	I=2*N-1		INPUTC
	UNIT(N)=DATAV(I)		INPUTC
	70 CNVSN(N)=DATAV(I+1)		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C	CHARGE CARD		INPUTC
C	75 CONTINUE		INPUTC
	CTBP =DATAV(1)		INPUTC
	CTBPM=3.65377394*CTBP		INPUTC
	NDATA=NDATA-1		INPUTC
	IF(NDATA.EQ.0) GOTO 10		INPUTC
	NN=NDATA/2		INPUTC
	DO 80 J=1,NN		INPUTC
	I=J*2		INPUTC
	NCHRG(J)=DATAV(I)		INPUTC
	NEXTC(J)=DATAV(I+1)		INPUTC
	SCHRG(J)=DATAV(I)-NCHRG(J)		INPUTC
	SEXTC(J)=DATAV(I+1)-NEXTC(J)		INPUTC
	80 CONTINUE		INPUTC
	NPLOT(3)=0		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C	VOLUME CARD		INPUTC
C	85 IF(NDATA.NE.2*NST) GOTO 350		INPUTC
	DO 90 N=1,NST		INPUTC
	I=NST+N		INPUTC

	HM(N)=DATAV(N)	INPUTC
90	HS(N)=DATAV(I)	INPUTC
	NPLOT(1)=0	INPUTC
	NPLOT(9)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	HEIGHT CARD	INPUTC
95	IF(NDATA.NE.NST) GOTO 350	INPUTC
	DO 100 N=1,NST	INPUTC
100	HL(N)=DATAV(N)	INPUTC
	NPLOT(1)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	LEVEL CARD	INPUTC
105	NN=NDATA/2	INPUTC
	IF(NN*2-NDATA.NE.0) GOTO 350	INPUTC
	IF(NN-1.GT.10) GOTO 350	INPUTC
	N=DATAV(1)	INPUTC
	I=DATAV(2)	INPUTC
	I=NFRST(N)+I-1	INPUTC
	LEVEL(I)=I	INPUTC
	NN=NN-1	INPUTC
	DO 110 N=1,NN	INPUTC
	J=2*N+1	INPUTC
	HLTBL(N,1,I)=DATAV(J)	INPUTC
110	HLTBL(N,2,I)=DATAV(J+1)	INPUTC
	HLTBL(NN+1,1,I)=-1.0	INPUTC
	HLTBL(11,1,I)=-NN	INPUTC
	NPLOT(8)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	FEEDS CARD	INPUTC
115	NN=(NDATA-3)/(NCOMP+2)	INPUTC
	IF(NN*(NCOMP+2).NE.NDATA-3) GOTO 350	INPUTC
	IF(NN.GT.20) GOTO 350	INPUTC
	IB=DATAV(1)	INPUTC
	N=DATAV(2)	INPUTC
	I=DATAV(3)	INPUTC
	II=NFRST(N)+IABS(I)-1	INPUTC
	IDXFD(IB)=II*(I/IABS(I))	INPUTC
	IF(I) 120,130,125	INPUTC
120	IOGFD(II)=IB	INPUTC
	GOTO 130	INPUTC
125	IAQFD(II)=IB	INPUTC
130	NC=NCOMP+2	INPUTC
	NS=3	INPUTC
	DO 135 N=1,NN	INPUTC
	DO 135 J=1,NC	INPUTC
	NS=NS+1	INPUTC
135	FDTBL(N,J,IB)=DATAV(NS)	INPUTC
	FDTBL(NN+1,1,IB)=-1.0	INPUTC
	NPLOT(4)=0	INPUTC
	FDTBL(21,1,IB)=-1.0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	RECYCLE CARD	INPUTC
140	NN=NDATA/4	INPUTC

	IF(NN*4.NE.NDATA) GOTO 350	INPUTC
	DO 145 N=1,NN	INPUTC
	J=4*(N-1)+1	INPUTC
	NB=DATAV(J)	INPUTC
	I1=DATAV(J+1)	INPUTC
	I2=DATAV(J+2)	INPUTC
	WR=DATAV(J+3)	INPUTC
	I2=I2-I1+1	INPUTC
	I1=NFRST(NB)+I1-1	INPUTC
	CALL MEMSET(WR,WRCL(I1),I2)	INPUTC
145	CONTINUE	INPUTC
	NPLOT(1)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	COEFFICIENT CARD	INPUTC
150	CONTINUE	INPUTC
	NB=DATAV(1)	INPUTC
	J=DATAV(2)	INPUTC
	IB=DATAV(3)	INPUTC
	IDREF(J,NB)=-IABS(IB)	INPUTC
	IF(NDATA.EQ.3) GOTO 10	INPUTC
	MIACV=NOCAL(NB)	INPUTC
	IF(4*MIACV.NE.NDATA-3) GOTO 350	INPUTC
	N=3	INPUTC
	DO 155 J=1,MIACV	INPUTC
	DO 155 K=1,4	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	COEFF(K,J,NB)=DATAV(N)	INPUTC
155	CONTINUE	INPUTC
	NPLOT(6)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	EQUILIBRIUM CARD	INPUTC
165	NB=DATAV(1)	INPUTC
	NN=NDATA-1	INPUTC
	DO 170 J=1,NN	INPUTC
	IDREF(J,NB)=100	INPUTC
170	EQLCT(J,NB)=DATAV(J+1)	INPUTC
	NPLOT(6)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	VDIST CARD	INPUTC
185	IF(NDATA.LT.4) GOTO 350	INPUTC
	IB=DATAV(1)	INPUTC
	NB=DATAV(2)	INPUTC
	J=DATAV(3)	INPUTC
	JR=DATAV(4)	INPUTC
	IDREF(J,NB)=IB	INPUTC
	IF(JR) 10,190,200	INPUTC
190	IDBLK(IB)=0	INPUTC
	NN=NDATA-4	INPUTC
	IF(NN.NE.NSTGS(NB)) GOTO 350	INPUTC
	DO 195 N=1,NN	INPUTC
	DBTBL(N,1,IB)=N	INPUTC
195	DBTBL(N,2,IB)=DATAV(4+N)	INPUTC
	DBTBL(21,1,IB)=-NN	INPUTC
	NPLOT(5)=0	INPUTC

	GOTO 10		INPUTC
200	IDBLK(IB)=R		INPUTC
	N=NDATA-4		INPUTC
	NN=N/2		INPUTC
	IF(NN*2.NE.N) GOTO 350		INPUTC
	IF(NN.GT.20) GOTO 350		INPUTC
	DO 205 N=1,NN		INPUTC
	I=2*N+3		INPUTC
	DBTBL(N,1,IB)=DATAV(I)		INPUTC
205	DBTBL(N,2,IB)=DATAV(I+1)		INPUTC
	DBTBL(NN+1,1,IB)=-1.0		INPUTC
	DBTBL(2,1,IB)=-NN		INPUTC
	NPLOT(5)=0		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C			INPUTC
C	CDIST CARD		INPUTC
210	NN=NDATA/3		INPUTC
	IF(NN*3.NE.NDATA) GOTO 350		INPUTC
	DO 215 N=1,NN		INPUTC
	I=3*N		INPUTC
	NB=DATAV(I-2)		INPUTC
	J=DATAV(I-1)		INPUTC
	IDREF(J,NB)=200		INPUTC
215	DBCNI(J,NB)=DATAV(I)		INPUTC
	NPLOT(5)=0		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C			INPUTC
C	REACTION CARD		INPUTC
220	IF(NDATA.GT.2)	GOTO 225	INPUTC
	NB=DATAV(1)		INPUTC
	NR=-DATAV(2)		INPUTC
	CALL MEMSET(NR,JREAC(1,NB),NCOMP)		INPUTC
	IREAC(NB)=NR		INPUTC
	GOTO 245		INPUTC
225	NN=NDATA/5	GOTO 350	INPUTC
	IF(NN*5.NE.NDATA)		INPUTC
	DO 240 N=1,NN		INPUTC
	I=5*N		INPUTC
	NB=DATAV(I-4)		INPUTC
	J=DATAV(I-3)		INPUTC
	K=DATAV(I-2)		INPUTC
	IF(K.LE.0) K=J		INPUTC
	JREAC(J,NB)=K		INPUTC
	ARATE(J,NB)=DATAV(I-1)		INPUTC
	ORATE(J,NB)=DATAV(I)		INPUTC
	IREAC(NB)=IREAC(NB)+1		INPUTC
240	CONTINUE		INPUTC
245	CONTINUE		INPUTC
	NPLOT(7)=0		INPUTC
	GOTO 10		INPUTC
C			INPUTC
C	EFFICIENCY CARD		INPUTC
250	CONTINUE		INPUTC
	NB=DATAV(1)		INPUTC
	L=NFRST(NB)-1		INPUTC
	JJ=DATAV(2)		INPUTC
	J=IABS(JJ)		INPUTC

	IEFFN(J,NB)=JJ	INPUTC
	NN=NDATA-2	INPUTC
	DO 252 I=1,NN	INPUTC
252	EF(J,L+I)=DATAV(I+2)	INPUTC
	MPL0T(1)=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	PRINT CARD	INPUTC
255	NN=NDATA/2	INPUTC
	IF(NN*2.NE.NDATA) GOTO 350	INPUTC
	CALL MEMSET(0,PRTIM,200)	INPUTC
	IF(NDATA.LE.0) GOTO 10	INPUTC
	IT=1	INPUTC
	PRTIM(1)=0.0	INPUTC
	DO 265 N=1,NN	INPUTC
	J=2*N	INPUTC
	T=DATAV(J-1)	INPUTC
	I=DATAV(J)	INPUTC
	IP=1	INPUTC
	IF(I.LT.0) IP=-1	INPUTC
	IF(I.LT.0) I=-I	INPUTC
	DT=(T-PRTIM(IT))/I	INPUTC
	T=PRTIM(IT)	INPUTC
	DO 260 M=1,I	INPUTC
	IT=IT+1	INPUTC
	T=T+DT	INPUTC
	IPOPT(IT)=IP	INPUTC
260	PRTIM(IT)=T	INPUTC
265	CONTINUE	INPUTC
	IF(IT.GT.50) GOTO 350	INPUTC
	MPL0T(2)=IT	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	PLOTS CARD	INPUTC
280	CONTINUE	INPUTC
	NN=NDATA/5	INPUTC
	CALL MEMSET(0,MPL0T,104)	INPUTC
	IF(NDATA.LE.0) GOTO 10	INPUTC
	MPL0T=NN	INPUTC
	DO 290 N=1,NN	INPUTC
	I=(N-1)*5+1	INPUTC
	NB=DATAV(I)	INPUTC
	NS=DATAV(I+1)	INPUTC
	MPCOM(N)=DATAV(I+2)	INPUTC
	MFIG(N)=DATAV(I+3)	INPUTC
	MPSCL(N)=DATAV(I+4)	INPUTC
	M=IABS(NS)	INPUTC
	K=NFRST(NB)+M-1	INPUTC
	MPSTG(N)=K*NS/M	INPUTC
290	CONTINUE	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	BEGIN CARD	INPUTC
300	CONTINUE	INPUTC
	RETURN	INPUTC
C		INPUTC
C	ENDEO CARD	INPUTC

	305 CONTINUE	INPUTC
	STOP	INPUTC
C	310 CONTINUE	INPUTC
C	SPLIT CARD STAGE PROFILE	INPUTC
	CALL MEMSET(Q,LPNUM,73)	INPUTC
	IF(NDATA.LE.0) GOTO 10	INPUTC
	N=0	INPUTC
	L=0	INPUTC
	312 LPNUM=LPNUM+1	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	TSPLIT(LPNUM)=DATAV(N)	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	LP=DATAV(N)	INPUTC
	LPLIT(LPNUM)=LP	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	LPBANK(LPNUM)=DATAV(N)	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	LPSCL(LPNUM)=DATAV(N)	INPUTC
	DO 314 I=1,LP	INPUTC
	L=L+1	INPUTC
	N=N+1	INPUTC
	LPCMP(L)=DATAV(N)	INPUTC
	314 CONTINUE	INPUTC
	IF(N.LT.NDATA) GOTO 312	INPUTC
	JPCNT=0	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
	320 CONTINUE	INPUTC
C	OPTIMIZATION CARDS	INPUTC
	JPR=DATAV(1)	INPUTC
	JFP=DATAV(2)	INPUTC
	ETA=DATAV(3)	INPUTC
	DFR=DATAV(4)	INPUTC
	WFR1=DATAV(5)	INPUTC
	WFR2=DATAV(6)	INPUTC
	IFOPT=(NDATA-6)/5	INPUTC
	IF(IFOPT*5+6.NE.NDATA) GOTO 350	INPUTC
	N=6	INPUTC
	DO 325 I=1,IFOPT	INPUTC
	IFLWN(I)=DATAV(N+1)	INPUTC
	IFSPC(I)=DATAV(N+2)+2	INPUTC
	FLWUP(I)=DATAV(N+3)	INPUTC
	FLWLW(I)=DATAV(N+4)	INPUTC
	DTFLW(I)=DATAV(N+5)	INPUTC
	N=N+5	INPUTC
	325 CONTINUE	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
	330 CONTINUE	INPUTC
CCCINITIAL PROFILE CARD	INPUTC
	NB=DATAV(1)	INPUTC
	J =DATAV(2)	INPUTC
	K =DATAV(3)	INPUTC
	NS=NSTGS(NB)	INPUTC
	L =NFRST(NB)-1	INPUTC
	DO 335 I=1,NS	INPUTC
	GOTO (331,332,333,334) K	INPUTC
	331 XM(J,L+I)=DATAV(I+3)	INPUTC

	XINP(J,L+I)=DATAV(I+3)	INPUTC
	INCON=2	INPUTC
	GOTO 335	INPUTC
332	YM(J,L+I)=DATAV(I+3)	INPUTC
	INCON=3	INPUTC
	GOTO 335	INPUTC
333	XS(J,L+I)=DATAV(I+3)	INPUTC
	GOTO 335	INPUTC
334	YS(J,L+I)=DATAV(I+3)	INPUTC
335	CONTINUE	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
CSUPPRESS INPUT DATA LIST	INPUTC
340	LINE=-100	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C	ERROR PROCESSING UNMATCHED NUMBER OF DATA INPUTS	INPUTC
350	NEROR=NEROR+1	INPUTC
	NESRG(1,NEROR)=KEYWD	INPUTC
	NESRG(2,NEROR)=ICARD+1	INPUTC
	NESRG(3,NEROR)=ICARD+IC	INPUTC
	GOTO 10	INPUTC
C		INPUTC
C		INPUTC
	END	INPUTC

	SUBROUTINE ONEPRT(N,NN,NOPT,NS,NCOMP,XM,CNVSN,CNAME1,UNIT1)	ONEPRT
C	DIMENSION XM(8,1),CNVSN(1),CNAME1(1),UNIT1(1),P(10)	ONEPRT
	DATA BAR/9H-----/	ONEPRT
C	-----/	ONEPRT
	1000 FORMAT(1H ,8X,10HBANK STAGE,2X,10(A10,1X))	ONEPRT
	1020 FORMAT(1H ,8X,10H-----,10(2X,A9))	ONEPRT
	1010 FORMAT(1H ,20X,10(A10,1X,))	ONEPRT
	1030 FORMAT(1H ,I11,I6,1X,1P10E11.3)	ONEPRT
C	-----/	ONEPRT
C	-----/	ONEPRT
	NC=NCOMP+NOPT	ONEPRT
	WRITE(6,1000) (CNAME1(K),K=1,NC)	ONEPRT
	WRITE(6,1010) (UNIT1(K),K=1,NC)	ONEPRT
	WRITE(6,1020) (BAR,K=1,NC)	ONEPRT
	DO 30 M=1,NS	ONEPRT
	I=NN+M	ONEPRT
	DO 10 J=1,NCOMP	ONEPRT
	P(J)=XM(J,I)	ONEPRT
	P(J)=P(J)/CNVSN(J)	ONEPRT
10	CONTINUE	ONEPRT
	IF(NOPT.EQ.0) GO TO 20	ONEPRT
	P(NCOMP+1)=P(3)+P(4)	ONEPRT
	IF(NOPT.NE.2) GO TO 20	ONEPRT
	P(NCOMP+2)=P(2)+P(5)	ONEPRT
20	WRITE(6,1030) N,M,(P(J),J=1,NC)	ONEPRT
30	CONTINUE	ONEPRT
C	RETURN	ONEPRT
	END	ONEPRT

	SUBROUTINE PATTRN					PATTRN
C	PATTERN INVESTIGATION ROUTINE FOR FINDING THE OPTIMAL FEED FLOWS					PATTRN
C	METHOD IS BASED ON *HOOHE-JEEVES* IN BOOK OF KOWALIK AND OSBORNE.					PATTRN
C	COMMON/SOLUTE/NCOMP	,ICOMP	,NDCAL(3)	,CNAME(8)	COMO1	
	1,UNIT(11)	,CNVSN(11)			COMO1	
	COMMON/STAGES/NBNKS	,NSTGS(3)	,NFRST(3)	,LEVEL(50)	COMO2	
	1,IAQFD(50)	,IOGFD(50)	,HM(50)	,HS(50)	,HMA(50)	COMO2
	2,HMO(50)	,HMAV(50)	,HMOV(50)	,HSA(50)	,HSO(50)	COMO2
	3,HSAP(50)	,HSOP(50)	,HL(50)	,HLP(50)	,HRCL(50)	COMO2
	COMMON/FEEDSR/IDXF(15)	,FDTBL(21,10,15)		,HLTBL(11,2,50)	COMO5	
	COMMON/OGFLOT/TDBNK(101,2)	,BFOUT(100,2)	,YFOUT(100,8,2)	,ISOFL(2)	COMO5	
	COMMON	,W(50)	,B(50)	,HAV(50)	,BAV(50)	COMO8
	1,WP(50)	,BP(50)	,WFAV(50)	,BFAV(50)	,XM(8,50)	COMO8
	2,YM(8,50)	,XS(8,50)	,YS(8,50)	,XFAV(8,50)	,YFAV(8,50)	COMO8
	3,XINP(8,50)	,XMP(8,50)	,YMP(8,50)	,XSP(8,50)	,YSP(8,50)	COMO8
	COMMON/OPTIMZ/IFOPT	,JPR	,JFP	,ETA	COM11	
	1,DFR	,IFLWN(5)	,FLWUP(5)	,FLWLW(5)	,DTFLW(5)	COM11
	2,FDJPR	,FDJFP	,WFR1	,WFR2	,NSS	COM11
	3,IFSPC(5)				COM11	
	COMMON/TITLE /LINE				PATTRN	
C	EQUIVALENCE (WFR1,R1),(WFR2,R2),(NSS,NS)					PATTRN
	DIMENSION	XSB(5)	,XB(5)	,XPB(5)	,XMOVE(5)	PATTRN
	1	,XTRY(5)	,DLX(5)			PATTRN
C	-----					PATTRN
C	-----					PATTRN
CCC	INITIAL DATA SETTING					PATTRN
C	-----					PATTRN
	NBTMP=NBNKS					PATTRN
	NBNKS=1					PATTRN
	NS=NSTGS(1)					PATTRN
	IHALF=0					PATTRN
	NFUNC=0					PATTRN
	MXHLF=5					PATTRN
	DATA WFR1,WFR2/0.5,0.5/					PATTRN
	CALL MEMSET(0,XSB,30)					PATTRN
	DO 10 I=1,IFOPT					PATTRN
	M=IFLWN(I)					PATTRN
	J=IFSPC(I)					PATTRN
	XSB(I)=FDTBL(1,J,M)					PATTRN
	XPB(I)=XSB(I)					PATTRN
	DLX(I)=DTFLW(I)					PATTRN
	FDTBL(21,1,M)=-1.0					PATTRN
	10 CONTINUE					PATTRN
C	SUM FEEDS FOR COMPONENTS JPR AND JFP					PATTRN
	FDJPR=0.					PATTRN
	FDJFP=0.					PATTRN
	NS=NSTGS(1)					PATTRN
	J1=JPR+2					PATTRN
	J2=JFP+2					PATTRN
	DO 30 I=1,NS					PATTRN
	M=IAQFD(I)					PATTRN
	IF(M.LE.0) GOTO 20					PATTRN
	FDJPR=FDJPR+FDTBL(1,2,M)*FDTBL(1,J1,M)					PATTRN
	FDJFP=FDJFP+FDTBL(1,2,M)*FDTBL(1,J2,M)					PATTRN

20	CONTINUE		PATRN
	M=IOGFD(I)		PATRN
	IF(M.LE.D)	GOTO 30	PATRN
	FDJPR=FDJPR+FDTBL(1,2,M)*FDTBL(1,J1,M)		PATRN
	FDJFP=FDJFP+FDTBL(1,2,M)*FDTBL(1,J2,M)		PATRN
30	CONTINUE		PATRN
	IGOTO=0		PATRN
35	CONTINUE		PATRN
C	CALC. RECOVERY RATIO AND D.F.		PATRN
	CALL IFLOWS		PATRN
	CALL STEADY		PATRN
	NFUNC=NFUNC+1		PATRN
	E=B(NS)*YS(JPR,NS)/FDJPR		PATRN
	D=W(1)*XS(JFP,1)/FDJFP		PATRN
	IF(E.GE.ETA.AND.D.GE.DFR)	GOTO 120	PATRN
	F=R1*(ETA-E)**2+R2*(DFR-D)**2		PATRN
	IF(IGOTO.GT.0)	GOTO 65	PATRN
	FSB=F		PATRN
	WRITE(6,9000) 5H FSB ,NFUNC,FSB,(XSB(I),I=1,IFOPT)		PATRN
C			PATRN
CCC	FIND NEW BASE POINT:XB FROM XSB BY EXPLORATORY		PATRN
C			PATRN
40	CONTINUE		PATRN
	FPB=FSB		PATRN
	CALL MEMOVE(XSB,XPB,IFOPT)		PATRN
	CALL EXPLOR(XSB,XB,DLX,FSB,FB,IFAIL,NFUNC)		PATRN
	WRITE(6,9000) 5H FB ,NFUNC,FB,(XB(I),I=1,IFOPT)		PATRN
	IF(IFAIL) 90,50,120		PATRN
C			PATRN
CCC	CALCULATE NEW POINT:XMOVE BY PATTERN MOVE		PATRN
C			PATRN
50	CONTINUE		PATRN
	DO 60 I=1,IFOPT		PATRN
	XMOVE(I)=2.*XB(I)-XPB(I)		PATRN
	IF(XMOVE(I).GT.FLWUP(I)) XMOVE(I)=FLWUP(I)		PATRN
	IF(XMOVE(I).LT.FLWLW(I)) XMOVE(I)=FLWLW(I)		PATRN
	M=IFLWN(I)		PATRN
	J=IFSPC(I)		PATRN
	FDTBL(1,J,M)=XMOVE(I)		PATRN
60	CONTINUE		PATRN
	IGOTO=1		PATRN
	GOTO 35		PATRN
65	CONTINUE		PATRN
	FMOVE=F		PATRN
	WRITE(6,9000) 5HFMOVE,NFUNC,FMOVE,(XMOVE(I),I=1,IFOPT)		PATRN
C			PATRN
CCC	FIND TRIAL BASE POINT:XTRY FROM XMOVE BY EXPLORATORY		PATRN
C			PATRN
	CALL EXPLOR(XMOVE,XTRY,DLX,FMOVE,FTRY,IFAIL,NFUNC)		PATRN
	WRITE(6,9000) 5HFTRY ,NFUNC,FTRY,(XTRY(I),I=1,IFOPT)		PATRN
	IF(FTRY.GE.FB)	GOTO 80	PATRN
C	REPEAT INVESTIGATION WITH SAME INCREMENT		PATRN
70	CONTINUE		PATRN
	FPB=FB		PATRN
	FB=FTRY		PATRN
	CALL MEMOVE(XB ,XPB,IFOPT)		PATRN
	CALL MEMOVE(XTRY,XB ,IFOPT)		PATRN

C	GOTO 50	PATTRN
C	RESTART FROM XB AS A NEW STARTING POINT	PATTRN
80	CONTINUE	PATTRN
	FSB=FB	PATTRN
	CALL MEMOVE(XB,XSB,IFOPT)	PATTRN
	IF(NFUNC.GE.50) GOTO 120	PATTRN
	IF(NFUNC.GE.50) GOTO 110	PATTRN
	GOTO 40	PATTRN
C		PATTRN
CCC	REDUCE THE INCREMENT,	PATTRN
90	CONTINUE	PATTRN
	IHALF=IHALF+1	PATTRN
	IF(IHALF.GT.MXHLF) GOTO 110	PATTRN
C	REPEAT INVESTIGATION WITH REDUCED INCREMENT	PATTRN
	DO 100 I=1,IFOPT	PATTRN
	DLX(I)=DLX(I)*0.5	PATTRN
100	CONTINUE	PATTRN
	GOTO 40	PATTRN
C		PATTRN
CCC	THE INCREMENT HAS BECOME SMALLER THAN ALLOWABLE LIMIT	PATTRN
110	CONTINUE	PATTRN
	DO 115 I=1,IFOPT	PATTRN
	M=IFLWN(I)	PATTRN
	J=IFSPC(I)	PATTRN
	FDTBL(1,J,M)=XSB(I)	PATTRN
115	CONTINUE	PATTRN
	GOTO 125	PATTRN
CCC	RECOVERY RATIO AND D.F. HAVE SATISFIED THE REQUIREMENT	PATTRN
120	CONTINUE	PATTRN
	CALL MEMOVE(XB,XSB,IFOPT)	PATTRN
	GOTO 110	PATTRN
125	CONTINUE	PATTRN
	CALL IFLOWS	PATTRN
	CALL STEADY	PATTRN
C	RE-CALCULATE E,D AND F	PATTRN
	E=B(NS)*YS(JPR,NS)/FDJPR	PATTRN
	D=W(1)*XS(JFP,1)/FDJFP	PATTRN
	F=R1*(ETA-E)**2+R2*(DFR-D)**2	PATTRN
C		PATTRN
CCC	PRINT OUT RESULTS	PATTRN
C		PATTRN
	CALL HEADWR	PATTRN
	WRITE(6,1000)	PATTRN
	WRITE(6,1010) IFOPT,JPR,CNAME(JPR),JFP,CNAME(JFP),ETA,DFR	PATTRN
	WRITE(6,1020) (IFLWN(I),I=1,IFOPT)	PATTRN
	WRITE(6,1025) 5HIFSPC,(IFSPC(I),I=1,IFOPT)	PATTRN
	WRITE(6,1030) 5HWIFRC,WIFR1,WIFR2	PATTRN
	WRITE(6,1030) 5HFLWUP,(FLWUP(I),I=1,IFOPT)	PATTRN
	WRITE(6,1030) 5HFLWLW,(FLWLW(I),I=1,IFOPT)	PATTRN
	WRITE(6,1030) 5HDTFLW,(DTFLW(I),I=1,IFOPT)	PATTRN
	WRITE(6,1040) FDJPR,FDJFP	PATTRN
	LINE=LINE-12	PATTRN
	IF(LINE.LT.6) CALL HEADWR	PATTRN
	IF(IFAIL.NE.1) GOTO 130	PATTRN
	WRITE(6,1050)	PATTRN
	LINE=LINE-2	PATTRN
130	CONTINUE	PATTRN

	WRITE(6,1060) E,D,FB	PATRN
	WRITE(6,1070) IHALF,NFUNC	PATRN
	LINE=LINE-8	PATRN
	IF(LINE,LT,3) CALL HEADNR	PATRN
	WRITE(6,1080)	PATRN
	LINE=LINE-3	PATRN
C	PRINT STAGE FLOW AND CONCENTRATION PROFILE	PATRN
	CALL INPRED	PATRN
	CALL PRFLOW(0.0)	PATRN
	CALL PRCONC(0.0)	PATRN
	NBNKS=NBTMP	PATRN
C	RETURN	PATRN
C		PATRN
1000	FORMAT(/T51,22HOPTIMIZATION PROCEDURE/T48,28(1H*))	PATRN
1010	FORMAT(1H0,9X,7HIFOPT =,I2,4X,5HJPR =,I2,1X,A10,3X,5HJFP =,I2,1X, 1A10,3X,5HEYA =,1PE12.4,3X,5HDFR =,E12.4)	PATRN
1020	FORMAT(1H0,9X,40HFEED STREAM NO. TO BE OPTIMIZED, IFLWN =,5(I8,4X) 1)	PATRN
1025	FORMAT(T44,A5,2H =,5(I8,4X))	PATRN
1030	FORMAT(T44,A5,2H =,1P5E12.4)	PATRN
1040	FORMAT(1H0,9X,7HFDJPR =,1PE12.4,23H (SUM OF PRODUCT FEEDS),5X, 17HFDJFP =,E12.4,20H (SUM OF F.P. FEEDS))	PATRN
1050	FORMAT(1H0,9X,*OPTIMIZATION IS TERMINATED BECAUSE FOLLOWING E AND 1D ARE GREATER THAN ETA AND DFR RESPECTIVELY,*)	PATRN
1060	FORMAT(1H0,9X,3HE =,1PE12.4,25H (PRODUCT RECOVERY RATIO),3X,3HD =, 1E12.4,23H (WASTE RECOVERY RATIO),4X,3HF =,E12.4)	PATRN
1070	FORMAT(1H0,9X,7HIALF =,I3,5X,7HNFUNC =,I3)	PATRN
1080	FORMAT(1H0,9X,*FLOW RATE OF FEED STREAMS DETERMINED BY PATTERN INV 1ESTIGATION* / 10X,25(1H-))	PATRN
9000	FORMAT(5X,A5,I5,1P10E12.4)	PATRN
	END	PATRN

C	TFINL=T	PLDATA
	TPDLT=TFINL/100.0	PLDATA
	IP=1	PLDATA
	CALL MEMSET(1,IPL0T,3)	PLDATA
	CALL MEMSET(IPDLT,IPL0T,3)	PLDATA
	NS1=1	PLDATA
	NS2=50	PLDATA
	CALL MEMSET(0,MPCNT,20)	PLDATA
	CALL MEMSET(1,MPCNT(21),3)	PLDATA
	CALL MEMSET(0,PLBUF,2438)	PLDATA
C	GOTO 10	PLDATA
C	END	PLDATA
		PLDATA

```

SUBROUTINE PRCONC(T)
C
C      *PURPOSE
C      TO PRINT OUT CONCENTRATION PROFILE AT TIME = T
C
COMMON/SOLUTE/NCOMP      ,ICOMP      ,NDCAL(3)      ,CNAME(8)
1,UNIT(11)      ,CNVSN(11)
COMMON/REACTN/IREAC(3)      ,JREAC(8,3)      ,ARATE(8,3)      ,ORATE(8,3)
COMMON/TOLERC/EPSTR(10)
COMMON/STAGES/NBKS      ,NSTGS(3)      ,NFRST(3)      ,LEVEL(50)
1,IAQFD(50)      ,IOGFD(50)      ,HM(50)      ,HS(50)      ,HMA(50)
2,HMO(50)      ,HMAV(50)      ,HMOV(50)      ,HSA(50)      ,HSQ(50)
3,HSAP(50)      ,HSOP(50)      ,HL(50)      ,HLP(50)      ,WRCL(50)
COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3),IFLOW      ,INCON      ,TFINL
1,CPLIM      ,TAU(3)      ,PRTIM(100)      ,ILOPT(100)      ,NPLOT(10)
COMMON      ,W(50)      ,B(50)      ,WAV(50)      ,BAV(50)
1,WP(50)      ,BP(50)      ,WFAV(50)      ,BFAV(50)      ,XM(8,50)
2,YM(8,50)      ,XS(8,50)      ,YS(8,50)      ,XFAV(8,50)      ,YFAV(8,50)
3,XINP(8,50)      ,XMP(8,50)      ,YMP(8,50)      ,XSP(8,50)      ,YSP(8,50)
COMMON/TITLE /LINE
DIMENSION UNIT1(10),CNAME1(10)
-----
1000 FORMAT(5X,31HCONCENTRATION PROFILE AT TIME =,F8.2,A10)
1010 FORMAT(1H0,5X,13HAQUEOUS MIXER)
1020 FORMAT(1H0,5X,13HORGANIC MIXER)
1030 FORMAT(1H0,5X,15HAQUEOUS SETTLER)
1040 FORMAT(1H0,5X,15HORGANIC SETTLER)
1050 FORMAT(1H0)
C
C      CALCULATE NUMBER OF LINES REQUIRED
C      IF(IFRST.NE.0) GOTO 15
IFRST=1
NLINE=NSTGS(1)+7
CALL MEMOVE(CNAME,CNAME1,NCOMP)
CALL MEMOVE(UNIT,UNIT1,NCOMP)
UNIT1(NCOMP+1)=5H(G/L)
UNIT1(NCOMP+2)=5H(G/L)
CNAME1(NCOMP+1)=10HTOTAL PU
CNAME1(NCOMP+2)=10HTOTAL U
15 CONTINUE
C
IF(T.EQ.0.) CALL HEADWR
IF(LINE.LT.NLINE) CALL HEADWR
LINE=LINE-2
WRITE(6,1050)
WRITE(6,1000) T,UNIT(9)
C
NN=0
DO 30 N=1,NBKS
NOPT=MAX0(0,-IREAC(N))
NS=NSTGS(N)
MLINE=5+NS
DO 20 I=1,4
IF(LINE.LT.MLINE) CALL HEADWR
LINE=LINE-MLINE
GOTO (12,14,16,18) I
12 WRITE(6,1010)

```

	CALL ONEPRT(N,NN,NOPT,NS,NCOMP,XM,CNVSN,CNAME1,UNIT1)	PRCONC
	GOTO 20	PRCONC
14	WRITE(6,1020)	PRCONC
	CALL ONEPRT(N,NN,NOPT,NS,NCOMP,YM,CNVSN,CNAME1,UNIT1)	PRCONC
	GOTO 20	PRCONC
16	WRITE(6,1030)	PRCONC
	CALL ONEPRT(N,NN,NOPT,NS,NCOMP,XS,CNVSN,CNAME1,UNIT1)	PRCONC
	GOTO 20	PRCONC
18	WRITE(6,1040)	PRCONC
	CALL ONEPRT(N,NN,NOPT,NS,NCOMP,YS,CNVSN,CNAME1,UNIT1)	PRCONC
20	CONTINUE	PRCONC
	NN=NN+NS	PRCONC
30	CONTINUE	PRCONC
C		PRCONC
C		PRCONC
	IF(ICL.GT.0) CALL TWOPRT	PRCONC
C		PRCONC
	RETURN	PRCONC
	END	PRCONC

SUBROUTINE PRFLOW(T)					PRFLOW
C	*PURPOSE				PRFLOW
C	TO PRINT OUT FLOW RATES AND PHASE VOLUMES AT TIME:T				PRFLOW
C					PRFLOW
	COMMON/SOLUTE/NCOMP	,ICOMP	,NOCAL(3)	,CNAME(8)	PRFLOW
	1,UNIT(11)	,CNVSN(11)			COMO1
	COMMON/STAGES/NBNKS	,NSTGS(3)	,NERST(3)	,LEVEL(50)	COMO1
	1,IAQFD(50)	,IOGFD(50)	,HM(50)	,HS(50)	COMO2
	2,HMO(50)	,HMAV(50)	,HMOV(50)	,HSA(50)	COMO2
	3,HSAP(50)	,HSOP(50)	,HL(50)	,HSP(50)	COMO2
	COMMON	,W(50)	,B(50)	,HAY(50)	COMO2
	1,WP(50)	,BP(50)	,WFAV(50)	,BFAV(50)	COMO8
	2,YM(8,50)	,XS(8,50)	,YS(8,50)	,YFAV(8,50)	COMO8
	3,XINP(8,50)	,XMP(8,50)	,YMP(8,50)	,YSP(8,50)	COMO8
	COMMON/TITLE /LINE				PRFLOW
	DIMENSION P(9)				PRFLOW
C	1000 FORMAT(5X,38HFLOW RATES AND PHASE VOLUMES AT TIME =,F8.2,1H:,A10)				PRFLOW
	1005 FORMAT(1H0,T11,30HBANK STAGE VOLUME OF MIXER,A10,T54,17HVOLUME				PRFLOW
	1 OF SETTLER,A10,T89, 9HFLOW RATE,A10,T111,5HPHASE)				PRFLOW
	1010 FORMAT(I20,2(3X,27HTOTAL AQUEOUS ORGANIC),T87,7HAQUEOUS,T99				PRFLOW
	1,7HORGANIC,T111,5HRATIO)				PRFLOW
	1015 FORMAT(10X,A4,1X,A5,6(2X,A8),T86,2(A10,2X),A6)				PRFLOW
	1020 FORMAT(I13,I6,1X,6F10.4,2X,2F12.4,F9.4)				PRFLOW
	1025 FORMAT(1H)				PRFLOW
	DATA BAR/10H-----/				PRFLOW
C					PRFLOW
C	CALL HEADWR				PRFLOW
	WRITE(6,1000) T,UNIT(9)				PRFLOW
	LINE=LINE-5				PRFLOW
	WRITE(6,1005) UNIT(11),UNIT(11),UNIT(10)				PRFLOW
	WRITE(6,1010)				PRFLOW
	WRITE(6,1015) (BAR,I=1,11)				PRFLOW
C					PRFLOW
	R1=CNVSN(11)				PRFLOW
	R2=CNVSN(10)				PRFLOW
C					PRFLOW
	DO 30 N=1,NBNKS				PRFLOW
	NS=NSTGS(N)				PRFLOW
	NP=NFRST(N)-1				PRFLOW
	DO 25 M=1,NS				PRFLOW
	I=NP+M				PRFLOW
	P(1)=HM(I)				PRFLOW
	P(2)=HMA(I)				PRFLOW
	P(3)=HMO(I)				PRFLOW
	P(4)=HS(I)				PRFLOW
	P(5)=HSA(I)				PRFLOW
	P(6)=HSO(I)				PRFLOW
	P(7)=W(I)				PRFLOW
	P(8)=B(I)				PRFLOW
	P(9)=(W(I)+WRCL(I))/B(I)				PRFLOW
	IF(R1.EQ.1.0.OR,R1.LE.0.0) GOTO 15				PRFLOW
	DO 10 J=1,6				PRFLOW
	P(J)=P(J)/R1				PRFLOW
	10 CONTINUE				PRFLOW

```
15 CONTINUE
C
  IF(R2.EQ.1.0.OR.R2.LE.0.0) GOTO 20
  P(7)=P(7)/R2
  P(8)=P(8)/R2
20 CONTINUE
C
  WRITE(6,1020) N,M,P
25 CONTINUE
  LINE=LINE-NS-1
  WRITE(6,1025)
30 CONTINUE
C
  RETURN
  END
```

PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW
PRFLOW

SUBROUTINE REACTN(NPS,X,H,K)		REACTN
C	REACTN PROVIDES CHEMICAL REACTION RATE CONST. AND PRODUCTION	REACTN
C	RATE OF COMP. J FOR GIVEN STAGE CONC. (XM,XS,YM,YS).	REACTN
C	FIVE REACTIONS ARE TREATED, COMPONENTS ARE FIXED AS FOLLOWS,	REACTN
C	J = 1 : NITRIC ACID	REACTN
C	2 : URANYL	REACTN
C	3 : PU(IV)	REACTN
C	4 : PU(III)	REACTN
C	5 : URANOUS	REACTN
C	6 : NIROUS ACID	REACTN
C	7 : HYDRAZINE	REACTN
C	-----	REACTN
	COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)	COMO1
	1,UNIT(11) ,CNVSN(11)	COMO1
	DIMENSION X(8)	REACTN
	REAL K(4)	REACTN
	DATA ALOW,BLOW,CLOW/1.0E-6,1.0E-20,1.0E-20/	REACTN
C	-----	REACTN
C	-----	REACTN
C	-----	REACTN
C	--- REACTION-1 U(IV)+2*PU(IV)+2*H2O = UO2+2*PU(III)+4*H	REACTN
C	-----	REACTN
C	-----	REACTN
	CALL MEMSET(0,K,4)	REACTN
	IF(X(3).LT.BLOW.OR.X(5).LT.BLOW) GOTO 30	REACTN
	IF(X(1).LT.ALLOW) GOTO 30	REACTN
	C=0.	REACTN
	IF(NPS.LT.0) C=390.	REACTN
	IF(NPS.GT.0) C=9000.	REACTN
	K(1)=H*C/(X(1)*X(1))	REACTN
	30 CONTINUE	REACTN
C	-----	REACTN
C	--- REACTION-2 2*PU(III)+3*H+NO3 = 2*PU(IV)+HN02+H2O	REACTN
C	-----	REACTN
C	-----	REACTN
	IF(NCOMP.LT.6) GOTO 130	REACTN
	IF(X(4).LT.BLOW) GOTO 55	REACTN
	IF(NPS.LT.0) GOTO 40	REACTN
	IF(X(6).GT.1.E-4) GOTO 32	REACTN
	R=0.306*X(1)**1.8	REACTN
	GOTO 50	REACTN
	32 IF(X(6).GT.2.3E-2) GOTO 34	REACTN
	AH=ALOG10(X(1))	REACTN
	R=60.*X(6)**(0.44-AH)/(10.**((1.3*AH+0.54)))	REACTN
	GOTO 50	REACTN
	34 R=3.3	REACTN
	GOTO 50	REACTN
	40 IF(X(6).LT.CLOW.OR.X(1).LT.ALLOW) GOTO 55	REACTN
	R=9.*X(1)**3.1*X(6)	REACTN
	50 K(2)=R*H	REACTN
	55 CONTINUE	REACTN
C	-----	REACTN
C	--- REACTION-3 U(IV)+NO3+H2O = UO2+H+HN02	REACTN
C	-----	REACTN
C	-----	REACTN
	R=0.	REACTN

	IF(X(1).LT.ALOW)	GOTO 100	REACTN
	IF(X(5).LT.9LOW.OR.X(6).LT.CLOW)	GOTO 100	REACTN
	IF(NPS.LT.0)	GOTO 70	REACTN
	IF(X(1).GE.0.8)	GOTO 60	REACTN
	R=9.5*X(6)**0.38*X(1)**2.7		REACTN
	GOTO 90		REACTN
60	R=0.78*X(6)**0.38		REACTN
	GOTO 90		REACTN
70	IF(X(1).GT.0.34)	GOTO 80	REACTN
	R=0.96*X(6)**0.49		REACTN
	GOTO 90		REACTN
80	R=2.4*X(1)**0.63*X(6)**0.49		REACTN
90	K(3)=R*H		REACTN
100	CONTINUE		REACTN
C			REACTN
C	--- REACTION-4	2*U(IV)+O2+2*H2O = 2*UO2+4*H	REACTN
C			REACTN
C			REACTN
C			REACTN
130	CONTINUE		REACTN
	IF(X(1).LT.ALOW)	GOTO 160	REACTN
	IF(X(5).LT.9LOW)	GOTO 160	REACTN
	IF(NPS.LT.0)	GOTO 140	REACTN
	R=1.5E-2/X(1)		REACTN
	GOTO 150		REACTN
140	R=0.192/(X(1)**0.86)		REACTN
150	K(4)=R*H		REACTN
160	CONTINUE		REACTN
C			REACTN
	RETURN		REACTN
	END		REACTN

SUBROUTINE REPLAC(NB,DT)					REPLAC
C	*PURPOSE				REPLAC
C	TO REPLACE THE VALUES AT THE END OF PREVIOUS STEP WITH THAT OF				REPLAC
C	CURRENT STEP IN ORDER TO INCREMENT TIME STEP.				REPLAC
C	COMMON/SOLUTE/NCOMP	,ICOMP	,NDCAL(3)	,CNAME(8)	COMO1
	1,UNIT(11)	,CNVSN(11)			COMO1
	COMMON/STAGES/NBNKS	,NSTGS(3)	,NFRST(3)	,LEVEL(50)	COMO2
	1,IAQFD(50)	,IOGFD(50)	,HM(50)	,HS(50)	COMO2
	2,HMO(50)	,HMAV(50)	,HMOV(50)	,HSA(50)	COMO2
	3,HSAP(50)	,HSOP(50)	,HL(50)	,HPL(50)	COMO2
	COMMON/FEE DSR/IDXF(15)	,FDTBL(21,10,15)		,HLTBL(11,2,50)	COMO5
	COMMON/OGFLOT/TDBNK(101,2)	,BFOUT(100,2)	,YFOUT(100,8,2)	,ISOFL(2)	COMO5
	COMMON	W(50)	,B(50)	,WAV(50)	COMO8
	1,WP(50)	,BP(50)	,WFAV(50)	,BFAV(50)	COMO8
	2,YM(8,50)	,XS(8,50)	,YS(8,50)	,XFAV(8,50)	COMO8
	3,XINP(8,50)	,XMP(8,50)	,YMP(8,50)	,YSP(8,50)	COMO8
C					REPLAC
C	NS=NSTGS(NB)				REPLAC
	N=NFRST(NB)				REPLAC
	CALL MEMOVE(HL(N),HLP(N),NS)				REPLAC
	CALL MEMOVE(HSA(N),HSAP(N),NS)				REPLAC
	CALL MEMOVE(HSO(N),HSOP(N),NS)				REPLAC
	CALL MEMOVE(W(N),WP(N),NS)				REPLAC
	CALL MEMOVE(B(N),BP(N),NS)				REPLAC
	N4=NS*8				REPLAC
	N=N-1				REPLAC
	DO 30 K=1,NS				REPLAC
	I=N+K				REPLAC
	DO 30 J=1,NCOMP				REPLAC
	DXM=XM(J,I)-XMP(J,I)				REPLAC
	DYM=YM(J,I)-YMP(J,I)				REPLAC
	DXS=XS(J,I)-XSP(J,I)				REPLAC
	DYS=YS(J,I)-YSP(J,I)				REPLAC
	IF(DXM+XM(J,I).LT.0.) DXM=0.				REPLAC
	IF(DYM+YM(J,I).LT.0.) DYM=0.				REPLAC
	IF(DXS+XS(J,I).LT.0.) DXS=0.				REPLAC
	IF(DYS+YS(J,I).LT.0.) DYS=0.				REPLAC
	XMP(J,I)=DXM/DT				REPLAC
	YMP(J,I)=DYM/DT				REPLAC
	XSP(J,I)=DXS/DT				REPLAC
	YSP(J,I)=DYS/DT				REPLAC
	30 CONTINUE				REPLAC
	L=NB				REPLAC
	IF(L.GE.NBNKS) GOTO 20				REPLAC
	DO 10 I=2,100				REPLAC
	TDBNK(I-1,L)=TDBNK(I,L)				REPLAC
	BFOUT(I-1,L)=BFOUT(I,L)				REPLAC
	DO 10 J=1,8				REPLAC
	YFOUT(I-1,J,L)=YFOUT(I,J,L)				REPLAC
	10 CONTINUE				REPLAC
	TDBNK(100,L)=T				REPLAC
	N=N+NS				REPLAC
	BFOUT(100,L)=B(N)				REPLAC
	DO 15 J=1,8				REPLAC
	YFOUT(100,J,L)=YS(J,N)*B(N)				REPLAC
	15 CONTINUE				REPLAC
C	20 RETURN				REPLAC
	END				REPLAC

	SUBROUTINE SCALE1 (VMAX,PLBUF,NCNT,VLEN)	SCALE1
C		SCALE1
C	PURPOSE	SCALE1
C	TO SCALE PLBUF DATA FOR PLOTTING	SCALE1
C		SCALE1
C	PARAMETER	SCALE1
C	PLBUF DATA ARRAY TO BE SCALED	SCALE1
C	VMAX MAXIMUM VALUE IN PLBUF ARRAY	SCALE1
C	NCNT NUMBER OF DATA	SCALE1
C	VLEN LENGTH OF PLOT AXIS (MM)	SCALE1
C		SCALE1
C	DIMENSION PLBUF(NCNT)	SCALE1
C	-----	SCALE1
C		SCALE1
	AMAX=ABS(VMAX)	SCALE1
	Z=AMAX/10.0	SCALE1
	T=0.01	SCALE1
	DO 10 N=1,4	SCALE1
	T=T*10.0	SCALE1
	IF(T.GE.Z) GOTO 15	SCALE1
	10 CONTINUE	SCALE1
	15 CONTINUE	SCALE1
C		SCALE1
	N=AMAX/T*0.5	SCALE1
	IF(N.GT.2) GOTO 20	SCALE1
	N=N*2	SCALE1
	T=T*0.5	SCALE1
	20 CONTINUE	SCALE1
	TT=N*T+1.0E-10	SCALE1
	IF(TT.LE.AMAX) N=N+1	SCALE1
C		SCALE1
	DU=T	SCALE1
	IF(VMAX.GT.0.0) GOTO 24	SCALE1
	DM=-VMAX	SCALE1
	DW=DU*VLEN/DM	SCALE1
	GOTO 26	SCALE1
	24 CONTINUE	SCALE1
	DM=N*T	SCALE1
	DW=VLEN/N	SCALE1
	26 CONTINUE	SCALE1
	DV=VLEN/DM	SCALE1
	DO 30 I=1,NCNT	SCALE1
	PLBUF(I)=PLBUF(I)*DV	SCALE1
	30 CONTINUE	SCALE1
	PLBUF(NCNT+1)=0.0	SCALE1
	PLBUF(NCNT+2)=1.0	SCALE1
	PLBUF(NCNT+3)=DU	SCALE1
	PLBUF(NCNT+4)=DW	SCALE1
	PLBUF(NCNT+5)=N	SCALE1
C		SCALE1
C		SCALE1
	RETURN	SCALE1
	END	SCALE1

```

SUBROUTINE SDEMXP
C
C SDEMXP SOLVES THE DIFFERENCE EQUATIONS OF MIXING PART
C THE ESTIMATE FOR THE DERIVATIVES IS BASED ON VALUES AT THE END
C OF THE PREVIOUS TIME STEP FOR INPUT STREAM TO STAGE AND AVERAGE
C VALUES OF TIME STEP FOR THE EXIT TERM FROM STAGE
C-----
C 1(NB ,NS ,DT ,W ,A ,WF ,BF ,WRCL,HMA ,HMO ,EF ,XF ,YF
C 2,XM ,YM ,XP ,YP ,XS ,YS )
C
C DIMENSION W(1) ,B(1) ,WF(1) ,BF(1) ,WRCL(1),HMA(1) ,HMO(1)
C 1 ,XM(8,1),YM(8,1),XP(8,1),YP(8,1),XS(8,1),YS(8,1),XF(8,1),YF(8,1)
C 2 ,XTRY(8),YTRY(8),XNEW(8),YNEW(8),B(8) ,FIN(8) ,XIN(8) ,YIN(8)
C 3 ,PKA(8) ,PKO(8) ,AK(8) ,OK(8)
C 4 ,EF(8,1)
C
C COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)
C 1,UNIT(11) ,CNVSN(11)
C-----
C COMMON/REACTN/IREAC(3) ,JREAC(8,3) ,ARATE(8,3) ,ORATE(8,3)
C COMMON/TOLERC/EPSTR(10)
C COMMON/EFFICY/IEFFN(8,3)
C COMMON/ERRORS/IEFOR,ITNOM(21),ITNOS(21)
C COMMON/TITLE /LINE
C EQUIVALENCE (EPSTR(9),EPSLN)
C-----
C DATA MAXIT/20/
C-----
C DT2=DT*0.5
C NRT=IREAC(NB)
C MIACV=NDCAL(NB)
C
C STAGE LOOP BEGINS
C DO 250 I=1,NS
C
C .... PREPARE COEFFICIENTS OF EQUATION
C CALL MOVE(XM(1,I),XNEW,NCOMP)
C CALL MOVE(YM(1,I),YNEW,NCOMP)
C MICRO=0
C IF(MIACV.EQ.0) MICRO=1
C FX=WF(I)+WRCL(I)
C IF(I.LT.NS) FX=FX+W(I+1)
C FY=BF(I)
C IF(I.GT. 1) FY=FY+B(I-1)
C FX=FX*DT2
C FY=FY*DT2
C HA=HMA(I)
C HO=HMO(I)
C-----
C DO 40 J=1,NCOMP
C F=XF(J,I)+YF(J,I)+WRCL(I)*XS(J,I)
C XIN(J)=XF(J,I)/WF(I)
C YIN(J)=YF(J,I)/BF(I)
C IF(I.EQ. 1) GOTO 20
C F=F+B(I-1)*YS(J,I-1)
C YIN(J)=(B(I-1)*YS(J,I-1)+YF(J,I))/(J(I-1)+BF(I))
C IF(I.EQ.NS) GOTO 3J
C 20 F=F+W(I+1)*XS(J,I+1)

```

```

XIN(J)=(W(I+1)*XS(J,I+1)+XF(J,I))/(W(I+1)+WF(I))
30 F=F*DT+(HA-FX)*XNEW(J)+(HO-FY)*YNEW(J)
FIN(J)=F
40 CONTINUE
FX=FX+HA
FY=FY+HO
IF(NRT.NE.0) CALL TREC(NB,I,DT2,XNEW,YNEW,FIN,FIN,HA,HO,PKA,PKO
1 ,AK,OK,NRT,D)
DO 60 J=1,NCOMP
IF(NRT.EQ.0) GOTO 50
FIN(J)=FIN(J)+PKA(J)+PKO(J)-AK(J)*XNEW(J)-OK(J)*YNEW(J)
IF(FIN(J).LT.0.) FIN(J)=0.
GOTO 60
50 IF(IEFFN(J,NB).GE.0) GOTO 60
FIN(J)=FIN(J)+FY*(1.-EF(J,I))*YIN(J)
60 CONTINUE
C
C ..... BEGIN ITERATION RESPECT D AND REACTION
DO 70 J=1,NCOMP
XTRY(J)=XNEW(J)
YTRY(J)=YNEW(J)
XNEW(J)=XTRY(J)+XP(J,I)*DT
YNEW(J)=YTRY(J)+YP(J,I)*DT
XP(J,I)=XTRY(J)
YP(J,I)=YTRY(J)
70 CONTINUE
IT=0
80 IT=IT+1
IF(NRT.NE.0) CALL TREC(NB,I,DT2,XNEW,YNEW,FIN,FIN,HA,HO,PKA,PKO
1 ,AK,OK,NRT,D)
DO 130 J=1,NCOMP
IF(MICRO.EQ.0.AND.J.GT.MIACV) GOTO 130
CALL DBCOFX(NB,I,J,XNEW,YNEW,D)
IF(IEFFN(J,NB)) 90,110,100
C ..... ORGANIC EF.
90 XNEW(J)=FIN(J)/(FX+FY*EF(J,I)*D(J))
GOTO 130
C ..... AQUEOUS EF.
100 R=FIN(J)+FY*(1.-EF(J,I))*D(J)*XIN(J)/EF(J,I)
XNEW(J)=R/(FX+FY*D(J)/EF(J,I))
GOTO 130
C ..... CHEMICAL REACTION
110 CONTINUE
IF(NRT.EQ.0) GOTO 120
FKX=FX+AK(J)
FKY=FY+OK(J)
R=FIN(J)+PKA(J)+PKO(J)
XNEW(J)=R/(FKX+FKY*D(J))
YNEW(J)=XNEW(J)*D(J)
GOTO 130
120 XNEW(J)=FIN(J)/(FX+FY*D(J))
130 CONTINUE
IF(MICRO.EQ.1) GOTO 180
C
C ..... CONVERGENCE CHECK, REFER TO ONLY AQUEOUS PHASE
EMAX=0.
DO 140 J=1,MIACV

```


	SUBROUTINE SDESTP	SDESTP
C		SDESTP
C	SDESTP SOLVES THE DIFFERENCE EQUATIONS OF SETTLING PART	SDESTP
C		SDESTP
	1(NB ,NS ,DT ,WAV ,BAV ,WFAV,BFAV,WRCL,HSA ,HSO ,XM ,YM ,XMP	SDESTP
	2,YMP ,XS ,YS ,XSP ,YSP)	SDESTP
C		SDESTP
	DIMENSION WAV(1) ,BAV(1) ,WFAV(1) ,BFAV(1) ,WRCL(1) ,	SDESTP
	1HSA(1) ,HSO(1) ,XM(8,1) ,YM(8,1) ,	SDESTP
	2XMP(8,1) ,YMP(8,1) ,XS(8,1) ,YS(8,1) ,XSP(8,1) ,YSP(8,1)	SDESTP
	DIMENSION XSN(8),XSO(8),YSN(8),YSO(8),FA (8),FO (8),PA (8),PO (8)	SDESTP
	1 ,AK (8),OK (8)	SDESTP
C		SDESTP
	COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)	SDESTP
	1,UNIT(11) ,CNVSN(11)	COMO1
	COMMON/REACTN/IREAC(3) ,JREAC(8,3) ,ARATE(8,3) ,ORATE(8,3)	COMO3
	COMMON/TOLERC/EPSTR(10)	COMO3
	COMMON/ERRORS/IEROR,ITNOM(21),ITNOS(21)	SDESTP
	COMMON/TITLE /LINE	SDESTP
	EQUIVALENCE (EPSTR(9),EPSLN)	SDESTP
C		SDESTP
C		SDESTP
	NRT=IREAC(NB)	SDESTP
	DT2=DT*0.5	SDESTP
C		SDESTP
C	STAGE LOOP BEGINS	SDESTP
	DO 150 I=1,NS	SDESTP
	HA=HSA(I)	SDESTP
	HO=HSO(I)	SDESTP
	FIX=WFAV(I)+WRCL(I)	SDESTP
	FIY=BFAV(I)	SDESTP
	IF(I.GT. 1) FIY=FIY+BAV(I-1)	SDESTP
	IF(I.LT.NS) FIX=FIX+WAV(I+1)	SDESTP
	FOX=(WAV(I)+WRCL(I))*DT2	SDESTP
	FOY=BAV(I)*DT2	SDESTP
C		SDESTP
	DO 20 J=1,NCOMP	SDESTP
	XSN(J)=XS(J,I)	SDESTP
	YSN(J)=YS(J,I)	SDESTP
	FA(J)=(XM(J,I)+XMP(J,I))*FIX*DT2+(HA-FOX)*XSN(J)	SDESTP
	FO(J)=(YM(J,I)+YMP(J,I))*FIY*DT2+(HO-FOY)*YSN(J)	SDESTP
	20 CONTINUE	SDESTP
	IF(NRT.EQ.0) GOTO 90	SDESTP
	CALL TREACN(NB,I,DT2,XSN,YSN,FA,FO,HA,HO,PA,PO,AK,OK,NRT, 1)	SDESTP
	DO 30 J=1,NCOMP	SDESTP
	FA(J)=FA(J)+PA(J)-AK(J)*XSN(J)	SDESTP
	FO(J)=FO(J)+PO(J)-OK(J)*YSN(J)	SDESTP
	IF(FA(J).LT.0.) FA(J)=0.	SDESTP
	IF(FO(J).LT.0.) FO(J)=0.	SDESTP
	30 CONTINUE	SDESTP
C		SDESTP
C	ITERATION RESPECT CHEMICAL REACTIONS	SDESTP
	IT=0	SDESTP
	DATA ITM,CLOW,ACC/10,1.0E-10,1.0/	SDESTP
	DO 40 J=1,NCOMP	SDESTP
	XSO(J)=XSN(J)	SDESTP
	XSN(J)=XSO(J)+XSP(J,I)*DT	SDESTP

	50 CONTINUE	SPLOTS
C		SPLOTS
C	*** SEARCH MAX. AND MIN. VALUES IN YA ARRAY ***	SPLOTS
	YMAX=0.0	SPLOTS
	YMIN=1.0E+30	SPLOTS
	DO 70 L=1,LP	SPLOTS
	DO 60 I=1,NS	SPLOTS
	YMIN=AMIN1(YMIN,YA(I,L))	SPLOTS
	YMAX=AMAX1(YMAX,YA(I,L))	SPLOTS
	60 CONTINUE	SPLOTS
	70 CONTINUE	SPLOTS
C		SPLOTS
C	IF(JU.LI.0) GOTO 150	SPLOTS
C		SPLOTS
C	*** LOGARITHM PLOT IS SPECIFIED ***	SPLOTS
C		SPLOTS
C	*** FIND OUT EXPONENT VALUES OF YMAX,YMIN ***	SPLOTS
	DO 80 N=1,10	SPLOTS
	NEMAX=N-4	SPLOTS
	V=10.0**NEMAX	SPLOTS
	IF(V.GT.YMAX) GOTO 90	SPLOTS
	80 CONTINUE	SPLOTS
	90 CONTINUE	SPLOTS
	DO 100 N=1,30	SPLOTS
	NEMIN=5-N	SPLOTS
	V=10.0**NEMIN	SPLOTS
	IF(V.LI.YMIN) GOTO 110	SPLOTS
	100 CONTINUE	SPLOTS
	110 CONTINUE	SPLOTS
C		SPLOTS
C	*** NORMALIZE AND SCALE YA ARRAY ***	SPLOTS
	NEXPT=NEMAX-NEMIN	SPLOTS
	YEMAX=NEXPT	SPLOTS
	DV=YLEN/YEMAX	SPLOTS
	DO 130 L=1,LP	SPLOTS
	DO 120 I=1,NS	SPLOTS
	Y=YA(I,L)	SPLOTS
	Y=ALOG10(Y)-NEMIN	SPLOTS
	IF(Y.LI.0.0) Y=0.0	SPLOTS
	YA(I,L)=Y*DV	SPLOTS
	120 CONTINUE	SPLOTS
	130 CONTINUE	SPLOTS
	DWY=DV	SPLOTS
C		SPLOTS
C	*** PLOT LOG. SCALE ORDINATE (CONC. AXIS) ***	SPLOTS
C		SPLOTS
	DRAW FRAME LINES	SPLOTS
	CALL PLOT(-40.,-30.,3)	SPLOTS
	CALL PLOT(170.,-30.,2)	SPLOTS
	CALL PLOT(170.,266.,2)	SPLOTS
	CALL PLOT(-40.,266.,3)	SPLOTS
	CALL PLOT(-40.,-30.,2)	SPLOTS
	X=8.0	SPLOTS
	Y=0.0	SPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)	SPLOTS
	CALL PLOT(X,YLEN,2)	SPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)	SPLOTS

	X1=-10.0	SLOTS
	X2=-5.5	SLOTS
	XP=-1.0	SLOTS
	Y2=3.0	SLOTS
	DO 140 N=NEMIN,NEMAX	SLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)	SLOTS
	CALL PLOT(XP,Y,2)	SLOTS
	FPN=N	SLOTS
	CALL NUMBER(X1,Y,SN,10.0,0.0,-1)	SLOTS
	CALL NUMBER(X2,Y+Y2,SNH,FPN,0.0,-1)	SLOTS
	Y=Y+OHY	SLOTS
140	CONTINUE	SLOTS
	X=X1-2.0	SLOTS
	Y=YLEN*0.5-15.0	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,UNIT(JU),90.0,10)	SLOTS
	GOTO 210	SLOTS
C		SLOTS
C	*** NORMAL SCALE PLOT IS SPECIFIED ***	SLOTS
C		SLOTS
150	CONTINUE	SLOTS
C		SLOTS
C	RESERVED FOR ADDITION IN FUTURE	SLOTS
C		SLOTS
210	CONTINUE	SLOTS
C		SLOTS
C	*** PLOT ABSCISSA (STAGE NUMBER) ***	SLOTS
C		SLOTS
	CALL PLOT(0.0,YLEN,3)	SLOTS
	CALL PLOT(XLEN,YLEN,2)	SLOTS
	CALL PLOT(XLEN,0.0,2)	SLOTS
	CALL PLOT(0.0,0.0,2)	SLOTS
	Y=0.0	SLOTS
	DWX=XLEN1/NS	SLOTS
	Y1=-1.0	SLOTS
	X=5.0	SLOTS
	Y2=-4.0	SLOTS
	DO 220 I=1,NS	SLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)	SLOTS
	CALL PLOT(X,Y1,2)	SLOTS
	FPN=I	SLOTS
	CALL NUMBER(X,Y2,SN,FPN,0.0,-1)	SLOTS
	XA(I)=X	SLOTS
	X=X+DWX	SLOTS
220	CONTINUE	SLOTS
	X=XLEN*0.5-20.0	SLOTS
	Y=-10.0	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,12HSTAGE NUMBER,0.0,12)	SLOTS
C		SLOTS
C	*** PLOT STAGE CONC.-PROFILE LINES ***	SLOTS
C		SLOTS
DO 240	L=1,LP	SLOTS
	J=JP(L)	SLOTS
	X=XA(1)	SLOTS
	Y=YA(1,L)	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,2.0,NSYMB(L),0.0,-1)	SLOTS
DO 230	I=2,NS	SLOTS
	X=XA(I)	SLOTS

	Y=YA(I,L)	SLOTS
	IF(J.LT.0) CALL DASHPI(X,Y,1.0)	SLOTS
	IF(J.GT.0) CALL PLOT (X,Y,2)	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,2.0,NSYMB(L),0.0,-1)	SLOTS
C	230 CONTINUE	SLOTS
C	---	SLOTS
	PRINT LINE IDENTIFICATION	SLOTS
	JJ=IABS(J)	SLOTS
	IF(J.LT.0) PHASE=7HORGANIC	SLOTS
	IF(J.GT.0) PHASE=7HAQUEOUS	SLOTS
	ENCODE(40,3000,LINID) PHASE,CNAME(JJ),UNIT(JJ)	SLOTS
	X=10.0	SLOTS
	Y=YLEN+(LP-1)*5.0+1.0	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y+1.0,2.0,NSYMB(L),0.0,-1)	SLOTS
	CALL SYMBOL(X+3.0,Y,SN,LINID,0.0,40)	SLOTS
C	240 CONTINUE	SLOTS
C	*** PRINT HEAD AND JOB TITLE ***	SLOTS
C		SLOTS
	X=0.0	SLOTS
	Y=YLEN+LP*5.0+2.0	SLOTS
	ENCODE(60,3010,LINID) NB,TP,UNIT(9)	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,60)	SLOTS
	X=-5.0	SLOTS
	Y=-17.0	SLOTS
	CALL MEMOVE(TIT,LINID,5)	SLOTS
	CALL MEMOVE(TIT(9),LINID(6),1)	SLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,60)	SLOTS
C		SLOTS
C	*** END OF ONE FIGURE PLOTTING ***	SLOTS
	LPCNT=LPCNT+1	SLOTS
	CALL PLOT(210.,0.,-3)	SLOTS
	IF(LPCNT.LE.LPNUM) GOTO 10	SLOTS
	CALL PLOT(60.,0.,-3)	SLOTS
	CALL PLOT(0,0,999)	SLOTS
	GOTO 10	SLOTS
C		SLOTS
C		SLOTS
C	250 CONTINUE	SLOTS
C	PLOTTING OF TIME:TP IS COMPLETED	SLOTS
C		SLOTS
	3000 FORMAT(A7,12H PROFILE OF ,2A10,1X)	SLOTS
	3010 FORMAT(29HCONCENTRATION PROFILE IN BANK,I2,8H, TIME =,F7.2,1X,A10)	SLOTS
C		SLOTS
	RETURN	SLOTS
	END	SLOTS

```

SUBROUTINE STDYR1(NB)
C
C      STEADY STATE CALCULATION
C      PU REDUCTION WITH HYDRAZINE-STABILIZED HYDROXYLAMINE NITRATE
C      COMPONENT 1 = NITRIC ACID , COMPONENT 2 = URANIUM(UO2)
C      3 = PULTRONIUM(IV), 4 = PLUTONIUM(III)
C      5 = HAN , 6 = NITROUS ACID
C      7 = HYDRAZINE
C
C      FOUR REACTIONS ARE INCLUDED,
C      1. 2*NH3OH+2*PU(IV) = 2*PU(II)+N2+2*H2O+H*H
C      2. 2*PU(III)+3*H+NO3 = 2*PU(IV)+HN02+H2O
C      3. N2H5+HN02 = HN3+2*H2O+H
C      4. NH3OH+HN02 = N2O+H+2*H2O
C
C-----
COMMON/SOLUTE/NCOMP , ICOMP , NDCAL(3) , CNAME(8)
1,UNIT(11) , CNVSN(11)
COMMON/STAGES/NBNKS , NSTGS(3) , NFRST(3) , LEVEL(50)
1,IAQFD(50) , IOGFD(50) , HM(50) , HS(50) , HMA(50)
2,HMO(50) , HMAV(50) , HMOV(50) , HSA(50) , HSO(50)
3,HSAP(50) , HSOP(50) , HL(50) , HLP(50) , WRCL(50)
COMMON/PURXEQ/CTBP , CTBPM , NCHRG(8) , SCHRG(8)
1,NEXTC(8) , SEXC(8) , EQLCT(8,3) , COEFF(4,8,4) , STRNG(8)
COMMON/OBCOEF/IDREF(8,3) , OBCNT(8,3) , IDBLK(10) , DBTBL(21,2,10)
COMMON/FEEDSR/IDXFD(15) , FDTBL(21,10,15) , HLTJL(11,2,50)
COMMON/OGFLOT/IDBNK(10,2) , BFOUT(100,2) , YFOUT(100,8,2) , ISOFL(2)
COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3) , IFLOW , INCCN , TFINL
1,CPLIM , TAU(3) , PRTIM(100) , IPOPT(100) , NPLOT(10)
COMMON W(50) , B(50) , WAV(50) , BAV(50)
1,WP(50) , BP(50) , WFAV(50) , BFAV(50) , XM(8,50)
2,YM(8,50) , XS(8,50) , YS(8,50) , XFAV(8,50) , YFAV(8,50)
3,XINP(8,50) , XMP(8,50) , YMP(8,50) , XSP(8,50) , YSP(8,50)
COMMON/TOLERC/EPSTP(10)
C-----
COMMON XMN(8),YMN(8),XSN(8),YSN(8),XMO(8),XSO(8),FMX(8),FMR(8)
1 ,D (8),WWR(25),FD(8,25)
REAL K20
C-----
C---- PREPARATIONS FOR ITERATION CALC.
L=NFRST(NB)-1
II=ISOFL(NB-1)
NS=NSTGS(NB)
CALL MEMSET(0,XMN,1000)
DO 20 K=1,NS
I=L+K
WWR(K)=W(I)+WPCL(I)
DO 10 J=1,NCOMP
FD(J,K)=XFAV(J,I)+YFAV(J,I)
IF(NB.LE.1.OR.K.NE.II) GOTO 10
FD(J,K)=FD(J,K)+B(L)*YS(J,I)
10 CONTINUE
20 CONTINUE

```

	NSC=NS*8		STOYR1
	I=L+1		STOYR1
	CALL MEMOVE(XM(1,I),XMP,NSC)		STOYR1
	CALL MEMOVE(YM(1,I),YMP,NSC)		STOYR1
	CALL MEMOVE(XS(1,I),XSP,NSC)		STOYR1
	CALL MEMOVE(YS(1,I),YSP,NSC)		STOYR1
CFIND MAIN FEED STAGE NO: IMAX		STOYR1
	EMAX=0.		STOYR1
	IMAX=0		STOYR1
	DO 40 I=1,NS		STOYR1
	FS=0.		STOYR1
	DO 30 J=1,NCOMP		STOYR1
	30 FS=FS+FD(J,I)		STOYR1
	IF(FS.LT.EMAX) GOTO 40		STOYR1
	EMAX=FS		STOYR1
	IMAX=I		STOYR1
	40 CONTINUE		STOYR1
C			STOYR1
C----	STAGE LOOP ITERATIONS FOR OVER-ALL MASS BALANCE		STOYR1
C			STOYR1
	IT=0		STOYR1
	EPSLN=EPSTR(3)		STOYR1
	EPS=EPSLN*0.5		STOYR1
	MII=EPSTR(7)		STOYR1
	ITM=15		STOYR1
	DATA CLW,ACC/1.0E-10,1.0/		STOYR1
50	CONTINUE		STOYR1
	IT=IT+1		STOYR1
	DO 400 N=1,NS		STOYR1
	IF(IT.EQ.1) GOTO 60		STOYR1
	IF(IT.EQ.2) GOTO 65		STOYR1
	IF(IMAX.EQ.1) GOTO 60		STOYR1
	IF(N.GT.IMAX) GOTO 60		STOYR1
	K=IMAX-N+1		STOYR1
	GOTO 70		STOYR1
60	K=N		STOYR1
	GOTO 70		STOYR1
65	K=NS-N+1		STOYR1
70	I=K+L		STOYR1
C			STOYR1
C			STOYR1
C----	GET CHEMICAL EQUIL. IN ONE STAGE.		STOYR1
	IIT=0		STOYR1
	CALL MEMOVE(XM(1,I),XMN,NCOMP)		STOYR1
	CALL MEMOVE(YM(1,I),YMN,NCOMP)		STOYR1
	CALL MEMOVE(XS(1,I),XSN,NCOMP)		STOYR1
	CALL MEMOVE(YS(1,I),YSN,NCOMP)		STOYR1
	A=WHR(K)		STOYR1
	O=B(I)		STOYR1
	DO 80 J=1,NCOMP		STOYR1
	FMX(J)=FD(J,K)		STOYR1
	IF(K.GT. 1) FMX(J)=FMX(J)+B(I-1)*YS(J,I-1)		STOYR1
	IF(K.LT.NS) FMX(J)=FMX(J)+W(I+1)*XS(J,I+1)		STOYR1
	FMR(J)=FMX(J)		STOYR1
	XSO(J)=XSN(J)		STOYR1
	XMO(J)=XMN(J)		STOYR1
80	CONTINUE		STOYR1

```

IF(IT.GT.2) GOTO 90 STDYR1
IF(INCON.EQ.0.OR.INCON.EQ.2) GOTO 330 STDYR1
90 CONTINUE STDYR1
C STDYR1
IF(WRCL(I).GT.0.) GOTO 120 STDYR1
CCC NO RECYCLE FLOW; MIXER AND SETTLER ARE SOLVED INDEPENDENTLY STDYR1
C STDYR1
CALL CALMR1(XMN,YMN,HMA(I),HMO(I),A,O,FMX,IIT,EPS,NB,K,NCOMP) STDYR1
C STDYR1
DO 100 J=1,NCOMP STDYR1
100 FMX(J)=XMN(J)*A STDYR1
CALL CALSR1(XSN,HSA(I),A,FMX,IIT,EPS,NCOMP) STDYR1
GOTO 170 STDYR1
C STDYR1
CCC AQUEOUS RECYCLE FLOWS EXIST, STDYR1
C MIXER AND SETTLER SHOULD BE SOLVED SIMULTANEOUSLY. STDYR1
120 CONTINUE STDYR1
IIT=0 STDYR1
130 IIT=IIT+1 STDYR1
DO 140 J=1,NCOMP STDYR1
140 FMX(J)=FMR(J)+WRCL(I)*XSN(J) STDYR1
J=-1 STDYR1
CALL RCLMR1(XMN,YMN,HMA(I),HMO(I),A,O,FMX,J,EPS,NB,K,NCOMP) STDYR1
DO 150 J=1,NCOMP STDYR1
150 FMX(J)=XMN(J)*A STDYR1
J=-1 STDYR1
CALL RCLSR1(XSN,HSA(I),A,FMX,J,EPS,NCOMP) STDYR1
C STDYR1
EMAX=0. STDYR1
DO 160 J=1,5 STDYR1
E1=0. STDYR1
E2=0. STDYR1
IF(XMN(J).GT.CLW) E1=ABS(XMN(J)-XMO(J))/XMN(J) STDYR1
IF(XSN(J).GT.CLW) E2=ABS(XSN(J)-XSO(J))/XSN(J) STDYR1
160 CONTINUE STDYR1
IF(EMAX.LT.EPS.OR.IIT.GT.ITM) GOTO 170 STDYR1
CALL MEMOVE(XMN,XMO,5) STDYR1
CALL MEMOVE(XSN,XSO,5) STDYR1
GOTO 130 STDYR1
C STDYR1
CCC AQUEOUS PART OF STAGE IS COMPLETED. STDYR1
170 CONTINUE STDYR1
CALL MEMOVE(XMN,XM(1,I),NCOMP) STDYR1
CALL MEMOVE(YMN,YM(1,I),NCOMP) STDYR1
CALL MEMOVE(XSN,XS(1,I),NCOMP) STDYR1
C STDYR1
C ----- ORGANIC SETTLER'S BALANCE ----- STDYR1
C ONLY REACTION-2 TAKES PLACE. STDYR1
CALL MEMOVE(YMN,YS(1,I),NCOMP) STDYR1
IF(YSN(6).LT.CLW) GOTO 320 STDYR1
M=0 STDYR1
K20=9.*HSO(I)/B(I) STDYR1
R=K20*YSN(4)*YSN(6)*YSN(1)**3.1 STDYR1
310 M=M+1 STDYR1
YSN(1)=YMN(1)-1.5*R STDYR1
YSN(3)=YMN(3)+R STDYR1
YSN(4)=YMN(4)-R STDYR1

```


SUBROUTINE STDYR2(NB)					STDYR2
C	STEADY STATE CALCULATION				STDYR2
C	PU REDUCTION WITH HYDRAZINE STABILIZED URANOUS NITRATE.				STDYR2
C	COMPONENT 1 = NITRIC ACID , COMPONENT 2 = URANYL				STDYR2
C	3 = PLUTONIUM(IV), 4 = PLUTONIUM(III)				STDYR2
C	5 = URANOUS 6 = NIROUS ACID				STDYR2
C	7 = HYDRAZINE				STDYR2
C	-----				STDYR2
	COMMON/SOLUTE/NCOMP	, ICOMP	, NDCAL(3)	, CNAME(8)	COM01
	1, UNIT(11)	, CNVSN(11)			COM01
	COMMON/STAGES/NBNKS	, NSTGS(3)	, NFRST(3)	, LEVEL(50)	COM02
	1, IAQFD(50)	, IOGFD(50)	, HM(50)	, HS(50)	COM02
	2, HMO(50)	, HMAV(50)	, HMOV(50)	, HSA(50)	COM02
	3, HSAP(50)	, HSOP(50)	, HL(50)	, HLP(50)	COM02
	COMMON/PURXEQ/CTBP	, CTBPM	, NCHRG(8)	, SCHRG(8)	COM04
	1, NEXTC(8)	, SEXTC(8)	, EQLCT(8,3)	, COEFF(4,8,4)	COM04
	COMMON/DBCDEF/IDREF(8,3)	, DBCNT(8,3)	, IDBLK(10)	, DB/BL(21,2,10)	COM04
	COMMON/FEEDSR/IOXFD(15)	, FDTBL(21,10,15)		, HLTBL(11,2,50)	COM05
	COMMON/OGFLOT/TDBNK(101,2)	, BFOUT(100,2)	, YFOUT(100,8,2)	, ISOFL(2)	COM05
	COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3)	, IFLOW	, INCON	, TFIN	COM07
	1, CPLIM	, TAU(3)	, PRIM(100)	, IPOPT(100)	COM07
	COMMON	, W(50)	, B(50)	, HAV(50)	COM08
	1, WP(50)	, BP(50)	, WFAV(50)	, BFAV(50)	COM08
	2, YM(8,50)	, XS(8,50)	, YS(8,50)	, XFAV(8,50)	COM08
	3, XINP(8,50)	, XMP(8,50)	, YMP(8,50)	, XSP(8,50)	COM08
	COMMON/TOLERC/EPSTR(10)				STDYR2
C	-----				STDYR2
	COMMON XMN(8), YMN(8), XSN(8), YSN(8), XMO(8), XSO(8), FA(8), FO(8)				STDYR2
	1, FR(8), WWR(25), FD(8,25)				STDYR2
C	-----				STDYR2
C	PROCEDURE BEFORE ITERATION				STDYR2
	L=NFRST(NB)-1				STDYR2
	II=ISOFL(NB-1)				STDYR2
	NS=NSTGS(NB)				STDYR2
	CALL MEMSET(0, XMN, 1000)				STDYR2
	DO 30 K=1, NS				STDYR2
	I=L+K				STDYR2
	WWR(K)=W(I)+WRCL(I)				STDYR2
	DO 20 J=1, NCOMP				STDYR2
	FD(J,K)=XFAV(J,I)+YFAV(J,I)				STDYR2
	IF(NB.LE.1.OR.K.NE.II)		GOTO 20		STDYR2
	FD(J,K)=FD(J,K)+B(L)*YS(J,L)				STDYR2
	20 CONTINUE				STDYR2
	30 CONTINUE				STDYR2
	NSC=NS*8				STDYR2
	I=L+1				STDYR2
	CALL MEMOVE(XM(1,I), XMP, NSC)				STDYR2
	CALL MEMOVE(YM(1,I), YMP, NSC)				STDYR2
	CALL MEMOVE(XS(1,I), XSP, NSC)				STDYR2
	CALL MEMOVE(YS(1,I), YSP, NSC)				STDYR2
C	FIND MAIN FEED STAGE NO:IMAX				STDYR2
	FMAX=0.				STDYR2
	IMAX=0				STDYR2
	DO 50 I=1, NS				STDYR2

YNS(J)=YMN(J)	STDYR2
180 CONTINUE	STDYR2
198 CONTINUE	STDYR2
CCONVERGED IN ONE STAGE	STDYR2
CALL MEMOVE(XMN,XM(1,I),NCOMP)	STDYR2
CALL MEMOVE(YMN,YM(1,I),NCOMP)	STDYR2
CALL MEMOVE(XSN,XS(1,I),NCOMP)	STDYR2
CALL MEMOVE(YSN,YS(1,I),NCOMP)	STDYR2
C	STDYR2
200 CONTINUE	STDYR2
C	STDYR2
END OF STAGE LOOP	STDYR2
C--- CHECK IF OVER-ALL CONVERGENCE IS ATTAINED	STDYR2
ICONV=-2	STDYR2
N=L+1	STDYR2
EMAX=EPSLN	STDYR2
CALL CONVGC(XM(1,N),XMP,NS,NCOMP,EMAX,I,J,ICONV,IT,MAXIT)	STDYR2
IF(ICONV) 60,210,220	STDYR2
210 WRITE(6,6000) 8HFAILURE ,IT,NB,I,J,EMAX	STDYR2
GOTO 250	STDYR2
220 WRITE(6,6000) 8HSUCCESS ,IT,NB,I,J,EMAX	STDYR2
250 CONTINUE	STDYR2
6000 FORMAT(5HD ** ,A8,26HTO CONVERGE IN STDYR2, IT=,I3,5H NB=,I1,	STDYR2
1 4H I=,I2,4H J=,I1,7H EMAX=,1PE11.4)	STDYR2
END	STDYR2

C	SUBROUTINE STEADY				STEADY
C	CALCULATE CONCENTRATION PROFILE OF STEADY STATE.				STEADY
C	TWO DIFFERENT ITERATION SCHEMES ARE PREPARED.				STEADY
C					STEADY
	COMMON/SOLUTE/NCOMP	,ICOMP	,NDCAL(3)	,CNAME(8)	COMO1
	1,UNIT(11)	,CNVSN(11)			COMO1
	COMMON/STAGES/NBNKS	,NSTGS(3)	,NFRST(3)	,LEVEL(50)	COMO2
	1,IAQFD(50)	,IOGFD(50)	,HM(50)	,HMA(50)	COMO2
	2,HMO(50)	,HMAV(50)	,HMOV(50)	,HSA(50)	COMO2
	3,HSAP(50)	,HSOP(50)	,HL(50)	,HLP(50)	COMO2
	COMMON/REACTN/IREAC(3)	,JREAC(8,3)	,ARATE(8,3)	,ORATE(8,3)	COMO3
	COMMON/TOLERC/EPSTR(10)				COMO3
	COMMON/PURXEQ/CTBP	,CTBPM	,NCHRG(8)	,SCHRG(8)	COMO4
	1,NEXTC(8)	,SEXTC(8)	,EQLCT(8,3)	,COEFF(4,8,4)	COMO4
	COMMON/DBCDEF/IDREF(8,3)	,DBCNT(8,3)	,IDBLK(10)	,DBTBL(21,2,10)	COMO4
	COMMON/FEEDSR/IDXFD(15)	,FDTBL(21,10,15)		,MLTBL(11,2,50)	COMO5
	COMMON/OGFLOT/IDBNK(101,2)	,BFOUT(100,2)	,YFOUT(100,8,2)	,ISOFL(2)	COMO5
	COMMON/EFFICY/IEFFN(8,3)	,EF(8,50)			COMO6
	COMMON/CONTRL/ICL,ICALC(3),IFLOW		,INCON	,TFINL	COMO7
	1,CPLIM	,TAU(3)	,PRTIM(100)	,ILOPT(100)	COMO7
	COMMON	,W(50)	,B(50)	,HAV(50)	COMO8
	1,WP(50)	,BP(50)	,HFAV(50)	,BAV(50)	COMO8
	2,YM(8,50)	,XS(8,50)	,YS(8,50)	,BFAV(50)	COMO8
	3,XINP(8,50)	,XMP(8,50)	,YMP(8,50)	,XSP(8,50)	COMO8
				,YSP(8,50)	COMO8
C	COMMON	AL(8,25),AC(8,25),AC1(8,25),AC2(8,25),AR(8,25)			STEADY
	1	,AR1(8,25),F(8,25),F1(8,25),F2(8,25),F3(8,25)			STEADY
	2	,C1(8,25),C2(8,25),C3(8,25),C4(8,25),XP(8,25,3)			STEADY
	3	,D(8,25),MWR(25),MXF(8,25),BYF(8,25),X(25)			STEADY
	4	,CL(25),CC(25),CR(25),CF(25)			STEADY
	5	,FA(8,25),FO(8,25)			STEADY
		DIMENSION NTYPE(8)			STEADY
C	-----				STEADY
C					STEADY
CCC	BANK LOOP BEGINS				STEADY
C					STEADY
	DO 800 NB=1,NBNKS				STEADY
	L=NFRST(NB)-1				STEADY
	NS=NSTGS(NB)				STEADY
	NN=NB-1				STEADY
	IC=ICALC(NB)				STEADY
	MIACV=NDCAL(NB)				STEADY
	IF(IC-3) 5,650,660				STEADY
	5 CONTINUE				STEADY
	CALL MEMSET(0,NTYPE,8)				STEADY
	DO 10 J=1,NCOMP				STEADY
	IF(JREAC(J,NB).LT.0)		GOTO 10		STEADY
	M=JREAC(J,NB)				STEADY
	IF(M.GT.0.AND.M.NE.J) NTYPE(M)=J				STEADY
	IF(IEFFN(J,NB).GT.0) NTYPE(J)=-1				STEADY
	IF(IEFFN(J,NB).LT.0) NTYPE(J)=-2				STEADY
	10 CONTINUE				STEADY
	II=ISOFL(NN)				STEADY
C					STEADY
CCC	PREPARE FEEDS TERM				STEADY
C					STEADY
					STEADY

CALL MEMSET(0,AL,4000)	STEADY
DO 40 K=1,NS	STEADY
I=K+L	STEADY
WWR(K)=W(I)+WRCL(I)	STEADY
DO 30 J=1,NCOMP	STEADY
WXF(J,K)=XFAV(J,I)	STEADY
BYF(J,K)=YFAV(J,I)	STEADY
IF(NN.LE.0.OR.K.NE.II) GOTO 20	STEADY
BYF(J,K)=BYF(J,K)+B(L)*YS(J,L)	STEADY
20 CONTINUE	STEADY
F(J,K)=WXF(J,K)+BYF(J,K)	STEADY
30 CONTINUE	STEADY
40 CONTINUE	STEADY
C	STEADY
CCC PREPARE BASIC COEFFICIENTS	STEADY
DO 120 J=1,NCOMP	STEADY
IF(JREAC(J,NB)+NTYPE(J).LE.0) GOTO 70	STEADY
M=NTYPE(J)	STEADY
C	STEADY
CHEMICAL REACTANT	STEADY
DO 60 K=1,NS	STEADY
I=K+L	STEADY
C1(J,K)=WWR(K)/(WWR(K)+ARATE(J,NB)*HSA(I))	STEADY
C2(J,K)=B(I)/(B(I)+ORATE(J,NB)*HSO(I))	STEADY
IF(M.LE.0) GOTO 60	STEADY
C3(J,K)=ARATE(M,NB)*HSA(I)/(WWR(K)+ARATE(J,NB)*HSA(I))	STEADY
C4(J,K)=ORATE(M,NB)*HSO(I)/(B(I)+ORATE(J,NB)*HSO(I))	STEADY
60 CONTINUE	STEADY
GOTO 120	STEADY
70 CONTINUE	STEADY
IF(IEFFN(J,NB)) 100,80,80	STEADY
C	STEADY
EFFICIENCY RESPECT AQUEOUS PHASE	STEADY
80 CONTINUE	STEADY
DO 90 K=1,NS	STEADY
I=K+L	STEADY
C1(J,K)=1./EF(J,I)	STEADY
C3(J,K)=(EF(J,I)-1.)*WXF(J,K)/(EF(J,I)*W(I))	STEADY
IF(K.EQ.NS) GOTO 90	STEADY
C2(J,K)=(EF(J,I)-1.)*W(I+1)/(EF(J,I)*W(I))	STEADY
90 CONTINUE	STEADY
GOTO 120	STEADY
C	STEADY
EFFICIENCY RESPECT ORGANIC PHASE	STEADY
100 CONTINUE	STEADY
DO 110 K=1,NS	STEADY
I=K+L	STEADY
C3(J,K)=(1.-EF(J,I))*BYF(J,K)/(EF(J,I)*B(I))	STEADY
C1(J,K)=1./EF(J,I)	STEADY
IF(IC.EQ.1) GOTO 105	STEADY
C1(J,K)=EF(J,I)	STEADY
C3(J,K)=(1.-EF(J,I))*BYF(J,K)/B(I)	STEADY
C3(J,K)=(1.-EF(I,J))*BYF(J,K)/B(I)	STEADY
105 CONTINUE	STEADY
IF(K.EQ.1) GOTO 110	STEADY
C2(J,K)=(1.-EF(J,I))*B(I-1)/(EF(J,I)*B(I))	STEADY
IF(IC.EQ.2) C2(J,K)=(1.-EF(J,I))*B(I-1)/B(I)	STEADY
110 CONTINUE	STEADY
120 CONTINUE	STEADY
C	STEADY

CCC	PREPARE L.H.S. COEFFICIENTS		STEADY
	DO 200 J=1,NCOMP		STEADY
	IF(JREAC(J,NB)+NTYPE(J).LE.0)	GOTO 150	STEADY
C	CHEMICAL REACTANTS		STEADY
	DO 140 K=1,NS		STEADY
	I=K+L		STEADY
	IF(K.GT.1) AL(J,K)=-C2(J,K-1)*B(I-1)		STEADY
	AC(J,K)=WNR(K)+ARATE(J,NB)*HMA(I)-C1(J,K)*HRCL(I)		STEADY
	AC1(J,K)=B(I)+ORATE(J,NB)*HMO(I)		STEADY
	IF(K.LT.NS) AR(J,K)=-C1(J,K+1)*W(I+1)		STEADY
	140 CONTINUE		STEADY
	GOTO 200		STEADY
	150 CONTINUE		STEADY
	IF(IEFFN(J,NB)) 180,160,160		STEADY
C	EFFICIENCY RESPECT AQUEOUS PHASE		STEADY
	160 CONTINUE		STEADY
	DO 170 K=1,NS		STEADY
	I=K+L		STEADY
	AC(J,K)=W(I)		STEADY
	AC1(J,K)=B(I)*C1(J,K)		STEADY
	IF(K.LT.NS) AR(J,K)=-W(I+1)		STEADY
	AR1(J,K)=B(I)*C2(J,K)		STEADY
	IF(K.EQ.1)	GOTO 170	STEADY
	AL(J,K)=-B(I-1)		STEADY
	IF(J.LE.NIACV.AND.IC.EQ.2)	GOTO 170	STEADY
	AL(J,K)=-B(I-1)*C1(J,K-1)		STEADY
	AC2(J,K)=-AR1(J,K-1)		STEADY
	170 CONTINUE		STEADY
	GOTO 200		STEADY
C	EFFICIENCY RESPECT ORGANIC PHASE		STEADY
	180 CONTINUE		STEADY
	IF(IC.EQ.1)	GOTO 200	STEADY
	DO 190 K=1,NS		STEADY
	I=K+L		STEADY
	IF(K.GT.1) AL(J,K)=-B(I-1)*C1(J,K)		STEADY
	AC(J,K)=W(I)		STEADY
	AC1(J,K)=B(I)*C1(J,K)		STEADY
	IF(K.LT.NS) AR(J,K)=-W(I+1)		STEADY
	190 CONTINUE		STEADY
	200 CONTINUE		STEADY
C			STEADY
CCC	PREPARE R.H.S. COEFFICIENTS		STEADY
	DO 280 J=1,NCOMP		STEADY
	M=NTYPE(J)		STEADY
	IF(M.LE.0)	GOTO 230	STEADY
	DO 220 K=1,NS		STEADY
	I=K+L		STEADY
	FA(J,K)=ARATE(M,NB)*HMA(I)		STEADY
	FO(J,K)=ORATE(M,NB)*HMO(I)		STEADY
	F1(J,K)=C3(J,K)*C1(M,K)*HRCL(I)		STEADY
	IF(K.LT.NS) F2(J,K)=C3(J,K+1)*C1(M,K+1)*W(I+1)		STEADY
	IF(K.GT.1) F3(J,K)=C4(J,K-1)*C2(M,K-1)*B(I-1)		STEADY
	220 CONTINUE		STEADY
	GOTO 280		STEADY
	230 CONTINUE		STEADY
	IF(IEFFN(J,NB)) 240,280,260		STEADY
C	EFFICIENCY RESPECT ORGANIC PHASE		STEADY

```

240 CONTINUE
  IF(IC.EQ.2)
    DO 250 N=1,NS
      K=N-NS+1
      I=K+L
      F1(J,K)=G3(J,K)*W(I)
      IF(K.LT.NS) F2(J,K)=F1(J,K+1)
250 CONTINUE
  GOTO 280
C   EFFICIENCY RESPECT AQUEOUS PHASE
260 CONTINUE
  DO 270 K=1,NS
    I=K+L
    F1(J,K)=G3(J,K)*B(I)
    IF(K.GT.1) F2(J,K)=F1(J,K-1)
270 CONTINUE
280 CONTINUE
C
C
CCC  ITERATION CALC. FOR INTERACTIVE COMPONENTS
C
  IF(MIACV.LE.0)
    NSC=NS*8
    CALL MEMOVE(XM(1,L+1),XP,NSC)
C   FIND MAIN FEED STAGE NO.
  FMAX=0.
  IMAX=0
  DO 300 I=1,NS
    FS=0.
    DO 290 J=1,MIACV
      FS=FS+F(J,I)
290  CONTINUE
    IF(FMAX.GT.FS)
      FMAX=FS
      IMAX=I
300 CONTINUE
C
  I=L+1
  ICONV=0
  IF(IC-2) 310,320,330
C
C   ITERATION SCHEME - 1
310 CONTINUE
  CALL EITR1(XM(1,I),NTYPE,NB,NS,MIACV,ICONV)
  GOTO 350
C   ITERATION SCHEME - 2
320 CONTINUE
  CALL EITR2(XM(1,I),YM(1,I),NTYPE,NB,NS,MIACV,ICONV,IMAX)
  GOTO 350
C   ITERATION SCHEME - 3
330 CONTINUE
350 CONTINUE
C
CCC  CALCULATE CONCENTRATION OF ORGANIC PHASE AND SEILER PART
  CALL MEMSET(D,XS(1,L+1),NSC)
  CALL MEMSET(D,YS(1,L+1),NSC)
  DO 430 J=1,MIACV

```


	M=JREAC(J,NB)	STEADY
	DO 420 K=1,NS	STEADY
	I=K+L	STEADY
	CALL DBCOFX(NB,M,J,XM(1,I),YM(1,I),D(1,K))	STEADY
	IF(M.LE.0.AND.NTYPE(J).LE.0) GOTO 370	STEADY
	YM(J,I)=XM(J,I)*D(J,K)	STEADY
	XS(J,I)=XS(J,I)+C1(J,K)*XM(J,I)	STEADY
	YS(J,I)=YS(J,I)+C2(J,K)*YM(J,I)	STEADY
	IF(M.EQ.J) GOTO 420	STEADY
	XS(M,I)=XS(M,I)+C3(M,K)*XS(J,I)	STEADY
	YS(M,I)=YS(M,I)+C4(M,K)*YS(J,I)	STEADY
	GOTO 420	STEADY
370	CONTINUE	STEADY
	IF(IEFFN(J,NB)) 380,400,390	STEADY
380	CONTINUE	STEADY
	YM(J,I)=C1(J,K)*D(J,K)*XM(J,I)+C2(J,K)*YM(J,I-1)+C3(J,K)	STEADY
	GOTO 410	STEADY
390	CONTINUE	STEADY
	YM(J,I)=C1(J,K)*D(J,K)*XM(J,I)+C2(J,K)*D(J,K)*XM(J,K+1)	STEADY
	+C3(J,K)*D(J,K)	STEADY
	GOTO 410	STEADY
400	CONTINUE	STEADY
	YM(J,I)=XM(J,I)*D(J,K)	STEADY
410	CONTINUE	STEADY
	XS(J,I)=XM(J,I)	STEADY
	YS(J,I)=YM(J,I)	STEADY
420	CONTINUE	STEADY
430	CONTINUE	STEADY
C	END OF INTERACTIVE(MACRO) COMPONENT	STEADY
C		STEADY
C		STEADY
CCC	CALCULATE CONCENTRATION PROFILES FOR MICRO COMPONENTS	STEADY
C		STEADY
500	CONTINUE	STEADY
	IF(NCOMP-MIACV.LE.0) GOTO 710	STEADY
	J1=MIACV+1	STEADY
	J2=NCOMP	STEADY
C		STEADY
C	COMPONENT LOOP FOR J1 - J2	STEADY
	DO 630 J=J1,J2	STEADY
	CALL MEMSET(0,CL,100)	STEADY
	DO 510 K=1,NS	STEADY
	I=K+L	STEADY
	CALL DBCOFX(NB,K,J,XM(1,I),YM(1,I),D(1,K))	STEADY
510	CONTINUE	STEADY
C	PREPARE COEFFICIENTS	STEADY
	IF(JREAC(J,NB).EQ.0.AND.IEFFN(J,NB).LT.0) GOTO 550	STEADY
	DO 540 K=1,NS	STEADY
	CL(K)=AL(J,K)*D(J,K-1)	STEADY
	CC(K)=AC(J,K)+AC1(J,K)*D(J,K)+AC2(J,K)*D(J,K-1)	STEADY
	CR(K)=AR(J,K)+AR1(J,K)*D(J,K)	STEADY
	CF(K)=F(J,K)	STEADY
	IF(NTYPE(J)) 520,540,530	STEADY
520	CF(K)=CF(K)-F1(J,K)*D(J,K)+F2(J,K)*D(J,K-1)	STEADY
	GOTO 540	STEADY
530	M=NTYPE(J)	STEADY
	I=K+L	STEADY

CCC	SPECIAL ROUTINES FOR DETAIL CHEMICAL REACTIONS	STEADY
C	MODIFIED IN JULY, 1978	STEADY
650	CALL STDYR1(NB)	STEADY
	GOTO 710	STEADY
660	CALL STDYR2(NB)	STEADY
C	-----	STEADY
C		STEADY
CCC	CCNC. PROFILES OF ALL COMPONENTS ARE DETERMINED FOR BANK=NB .	STEADY
710	CONTINUE	STEADY
C		STEADY
C	RESET THE TABLE OF ORGANIC OUTLET FOR TRANSTENT CALC.	STEADY
	IF(NB.GE.NBANKS) GOTO 750	STEADY
	CALL MEMSET(B(L+NS),BFOUT(1,NB),100)	STEADY
	DO 740 J=1,NCOMP	STEADY
	CALL MEMSET(YS(J,L+NS),YFOUT(1,J,NB),100)	STEADY
740	CONTINUE	STEADY
750	CONTINUE	STEADY
C		STEADY
800	CONTINUE	STEADY
CCC	END OF BANK LOOP	STEADY
C		STEADY
CCC	RESET CONCENTRATION DECAYED TABLE.	STEADY
	NST=400	STEADY
	CALL MEMSET(D,XMP,3200)	STEADY
C		STEADY
	RETURN	STEADY
	END	STEADY

	FUNCTION TERP(A, TM, T)	TERP
C****		TERP
C****	INTERPOLATION AND STEP FUNCTION ROUTINE	TERP
C****		TERP
	DIMENSION A(1), TM(1)	TERP
C		TERP
C		TERP
C		TERP
	I1=1	TERP
	T1=TM(I1)	TERP
	F=0.0	TERP
	I=1	TERP
15	I=I+1	TERP
	IF(T.LE.T1) GOTO 25	TERP
	T2=TM(I)	TERP
	IF(T1.LE.T.AND.T.LE.T2) GOTO 20	TERP
	IF(T.GT.T2.AND.T2.LT.0.0) GOTO 25	TERP
	I1=I	TERP
	T1=T2	TERP
	GOTO 15	TERP
C		TERP
20	F=(T-T1)/(T2-T1)	TERP
	ENTRY TERQ	TERP
25	CONTINUE	TERP
	TERP=A(I1)+(A(I)-A(I1))*F	TERP
	RETURN	TERP
	END	TERP

	SUBROUTINE TPLOTS(PLBUF,TFINL)	TPLOTS
C	PURPOSE	TPLOTS
C	PLOTTER ROUTINE OF MIXSET CODE (VERSION 3)	TPLOTS
C	CONCENTRATION AND FLOW RATE CHANGE PLOTS ARE AVAILABLE.	TPLOTS
C	A FIGURE CAN HAVE FOUR SETS OF PLOT LINES.	TPLOTS
C		TPLOTS
C	COMMON/SOLUTE/NCOMP ,ICOMP ,NDCAL(3) ,CNAME(8)	TPLOTS
	1,UNIT(11) ,CNVSN(11)	COMO1
	COMMON/STAGES/NBNKS,STGS(3),MFRST(3)	COMO1
	COMMON/MPLOTS/MPLOT ,MPSTG(20) ,MPFIG(20) ,MPCOM(20)	TPLOTS
	1 ,MPSCL(20) ,MPCNT(23)	COMO9
	COMMON/TITLE /LLLL,TIT(9)	TPLOTS
	COMMON LINID(8),MFIGS(4),MFIG1(4),MFIG2(4)	TPLOTS
	DIMENSION PLBUF(106,23)	TPLOTS
C		TPLOTS
C		TPLOTS
C	INITIAL SET FOR PLOTTING	TPLOTS
C	CALL MEMSET(0,LINID,20)	TPLOTS
	SN=2.75	TPLOTS
	SS=3.0	TPLOTS
	YLEN=150.0	TPLOTS
	XLEN=200.0	TPLOTS
C		TPLOTS
C	CONVERT UNIT OF CONC. AND FLOW RATE INTO OUTPUT ONE	TPLOTS
C		TPLOTS
	DO 20 I=1,MPLOT	TPLOTS
	J=MPCOM(I)	TPLOTS
	R=CNVSN(J)	TPLOTS
	IF(R.LE.0.0.OR.R.EQ.1.0) GOTO 20	TPLOTS
	M=MPCNT(I)	TPLOTS
	DO 10 N=1,M	TPLOTS
	PLBUF(N,I)=PLBUF(N,I)/R	TPLOTS
	10 CONTINUE	TPLOTS
	20 CONTINUE	TPLOTS
C		TPLOTS
C	SCALE TIME AXIS DATA	TPLOTS
C		TPLOTS
	DO 25 N=1,NBNKS	TPLOTS
	I=20+N	TPLOTS
	T=-TFINL	TPLOTS
	CALL SCALE1(T,PLBUF(1,I),MPCNT(I),XLEN)	TPLOTS
	25 CONTINUE	TPLOTS
C		TPLOTS
C	FIND OUT PLOT NO. OF SAME FIGURE ID. NO.	TPLOTS
C		TPLOTS
	IFIGN=0	TPLOTS
	NPLOT=0	TPLOTS
	30 CONTINUE	TPLOTS
	IFIGN=IFIGN+1	TPLOTS
	NFIGS=0	TPLOTS
	NFIG1=0	TPLOTS
	NFIG2=0	TPLOTS
	CALL MEMSET(0,MFIGS,12)	TPLOTS
	DO 70 I=1,MPLOT	TPLOTS
		TPLOTS

	IF(IFIGN.NE.MPFIG(I))	GOTO 70	TPLOTS
	NFIGS=NFIGS+1		TPLOTS
	MFIGS(NFIGS)=I		TPLOTS
	IF(NFIG1.GT.0)	GOTO 40	TPLOTS
	JC1=MPSCL(I)		TPLOTS
	GOTO 50		TPLOTS
40	CONTINUE		TPLOTS
	IF(JC1.NE.MPSCL(I))	GOTO 60	TPLOTS
50	NFIG1=NFIG1+1		TPLOTS
	MFIG1(NFIG1)=I		TPLOTS
	GOTO 70		TPLOTS
60	CONTINUE		TPLOTS
	NFIG2=NFIG2+1		TPLOTS
	MFIG2(NFIG2)=I		TPLOTS
70	CONTINUE		TPLOTS
	IF(NFIGS.LE.0)	GOTO 300	TPLOTS
C			TPLOTS
C	SEARCH MAX. VALUE AND SCALE PLOT VALUES		TPLOTS
C			TPLOTS
	YMAX1=0.0		TPLOTS
	DO 80 N=1,NFIG1		TPLOTS
	I=MFIG1(N)		TPLOTS
	KK=MPCNT(I)		TPLOTS
	DO 75 K=1,KK		TPLOTS
	YMAX1=AMAX1(YMAX1,PLBUF(K,I))		TPLOTS
75	CONTINUE		TPLOTS
80	CONTINUE		TPLOTS
	DO 90 N=1,NFIG1		TPLOTS
	I=MFIG1(N)		TPLOTS
	CALL SCALE1(YMAX1,PLBUF(1,I),MPCNT(I),YLEN)		TPLOTS
90	CONTINUE		TPLOTS
	IF(NFIG2.LE.0)	GOTO 120	TPLOTS
	YMAX2=0.0		TPLOTS
	DO 100 N=1,NFIG2		TPLOTS
	I=MFIG2(N)		TPLOTS
	KK=MPCNT(I)		TPLOTS
	DO 105 K=1,KK		TPLOTS
	YMAX2=AMAX1(YMAX2,PLBUF(K,I))		TPLOTS
105	CONTINUE		TPLOTS
100	CONTINUE		TPLOTS
	DO 110 N=1,NFIG2		TPLOTS
	I=MFIG2(N)		TPLOTS
	CALL SCALE1(YMAX2,PLBUF(1,I),MPCNT(I),YLEN)		TPLOTS
110	CONTINUE		TPLOTS
120	CONTINUE		TPLOTS
C			TPLOTS
C	PLOT ABSCISSA (TIME AXIS)		TPLOTS
C	DRAW FRAME LINES		TPLOTS
	CALL PLOT(-60.,-30.,3)		TPLOTS
	CALL PLOT(238.,-30.,2)		TPLOTS
	CALL PLOT(238.,180.,2)		TPLOTS
	CALL PLOT(-60.,180.,2)		TPLOTS
	CALL PLOT(-60.,-30.,2)		TPLOTS
	X=0.0		TPLOTS
	Y=0.0		TPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)		TPLOTS
	CALL PLOT(XLEN+3.0,Y,2)		TPLOTS

	CALL PLOT(X1,Y,2)	TPLOTS
	CALL NUMBER(XN,Y,SN,FPN,0.0,K)	TPLOTS
	Y=Y+DW	TPLOTS
	FPN=FPN+DU	TPLOTS
160	CONTINUE	TPLOTS
	Y=60.0	TPLOTS
	X=XN-2.0	TPLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,UNIT(J),90.0,10)	TPLOTS
C		TPLOTS
	IF(NORDT.LT.2) GOTO 140	TPLOTS
C		TPLOTS
170	CONTINUE	TPLOTS
C		TPLOTS
C		TPLOTS
C	PLOT CONCENTRATION CHAGE VS. TIME	TPLOTS
C	PLOT FLOW RATE CHAGE VS. TIME	TPLOTS
C		TPLOTS
	DO 240 N=1,NFIGS	TPLOTS
	I=MFIGS(N)	TPLOTS
	NST=MPSIG(I)	TPLOTS
	J =MPCOM(I)	TPLOTS
	MM =MPCNT(I)	TPLOTS
C	FIND OUT NB AND NS	TPLOTS
	NN=0	TPLOTS
	DO 190 NB=1,NBNKS	TPLOTS
	NSTG=NSTGS(NB)	TPLOTS
	DO 180 NS=1,NSTG	TPLOTS
	NN=NN+1	TPLOTS
	IF(NN.EQ.IABS(NST)) GOTO 200	TPLOTS
180	CONTINUE	TPLOTS
190	CONTINUE	TPLOTS
200	CONTINUE	TPLOTS
	NN=NB+20	TPLOTS
	X=PLBUF(MM,NN)	TPLOTS
	Y=PLBUF(MM,I)	TPLOTS
	FPN=N	TPLOTS
	CALL NUMBER(X,Y,2.0,FPN,0.0,-1)	TPLOTS
C		TPLOTS
	IF(NST.LT.0) CALL DASHLN(PLBUF(1,NN),PLBUF(1,I),MM,1)	TPLOTS
	IF(NST.GT.0) CALL LINE (PLBUF(1,NN),PLBUF(1,I),MM,1,0,0)	TPLOTS
C		TPLOTS
C	PRINT LINE ID.	TPLOTS
	X=10.0	TPLOTS
	Y=YLEN+(4-N)*5.0+1.0	TPLOTS
	IF(NST) 210,230,220	TPLOTS
210	LTP=3	TPLOTS
	NPHAS=7HORGANIC	TPLOTS
	GOTO 230	TPLOTS
220	LTP=1	TPLOTS
	NPHAS=7HAQUEOUS	TPLOTS
230	CONTINUE	TPLOTS
	CALL LINTYP(X,Y+1.5,X+9.0,Y+1.5,LTP,2.5)	TPLOTS
	C=10HFLOW RATE	TPLOTS
	IF(J.LE.8) C=CNAME(J)	TPLOTS
	ENCODE(50,3000,LINID) N,C,UNIT(J),NPHAS,NS,NB	TPLOTS
	X=X+10.0	TPLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SN,LINID,0.0,50)	TPLOTS

C	240 CONTINUE		TPLOTS
C			TPLOTS
C	PRINT HEAD TITLE		TPLOTS
	X=-5.0		TPLOTS
	Y=-17.0		TPLOTS
	CALL MEMOVE(TIT,LINID,7)		TPLOTS
	CALL MEMOVE(TIT(9),LINID(8),1)		TPLOTS
	CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,80)		TPLOTS
	X=0.0		TPLOTS
	Y=YLEN		TPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,3)		TPLOTS
	X=XLEN+3.0		TPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,2)		TPLOTS
	Y=0.0		TPLOTS
	CALL PLOT(X,Y,2)		TPLOTS
C			TPLOTS
	NPLOT=NPLOT+NFIGS		TPLOTS
	CALL PLOT(298.,0.,-3)		TPLOTS
C	300 CONTINUE		TPLOTS
C			TPLOTS
	IF(IFIGN.GE.20)	GOTO 400	TPLOTS
	IF(NPLOT.LT.MPLOT)	GOTO 30	TPLOTS
C	400 CONTINUE		TPLOTS
C			TPLOTS
	CALL PLOT(0,0,599)		TPLOTS
	PRINT 6000		TPLOTS
	6000 FORMAT(20H0 PLOT TAPE IS MADE)		TPLOTS
	3000 FORMAT(I1,1X,2A10,47,6H STAGE,I2,8H OF BANK,I2,3X)		TPLOTS
C			TPLOTS
	RETURN		TPLOTS
	END		TPLOTS

	SUBROUTINE TREACN(NB,I,DT,X,Y,FA,FO,HA,HO,PA,PO,AK,OK,NRT,NOPT)	TREACN
C	TREACN PROVIDES COMPONENT INCREMENTS BY CHEMICAL REACTION FOR	TREACN
C	TRANSIENT CALCULATION.	TREACN
C	IF NRT = 1 CONSTANT FIRST-ORDER REACTIONS	TREACN
C	= -1 PU REDUCTION WITH HAN	TREACN
C	= -2 PU REDUCTION WITH URANOUS	TREACN
C		TREACN
	COMMON/SOLUTE/NGCOMP , ICOMP , NDCAL(3) , CNAME(8)	COMO1
	1,UNIT(11) , CNVSN(11)	COMO1
	COMMON/REACTN/IREAC(3) , JREAC(8,3) , ARATE(8,3) , ORATE(8,3)	COMO3
	COMMON/TOLERC/EPSTR(10)	COMO3
	DIMENSION X(8),Y(8),FA(8),FO(8),PA(8),PO(8),AK(8),OK(8)	TREACN
	REAL KA(4),KO(4)	TREACN
	REAL K1A,K2A,K2O,K3A,K4A	TREACN
	DATA CLW/1.0E-15/	TREACN
C	-----	TREACN
C	CALL MEMSET(0,PA,NGCOMP)	TREACN
	CALL MEMSET(0,PO,NGCOMP)	TREACN
	CALL MEMSET(0,AK,NGCOMP)	TREACN
	CALL MEMSET(0,OK,NGCOMP)	TREACN
	HAT=HA*DT	TREACN
	HOT=HO*DT	TREACN
C	-----	TREACN
	IF(NRT+1) 30,50,10	TREACN
10	CONTINUE	TREACN
	DO 20 J=1,NGCOMP	TREACN
	M=JREAC(J,NB)	TREACN
	IF(M.LE.0) GOTO 20	TREACN
	AK(J)=ARATE(J,NB)*HAT	TREACN
	OK(J)=ORATE(J,NB)*HOT	TREACN
	IF(M.EQ.J) GOTO 20	TREACN
	PA(M)=PA(M)+AK(J)*X(J)	TREACN
	PO(M)=PO(M)+OK(J)*Y(J)	TREACN
20	CONTINUE	TREACN
	GOTO 200	TREACN
C	-----	TREACN
30	CONTINUE	TREACN
	M=2-NOPT	TREACN
	CALL REACTN(M,X,HAT,KA)	TREACN
	CALL REACTN(-M,Y,HOT,KO)	TREACN
	AK(1)=KA(2)*X(4)/X(1)*1.5	TREACN
	OK(1)=KO(2)*Y(4)/Y(1)*1.5	TREACN
	PA(1)=KA(1)*X(3)*X(5)*2.+KA(3)*X(5)+KA(4)*X(5)*2.	TREACN
	PO(1)=KO(1)*Y(3)*Y(5)*2.+KO(3)*Y(5)+KO(4)*Y(5)*2.	TREACN
	PA(2)=KA(1)*X(3)+X(5)*0.5+(KA(3)+KA(4))*X(5)	TREACN
	PO(2)=KO(1)*Y(3)+Y(5)*0.5+(KO(3)+KO(4))*Y(5)	TREACN
	AK(3)=KA(1)*X(5)	TREACN
	OK(3)=KO(1)*Y(5)	TREACN
	PA(3)=KA(2)*X(4)	TREACN
	PO(3)=KO(2)*Y(4)	TREACN
	AK(4)=KA(2)	TREACN
	OK(4)=KO(2)	TREACN
	PA(4)=KA(1)*X(3)*X(5)	TREACN
	PO(4)=KO(1)*Y(3)*Y(5)	TREACN

	SUBROUTINE TRIBND(AL,AC,AR,R,N,XY)	TRIBND
C****		TRIBND
C****	CALCULATE SIMULTANEOUS LINEAR EQUATION WITH TRI-BAND MATRIX	TRIBND
C****		TRIBND
	DIMENSION AL(1),AC(1),AR(1),R(1),XY(1)	TRIBND
C		TRIBND
	NN=N-1	TRIBND
C		TRIBND
C	CALCULATION BY FORWARD REDUCTION AND BACKWARD SUBSTITUTION	TRIBND
C		TRIBND
C(FORWARD REDUCTION)	TRIBND
	T=AC(1)	TRIBND
	AC(1)=1.0	TRIBND
	AR(1)=AR(1)/T	TRIBND
	R(1)= R(1)/T	TRIBND
	DO 55 I=2,NN	TRIBND
	AC(I)=AC(I)-AR(I-1)*AL(I)	TRIBND
	R(I)= R(I)- R(I-1)*AL(I)	TRIBND
	T=AC(I)	TRIBND
	AR(I)=AR(I)/T	TRIBND
	R(I)= R(I)/T	TRIBND
	AC(I)=1.0	TRIBND
55	CONTINUE	TRIBND
	AC(N)=AC(N)-AR(N -1)*AL(N)	TRIBND
	R(N)= R(N)- R(N -1)*AL(N)	TRIBND
C		TRIBND
C(BACKWARD SUBSTITUTION)	TRIBND
	CALL MEMSET(0,XY,N)	TRIBND
	XY(N)=R(N)/AC(N)	TRIBND
	DO 60 J=1,NN	TRIBND
	I=N -J	TRIBND
	XY(I)=R(I)-XY(I+1)*AR(I)	TRIBND
60	CONTINUE	TRIBND
C		TRIBND
	RETURN	TRIBND
	END	TRIBND

SUBROUTINE	TWOPRT					TWOPRT
COMMON/SOLUTE/NCOMP		, ICOMP	, NDCAL (3)	, CNAME (8)		COMO1
1, UNIT (11)	, CNVSN (11)					COMO1
COMMON/STAGES/NBNKS		, NSTGS (3)	, NFRST (3)	, LEVEL (50)		COMO2
1, IAQFD (50)	, IOGFD (50)	, HM (50)	, FS (50)	, HMA (50)		COMO2
2, HMO (50)	, HMAV (50)	, HMOV (50)	, HSA (50)	, HSO (50)		COMO2
3, HSAP (50)	, HSOP (50)	, HL (50)	, HLP (50)	, WRCL (50)		COMO2
COMMON/REACTN/IREAC (3)		, JREAC (8,3)	, ARATE (8,3)	, ORATE (8,3)		COMO3
COMMON/TOLERC/EPSTR (10)						COMO3
COMMON	, W (50)	, B (50)	, WAV (50)	, BAV (50)		COMO8
1, WP (50)	, RP (50)	, WFAV (50)	, BFAV (50)	, XM (8,50)		COMO8
2, YM (8,50)	, XS (8,50)	, YS (8,50)	, XFAV (8,50)	, YFAV (8,50)		COMO8
3, XINP (8,50)	, XMP (8,50)	, YMP (8,50)	, XSP (8,50)	, YSP (8,50)		COMO8
COMMON/TITLE/LINE						TWOPRT
COMMON	, PROCT (5,11)	, CONPT (5,11)	, UNIT1 (11)	, CNAME1 (11)		TWOPRT
1, FEEDN (11)	, FLOWT (11)	, XY (8)	, RC (5)	, PTOTL (11)		TWOPRT
2, CTOTL (11)						TWOPRT
DATA	BAR/9H-----/					TWOPRT
C	6.000	FORMAT (1H0,6X,25HREACTION BALANCES OF BANK,I2,8X,3HPU-,A5,9H REACT				TWOPRT
		*ION)				TWOPRT
	6.010	FORMAT (1H ,22X,10(A10,1X))				TWOPRT
	6.030	FORMAT (1H ,20X,10(2X,A9))				TWOPRT
	6.040	FORMAT (1H ,8X,7HFEED IN,5X,1P10E11.3)				TWOPRT
	6.050	FORMAT (1H ,8X,8HFLOW OUT,4X,1P10E11.3)				TWOPRT
	6.060	FORMAT (1H ,8X,10HPRODUCTION)				TWOPRT
	6.070	FORMAT (1H ,14X,2HR-,I1,3X,1P10E11.3)				TWOPRT
	6.080	FORMAT (1H ,12X,5HTOTAL,3X,1P10E11.3)				TWOPRT
	6.090	FORMAT (1H ,8X,11HCONSUMPTION)				TWOPRT
C		-----				TWOPRT
C		IF (IFRST.NE.0) GO TO 10				TWOPRT
C		CALL HEADWR				TWOPRT
		IFRST=1				TWOPRT
		NLINE=24				TWOPRT
		CALL MEMOVE (CNAME, CNAME1, NCOMP)				TWOPRT
		CALL MEMOVE (UNIT, UNIT1, NCOMP)				TWOPRT
		UNIT1 (NCOMP+1)=5H(G/L)				TWOPRT
		UNIT1 (NCOMP+2)=5H(G/L)				TWOPRT
		CNAME1 (NCOMP+1)=10HTOTAL PU				TWOPRT
		CNAME1 (NCOMP+2)=10HTOTAL U				TWOPRT
	10	CONTINUE				TWOPRT
C		-----				TWOPRT
		DO 130 N=1,NBNKS				TWOPRT
		IF (IREAC(N).GE.0) GO TO 130				TWOPRT
		NOPT=-IREAC(N)				TWOPRT
		KRC=NOPT+3				TWOPRT
		NS=NSTGS(N)				TWOPRT
		NF=NFRST(N)				TWOPRT
		NFS=NF+NS-1				TWOPRT
		DO 30 J=1,NCOMP				TWOPRT
		FE=0.0				TWOPRT
		DO 20 I=NF,NFS				TWOPRT
		FE=FE+XFAV(J,I)+YFAV(J,I)				TWOPRT
	20	CONTINUE				TWOPRT
		IF (N.GT.1) FE=FE+B(NF-1)*YS(J,NF-1)				TWOPRT
		FEEDN(J)=FE/CNVSN(J)				TWOPRT
						TWOPRT

30	CONTINUE		TWOPRT
	DO 40 J=1,NCOMP		TWOPRT
	FE=XS(J,NF)*W(NF)+YS(J,NFS)+B(NFS)		TWOPRT
	FLOMT(J)=FE/CNVSN(J)		TWOPRT
40	CONTINUE		TWOPRT
	CALL MEMSET(0.0,PROCT,55)		TWOPRT
	CALL MEMSET(0.0,CONPT,55)		TWOPRT
	DO 74 M=1,4		TWOPRT
	DO 72 I=NF,NFS		TWOPRT
	IF(NOPT.EQ.1) GOTO 60		TWOPRT
	GO TO (50,52,54,56) M		TWOPRT
50	CALL REACTN(2,XM(1,I),HMA(I),RC)		TWOPRT
	RC(1)=RC(1)*XM(3,I)*XM(5,I)		TWOPRT
	RC(2)=RC(2)*XM(4,I)		TWOPRT
	RC(3)=RC(3)*XM(5,I)		TWOPRT
	RC(4)=RC(4)*XM(5,I)		TWOPRT
	RC(5)=RC(2)*0.5+RC(3)		TWOPRT
	GO TO 58		TWOPRT
52	CALL REACTN(-2,YM(1,I),HMO(I),RC)		TWOPRT
	RC(1)=RC(1)*YM(3,I)*YM(5,I)		TWOPRT
	RC(2)=RC(2)*YM(4,I)		TWOPRT
	RC(3)=RC(3)*YM(5,I)		TWOPRT
	RC(4)=RC(4)*YM(5,I)		TWOPRT
	RC(5)=RC(2)*0.5+RC(3)		TWOPRT
	GO TO 58		TWOPRT
54	CALL REACTN(1,XS(1,I),HSA(I),RC)		TWOPRT
	RC(1)=RC(1)*XS(3,I)*XS(5,I)		TWOPRT
	RC(2)=RC(2)*XS(4,I)		TWOPRT
	RC(3)=RC(3)*XS(5,I)		TWOPRT
	RC(4)=RC(4)*XS(5,I)		TWOPRT
	RC(5)=RC(2)*0.5+RC(3)		TWOPRT
	GO TO 58		TWOPRT
56	CALL REACTN(-1,YS(1,I),HSO(I),RC)		TWOPRT
	RC(1)=RC(1)*YS(3,I)*YS(5,I)		TWOPRT
	RC(2)=RC(2)*YS(4,I)		TWOPRT
	RC(3)=RC(3)*YS(5,I)		TWOPRT
	RC(4)=RC(4)*YS(5,I)		TWOPRT
	RC(5)=RC(2)*0.5+RC(3)		TWOPRT
58	CONPT(1,3)=CONPT(1,3)+RC(1)		TWOPRT
	CONPT(1,5)=CONPT(1,5)+RC(1)*0.5		TWOPRT
	PROCT(1,1)=PROCT(1,1)+RC(1)*2.0		TWOPRT
	PROCT(1,2)=PROCT(1,2)+RC(1)*0.5		TWOPRT
	PROCT(1,4)=PROCT(1,4)+RC(1)		TWOPRT
	CONPT(2,1)=CONPT(2,1)+RC(2)*1.5		TWOPRT
	CONPT(2,4)=CONPT(2,4)+RC(2)		TWOPRT
	PROCT(2,3)=PROCT(2,3)+RC(2)		TWOPRT
	PROCT(2,6)=PROCT(2,6)+RC(2)*0.5		TWOPRT
	CONPT(3,5)=CONPT(3,5)+RC(3)		TWOPRT
	PROCT(3,1)=PROCT(3,1)+RC(3)		TWOPRT
	PROCT(3,2)=PROCT(3,2)+RC(3)		TWOPRT
	PROCT(3,6)=PROCT(3,6)+RC(3)		TWOPRT
	CONPT(4,5)=CONPT(4,5)+RC(4)		TWOPRT
	PROCT(4,1)=PROCT(4,1)+RC(4)*2.0		TWOPRT
	PROCT(4,2)=PROCT(4,2)+RC(4)		TWOPRT
	CONPT(5,6)=CONPT(5,6)+RC(5)		TWOPRT
	CONPT(5,7)=CONPT(5,7)+RC(5)		TWOPRT
	PROCT(5,1)=PROCT(5,1)+RC(5)		TWOPRT

付録3 計 算 例

	CTOTL(NCOMP+2)=CTOTL(2)+CTOTL(5)	TWOPRT
	FEEDN(NCOMP+2)=FEEDN(2)+FEEDN(5)	TWOPRT
	FLOWT(NCOMP+2)=FLOWT(2)+FLOWT(5)	TWOPRT
100	CONTINUE	TWOPRT
	IF(LINE.LT.NLINE) CALL HEADWR	TWOPRT
	LINE=LINE-NLINE	TWOPRT
	NC=NCOMP+NOPT	TWOPRT
	IF(NOPT.EQ.1) WRITE(6,6000) N,SHHAN	TWOPRT
	IF(NOPT.EQ.2) WRITE(6,6000) N,SHU(IV)	TWOPRT
	WRITE(6,6010) (CNAME1(I),I=1,NC)	TWOPRT
	WRITE(6,6030) (BAR,K=1,NC)	TWOPRT
	WRITE(6,6040) (FEEDN(I),I=1,NC)	TWOPRT
	WRITE(6,6050) (FLOWT(I),I=1,NC)	TWOPRT
	WRITE(6,6060)	TWOPRT
	DO 110 K=1,KRC	TWOPRT
	WRITE(6,6070) K,(PROCT(K,J),J=1,NC)	TWOPRT
110	CONTINUE	TWOPRT
	WRITE(6,6080) (PTOTL(J),J=1,NC)	TWOPRT
	WRITE(6,6090)	TWOPRT
	DO 120 K=1,KRC	TWOPRT
	WRITE(6,6070) K,(CONPT(K,J),J=1,NC)	TWOPRT
120	CONTINUE	TWOPRT
	WRITE(6,6080) (CTOTL(J),J=1,NC)	TWOPRT
130	CONTINUE	TWOPRT
	RETURN	TWOPRT
	END	TWOPRT

計算例 1

1. 計算目的

Pu精製サイクル (Ext. Ⅷ, IX) におけるPNCフローシート条件の定常計算を行なう。

2. 計算内容

付図 3.1 に示すフローシート条件で定常計算する。

3. 載録データ

(1) データ入力仕様

(2) インプットデータリスト

(3) 定常状態における各段の濃度計算結果

(4) 同上のプロットアウト結果

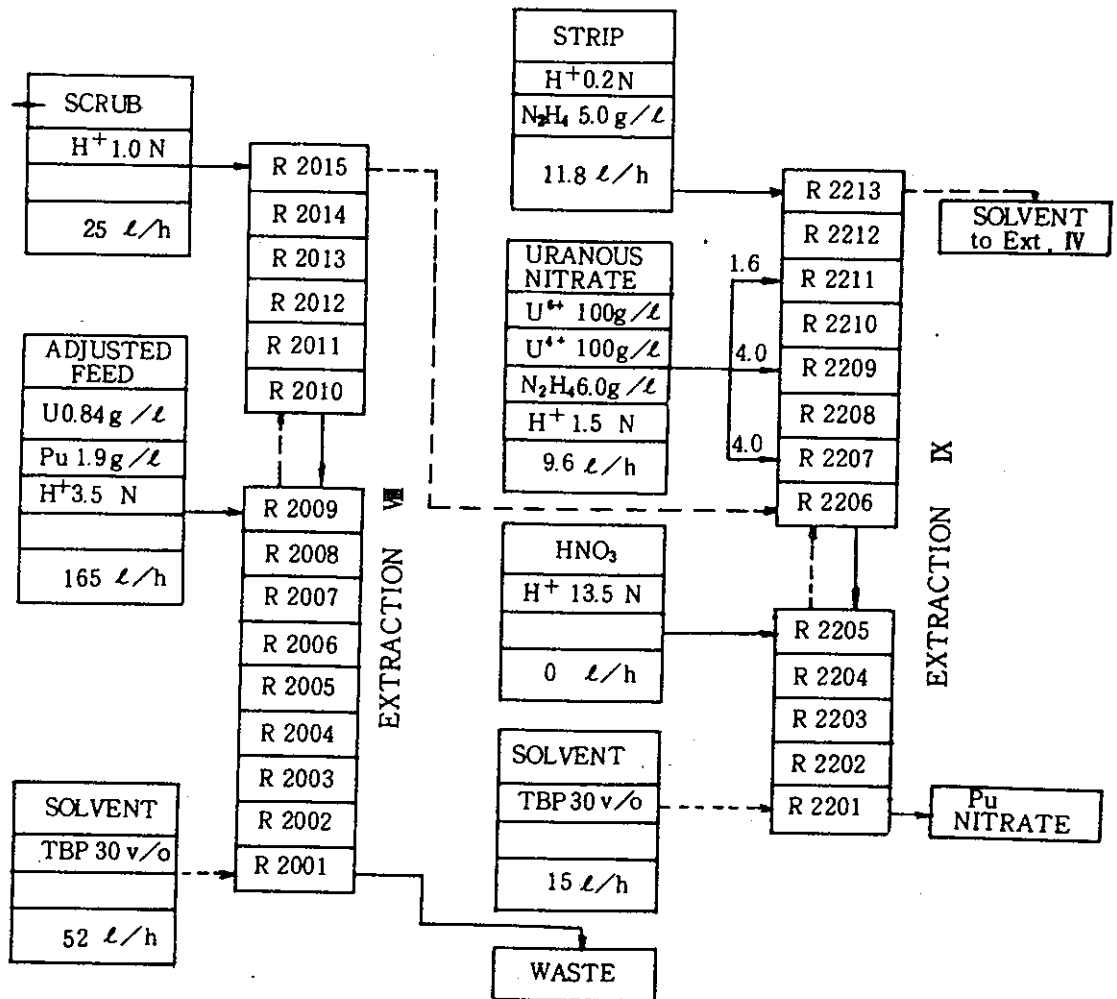
付図 3.2 Ext. IX水相の H^+ , Pu(IV), Pu(III)の濃度プロファイル

付図 3.3 Ext. IX水相の H^+ , U(VI), U(IV)の濃度プロファイル

付図 3.4 Ext. IX有機相の H^+ , Pu(IV), Pu(III)の濃度プロファイル

付図 3.5 Ext. IX有機相の H^+ , U(VI), U(IV)の濃度プロファイル

(5) 化学反応に伴う各化学種の物質収支



付図 3.1 計算例 1 のフローシート

```

*****
* S.G.N. NORMAL FLOW SHEET    STEADY STATE
STAGE 2,15,13,6
VOLUME 5,4R9,3,08R6,1,3R5,3,08R8 , 30,73R9,12,47R6,5,09R5,12,47R8
COMPONENT 7,2,3,7
-----
FEEDS(1,1,-1) 0,52,0R7
FEEDS(2,1, 9) 0,165,3,5,0,84,1,9,0R4
FEEDS(3,1,15) 0,25,1,0R6
FEEDS(4,2,-1) 0,15,0R7
FEEDS(5,2, 7) 0,4,0,1,5,100,0,0,100,0,6
FEEDS(6,2, 9) 0,4,0,1,5,100,0,0,100,0,6
-----
FEEDS(7,2,11) 0,1,6,1,5,100,0,0,100,0,6
FEEDS(8,2,13) 0,11,8,0,2,0R5,5
SPLOT (0,3,2,2,1,2,5) (0,3,2,2,1,3,4) (0,4,2,2,2,3,4,5)  ?
      (0,3,2,2,-1,-2,-5) (0,3,2,2,-1,-3,-4) (0,4,2,2,-2,-3,-4,-5)
COIST (1,6,10) (1,7,0) (2,6,10) (2,7,0)
INITIAL(1,1,1) 3,13,3,31,3,32R6,3,31,1,80,1,29,1,10,1,02,1,1
INITIAL(2,1,1) 0,75,0,92,0,98,1R3,0,98,0,96,0,92,0,86,0,77,0,64,0,46
-----
CONTROL 14,0,2
BEGIN

```

INPUT DATA LIST

STAGE SPECIFICATION

NUMBER OF BANKS = 2 NUMBER OF STAGES IN BANK = 15 13

RANK	STAGE	VOLUME		FEED STREAM INDEX		RECYCLE FLOW RATE (L/HR)	INITIAL LEVEL HEIGHT	LEVEL HEIGHT TABLE INDEX	RANK LINKAGE INDEX
		MIXER (L)	SETTLER (L)	AQUEOUS	ORGANIC				
1	1	5.40E+00	3.07E+01	0	1	0.	.50	0	
1	2	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	3	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	4	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	5	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	6	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	7	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	8	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	9	5.40E+00	3.07E+01	2	0	0.	.50	0	
1	10	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	11	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	12	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	13	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	14	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	15	3.08E+00	1.25E+01	3	0	0.	.50	0	
2	1	1.30E+00	5.09E+00	0	0	0.	.50	0	
2	2	1.30E+00	5.09E+00	0	0	0.	.50	0	
2	3	1.30E+00	5.09E+00	0	0	0.	.50	0	
2	4	1.30E+00	5.09E+00	0	0	0.	.50	0	
2	5	1.30E+00	5.09E+00	0	0	0.	.50	0	
2	6	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	7	3.08E+00	1.25E+01	5	0	0.	.50	0	**
2	8	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	9	3.08E+00	1.25E+01	6	0	0.	.50	0	
2	10	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	11	3.08E+00	1.25E+01	7	0	0.	.50	0	
2	12	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	13	3.08E+00	1.25E+01	8	0	0.	.50	0	

COMPONENT SPECIFICATION

NCOMP= 7 ICOMP= 2 NDCAL= 3 7

BANK	COMPONENT NO.	COMPONENT SPECIFICATION						
		1	2	3	4	5	6	7
	NAME	HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	U(IV)	HNO2	HYD
	UNIT	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)
	CONVERSION RATIO	1.000E+00	4.202E-03	4.184E-03	4.184E-03	4.202E-03	1.000E+00	3.125E-02
	CHARGE	1.00	2.00	2.00	3.00	4.00	0.00	1.00
	EXTRACTION	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	STATUS							
	DB.COEFF. OPTION	0	0	0	0	0	200	200
1	REACTION OPTION	0	0	0	0	0	0	0
	DB.COEFF. OPTION	0	0	0	0	0	200	200
2	REACTION OPTION	-2	-2	-2	-2	-2	-2	-2

FEED STREAMS

NO.	BANK	STAGE	PHASE	TIME (HR)	FLOW RATE (L/HR)	SOLUTE CONCENTRATIONS					HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
						HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)		
1	1	1	ORG.	0.000	5.200E+01	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
2	1	9	AQU.	0.000	1.650E+02	3.500E+00	8.400E-01	1.900E+00	0.	0.	0.	0.
3	1	15	AQU.	0.000	2.500E+01	1.000E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.
4	2	1	ORG.	0.000	1.500E+01	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
5	2	7	AQU.	0.000	4.000E+00	1.500E+00	1.000E+02	0.	0.	1.000E+02	0.	6.000E+00
6	2	9	AQU.	0.000	4.000E+00	1.500E+00	1.000E+02	0.	0.	1.000E+02	0.	6.000E+00
7	2	11	AQU.	0.000	1.600E+00	1.500E+00	1.000E+02	0.	0.	1.000E+02	0.	6.000E+00
8	2	13	AQU.	0.000	1.180E+01	2.000E-01	0.	0.	0.	0.	0.	5.000E+00

DISTRIBUTION COEFFICIENTS

** DBCNT (CONSTANT)	BANK	COMPONENT						
		1	2	3	4	5	6	7
	1	0.	0.	0.	0.	0.	1.00E+01	0.
	2	0.	0.	0.	0.	0.	1.00E+01	0.

REACTION RATE CONSTANTS

		COMPONENT NO.						
		1	2	3	4	5	6	7
BANK 1	AQ.PHASE	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
	OG.PHASE	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
BANK 2	AQ.PHASE	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
	OG.PHASE	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.

CONTROL DATA

TAU(1) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 1
 TAU(2) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 2
 TAU(3) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 3
 ICALC = 14 0/1/2/3/4 : TRANSIENT ONLY/EITPC1/EITPC2/STOYF1/STOYR2 (SUCCESSIVE TRANSIENT CALC. IF NEGATIVE)
 IFLOW = 0 0/1/2/3 : CONST.FEED IF ZERO, VARIABLE FEED IF POSITIVE.
 INCON = 2 0/1/2/3 : ZERO/PREVIOUS PROB./INPUT X4/INPUT ALL FOR INITIAL CONCENTRATIONS
 CTBP = .300000 TRP VOLUME FRACTION
 CTBPM = 1.096132 TRP MOLALITY(MOL/L)
 EPSTR(1)=1.00E-05 EPSTR(2)=1.00E-04 EPSTR(3)=1.00E-03 EPSTR(4)=1.00E-03 EPSTR(5)=2.00E+02
 EPSTR(6)=1.50E+02 EPSTR(7)=1.50E+02 EPSTR(8)=1.50E+02 EPSTR(9)=1.00E-03 EPSTR(10)=1.00E-06

INITIAL AQUEOUS CONCENTRATIONS FOR INTERACTIVE COMPONENTS

(1, 1)	3.13E+00	3.31E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.31E+00	1.80E+00	1.29E+00	1.10E+00
	1.02E+00	1.00E+00	1.00E+00									
(2, 1)	7.50E-01	9.20E-01	9.80E-01	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00	9.80E-01	9.60E-01	9.20E-01	8.60E-01	7.70E-01	6.40E-01
	4.60E-01											

S.G.N. NORMAL FLOW SHEET STEADY STATE

01/20/79 PAGE 3

* PRINTOUT TIMES = 0.0 0

* STAGE PROFILE PLOT

TIME = 0.00	L PLOT = 3	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = 1	2	5
TIME = 0.00	L PLOT = 3	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = 1	3	4
TIME = 0.00	L PLOT = 4	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = 2	3	4
TIME = 0.00	L PLOT = 3	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = -1	-2	-5
TIME = 0.00	L PLOT = 3	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = -1	-3	-4
TIME = 0.00	L PLOT = 4	BANK = 2	LP SCL = 2	COMPONENT = -2	-3	-4
						-5

PNCT 841-79-26

S.G.N. NORMAL FLOW SHEET STEADY STATE
 FLOW RATES AND PHASE VOLUMES AT TIME = 0.001(HR)

01/20/79

PAGE 4

BANK	STAGE	VOLUME OF MIXER			VOLUME OF SETTLER			FLOW RATE(L/HR)		PHASE RATIO
		TOTAL	AQUEOUS	(L) ORGANIC	TOTAL	AQUEOUS	(L) ORGANIC	AQUEOUS	ORGANIC	
1	1	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	2	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	3	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	4	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	5	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	6	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	7	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	8	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	9	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	10	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	11	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	12	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	13	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	14	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	15	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
2	1	1.3000	.7643	.5357	5.0900	2.5450	2.5450	21.4000	15.0000	1.4267
2	2	1.3000	.7643	.5357	5.0900	2.5450	2.5450	21.4000	15.0000	1.4267
2	3	1.3000	.7643	.5357	5.0900	2.5450	2.5450	21.4000	15.0000	1.4267
2	4	1.3000	.7643	.5357	5.0900	2.5450	2.5450	21.4000	15.0000	1.4267
2	5	1.3000	.7643	.5357	5.0900	2.5450	2.5450	21.4000	15.0000	1.4267
2	6	3.0800	.7456	2.3344	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	67.0000	.3194
2	7	3.0800	.7456	2.3344	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	67.0000	.3194
2	8	3.0800	.6350	2.4450	12.4700	6.2350	6.2350	17.4000	67.0000	.2597
2	9	3.0800	.6350	2.4450	12.4700	6.2350	6.2350	17.4000	67.0000	.2597
2	10	3.0800	.5133	2.5667	12.4700	6.2350	6.2350	13.4000	67.0000	.2000
2	11	3.0800	.5133	2.5667	12.4700	6.2350	6.2350	13.4000	67.0000	.2000
2	12	3.0800	.4612	2.6188	12.4700	6.2350	6.2350	11.8000	67.0000	.1761
2	13	3.0800	.4612	2.6188	12.4700	6.2350	6.2350	11.8000	67.0000	.1761

* SUCCESS TO CONVERGE IN EITRC1, IT= 14 NB=1 I=13 J=3 EMAX= 7.7014E-06

** SUCCESS TO CONVERGE IN STOYR2, IT= 72 NB=2 I= 1 J=5 EMAX= 9.3889E-04

CONCENTRATION PROFILE AT TIME = 0.00(HR)

AQUEOUS MIXER		HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	U(IV)	HNO2	HYD
BANK	STAGE	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)
1	1	3.119E+00	6.181E-09	4.229E-05	0.	0.	0.	0.
1	2	3.302E+00	5.288E-08	1.682E-04	0.	0.	0.	0.
1	3	3.311E+00	4.275E-07	5.821E-04	0.	0.	0.	0.
1	4	3.311E+00	3.421E-06	1.917E-03	0.	0.	0.	0.
1	5	3.311E+00	2.733E-05	6.217E-03	0.	0.	0.	0.
1	6	3.311E+00	2.181E-04	2.005E-02	0.	0.	0.	0.
1	7	3.311E+00	1.738E-03	6.446E-02	0.	0.	0.	0.
1	8	3.310E+00	1.375E-02	2.057E-01	0.	0.	0.	0.
1	9	3.308E+00	1.063E-01	6.416E-01	0.	0.	0.	0.
1	10	1.966E+00	1.975E-01	1.436E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.441E+00	3.052E-01	2.391E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.202E+00	3.918E-01	3.176E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.088E+00	4.472E-01	3.649E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.033E+00	4.740E-01	3.734E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.007E+00	4.472E-01	3.064E+00	0.	0.	0.	0.
ORGANIC MIXER		HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	U(IV)	HNO2	HYD
BANK	STAGE	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)
1	1	6.698E-01	1.706E-07	4.600E-04	0.	0.	0.	0.
1	2	7.021E-01	1.540E-06	1.972E-03	0.	0.	0.	0.
1	3	7.035E-01	1.248E-05	6.850E-03	0.	0.	0.	0.
1	4	7.035E-01	9.983E-05	2.256E-02	0.	0.	0.	0.
1	5	7.033E-01	7.970E-04	7.312E-02	0.	0.	0.	0.
1	6	7.024E-01	6.349E-03	2.354E-01	0.	0.	0.	0.
1	7	6.995E-01	5.025E-02	7.516E-01	0.	0.	0.	0.
1	8	6.896E-01	3.885E-01	2.344E+00	0.	0.	0.	0.
1	9	6.549E-01	2.760E+00	6.719E+00	0.	0.	0.	0.
1	10	4.027E-01	2.812E+00	7.178E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	2.878E-01	2.854E+00	7.556E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	2.329E-01	2.880E+00	7.783E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	2.065E-01	2.893E+00	7.824E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.942E-01	2.880E+00	7.502E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.907E-01	2.665E+00	6.029E+00	0.	0.	0.	0.

AQUEOUS SETTLER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	3.119E+00	6.181E-09	4.229E-05	0.	0.	0.	0.
1	2	3.302E+00	5.288E-08	1.682E-04	0.	0.	0.	0.
1	3	3.311E+00	4.275E-07	5.821E-04	0.	0.	0.	0.
1	4	3.311E+00	3.421E-06	1.917E-03	0.	0.	0.	0.
1	5	3.311E+00	2.733E-05	6.217E-03	0.	0.	0.	0.
1	6	3.311E+00	2.181E-04	2.005E-02	0.	0.	0.	0.
1	7	3.311E+00	1.738E-03	6.446E-02	0.	0.	0.	0.
1	8	3.310E+00	1.375E-02	2.057E-01	0.	0.	0.	0.
1	9	3.308E+00	1.063E-01	6.416E-01	0.	0.	0.	0.
1	10	1.966E+00	1.975E-01	1.436E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.441E+00	3.052E-01	2.391E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.202E+00	3.918E-01	3.176E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.088E+00	4.472E-01	3.649E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.033E+00	4.740E-01	3.734E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.007E+00	4.472E-01	3.064E+00	0.	0.	0.	0.

ORGANIC SETTLER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	6.698E-01	1.705E-07	4.600E-04	0.	0.	0.	0.
1	2	7.021E-01	1.540E-06	1.972E-03	0.	0.	0.	0.
1	3	7.035E-01	1.248E-05	6.890E-03	0.	0.	0.	0.
1	4	7.035E-01	9.983E-05	2.256E-02	0.	0.	0.	0.
1	5	7.033E-01	7.970E-04	7.312E-02	0.	0.	0.	0.
1	6	7.024E-01	6.349E-03	2.354E-01	0.	0.	0.	0.
1	7	6.995E-01	5.025E-02	7.516E-01	0.	0.	0.	0.
1	8	6.896E-01	3.885E-01	2.344E+00	0.	0.	0.	0.
1	9	6.549E-01	2.760E+00	6.719E+00	0.	0.	0.	0.
1	10	4.827E-01	2.812E+00	7.178E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	2.878E-01	2.854E+00	7.556E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	2.329E-01	2.880E+00	7.783E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	2.055E-01	2.893E+00	7.824E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.942E-01	2.880E+00	7.502E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.907E-01	2.665E+00	6.029E+00	0.	0.	0.	0.

AQUEOUS MIXER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)	TOTAL PU (G/L)	TOTAL U (G/L)
2	1	1.143E+00	3.311E-02	2.338E-01	1.441E+01	1.507E-01	0.	4.766E+00	1.469E+01	1.838E-01
2	2	1.336E+00	8.039E-02	2.772E-01	1.545E+01	4.205E-01	0.	4.840E+00	1.572E+01	5.009E-01
2	3	1.366E+00	1.500E-01	2.337E-01	1.583E+01	9.678E-01	0.	4.926E+00	1.607E+01	1.118E+00
2	4	1.365E+00	2.379E-01	1.434E-01	1.581E+01	1.794E+00	0.	5.014E+00	1.595F+01	2.032E+00
2	5	1.355E+00	3.931E-01	7.487E-02	1.555E+01	2.805E+00	0.	5.099E+00	1.562E+01	3.198E+00
2	6	1.335E+00	3.432E-01	3.998E-01	1.495E+01	4.706E+00	0.	5.274E+00	1.535E+01	5.050E+00
2	7	1.550E+00	7.387E-01	3.031E-02	8.317E+00	1.469E+01	0.	5.402E+00	8.347E+00	1.542E+01
2	8	1.598E+00	7.848E-01	9.463E-04	1.858E+00	1.872E+C1	C.	5.313E+00	1.859E+00	1.951E+01
2	9	1.584E+00	1.217E+00	4.298E-05	2.713E-01	2.771E+01	0.	5.321E+00	2.713E-01	2.893E+01
2	10	1.456E+00	1.344E+00	3.563E-06	4.383E-02	3.027E+01	0.	5.119E+00	4.384E-02	3.162E+01
2	11	1.294E+00	1.687E+00	3.573E-07	7.001E-03	3.506E+01	0.	5.119E+00	7.001E-03	3.675E+01
2	12	1.013E+00	2.089E+00	3.212E-08	1.209E-03	3.953E+C1	0.	5.000E+00	1.209E-03	3.762E+01
2	13	6.631E-01	3.241E+00	2.727E-09	1.871E-04	2.696E+C1	0.	5.000E+00	1.871E-04	3.020E+01

ORGANIC MIXER										
BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)	TOTAL PU (G/L)	TOTAL U (G/L)
2	1	2.742E-01	4.076E-01	9.733E-01	5.638E-01	4.480E-02	0.	0.	1.537E+00	4.524E-01
2	2	3.214E-01	1.180E+00	1.397E+00	6.287E-01	1.528E-01	0.	0.	2.025E+00	1.333E+00
2	3	3.276E-01	2.272E+00	1.219E+00	6.445E-01	3.657E-01	0.	0.	1.864E+00	2.638E+00
2	4	3.256E-01	3.618E+00	7.520E-01	6.401E-01	6.828E-01	0.	0.	1.392E+00	4.301E+00
2	5	3.189E-01	5.890E+00	3.871E-01	6.170E-01	1.053E+00	0.	0.	1.004E+00	6.943E+00
2	6	3.128E-01	5.158E+00	2.075E+00	5.907E-01	1.777E+00	0.	0.	2.666E+00	6.934E+00
2	7	3.404E-01	1.231E+01	1.808E-01	3.020E-01	6.705E+00	0.	0.	4.828E-01	1.902E+01
2	8	3.421E-01	1.298E+01	5.558E-03	6.491E-02	8.479E+00	0.	0.	7.047E-02	2.146E+01
2	9	3.169E-01	1.954E+01	2.477E-04	8.525E-03	1.267E+01	0.	0.	8.773E-03	3.221E+01
2	10	2.921E-01	2.050E+01	1.933E-05	1.386E-03	1.274E+01	0.	0.	1.406E-03	3.324E+01
2	11	2.556E-01	2.390E+01	1.790E-06	2.163E-04	1.339E+01	0.	0.	2.181E-04	3.729E+01
2	12	2.033E-01	2.520E+01	1.339E-07	3.804E-05	1.079E+01	0.	0.	3.818E-05	3.599E+01
2	13	1.295E-01	2.555E+01	7.191E-09	5.212E-06	5.120E+00	0.	0.	5.220E-06	3.067E+01

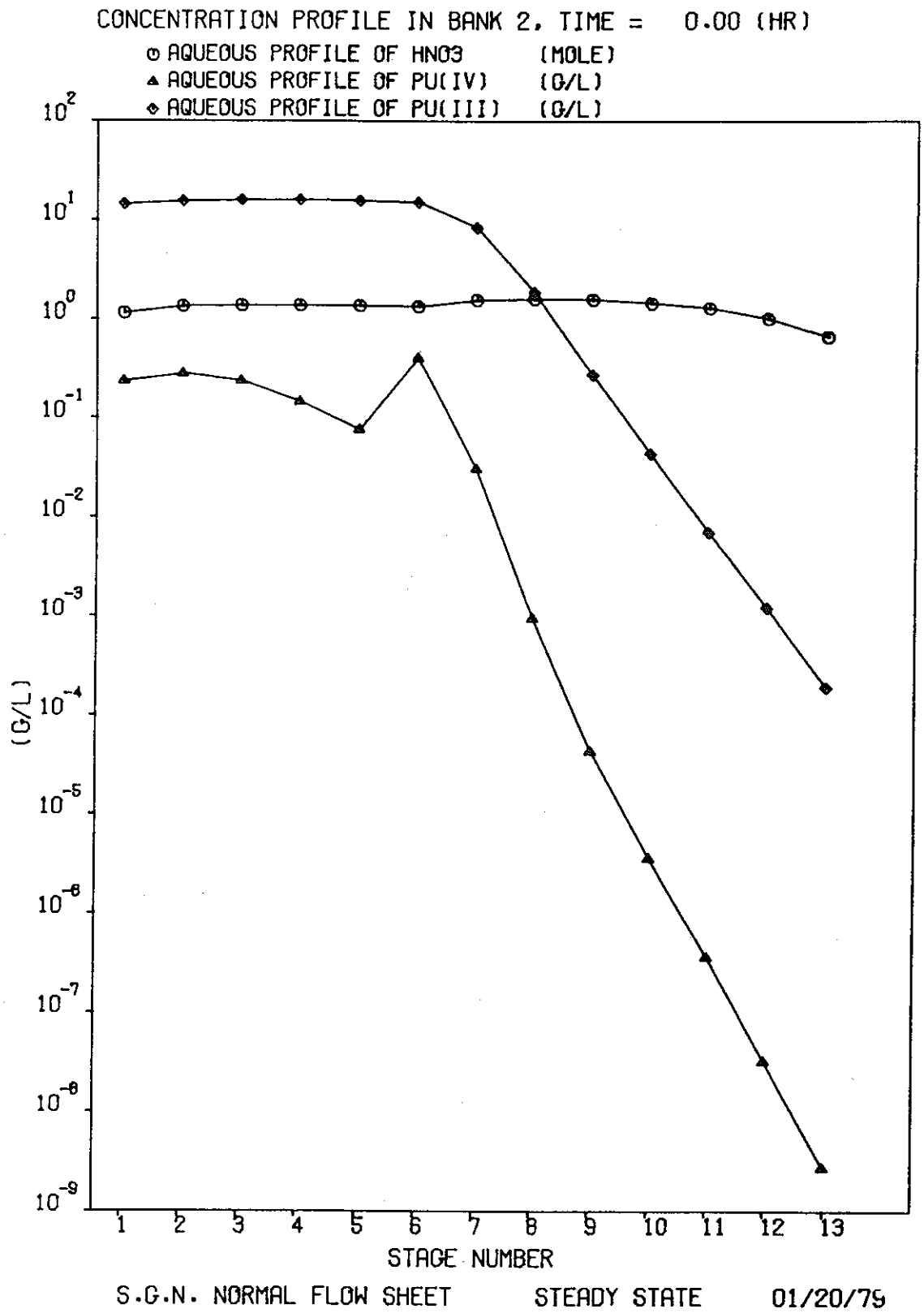
AQUEOUS SETTLER										
BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)	TOTAL PU (G/L)	TOTAL U (G/L)
2	1	1.141E+00	1.160E-01	7.189E-01	1.394E+01	6.778E-02	0.	4.723E+00	1.465E+01	1.838E-01
2	2	1.335E+00	2.881E-01	7.759E-01	1.495E+01	2.128E-01	0.	4.779E+00	1.572E+01	5.009E-01
2	3	1.368E+00	5.133E-01	5.012E-01	1.557E+01	6.045E-01	0.	4.860E+00	1.607E+01	1.118E+00
2	4	1.368E+00	6.764E-01	2.691E-01	1.569E+01	1.356E+00	0.	4.946E+00	1.595E+01	2.032E+00
2	5	1.359E+00	8.424E-01	1.562E-01	1.547E+01	2.355E+00	0.	5.034E+00	1.562E+01	3.198E+00
2	6	1.347E+00	1.646E+00	1.254E-01	1.523E+01	3.404E+00	0.	5.119E+00	1.535E+01	5.050E+00
2	7	1.557E+00	1.591E+00	2.626E-02	8.321E+00	1.383E+01	0.	5.292E+00	8.347E+00	1.542E+01
2	8	1.600E+00	1.081E+00	4.823E-03	1.854E+00	1.843E+01	0.	5.281E+00	1.859E+00	1.951E+01
2	9	1.585E+00	1.344E+00	4.542E-04	2.709E-01	2.759E+01	0.	5.316E+00	2.713E-01	2.893E+01
2	10	1.457E+00	1.495E+00	4.899E-05	4.379E-02	3.012E+01	0.	5.118E+00	4.384E-02	3.162E+01
2	11	1.296E+00	1.875E+00	4.338E-06	6.997E-03	3.487E+01	0.	5.119E+00	7.001E-03	3.675E+01
2	12	1.015E+00	2.365E+00	2.930E-07	1.209E-03	3.526E+01	0.	5.000E+00	1.209E-03	3.762E+01
2	13	6.658E-01	3.559E+00	1.211E-08	1.871E-04	2.664E+01	0.	5.000E+00	1.871E-04	3.020E+01

ORGANIC SETTLER										
BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	U(IV) (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)	TOTAL PU (G/L)	TOTAL U (G/L)
2	1	2.747E-01	4.363E-01	9.188E-01	6.183E-01	1.609E-02	0.	0.	1.537E+00	4.524E-01
2	2	3.230E-01	1.276E+00	1.213E+00	6.119E-01	5.666E-02	0.	0.	2.025E+00	1.333E+00
2	3	3.307E-01	2.469E+00	8.527E-01	1.011E+00	1.690E-01	0.	0.	1.864E+00	2.638E+00
2	4	3.293E-01	3.856E+00	3.511E-01	1.041E+00	4.454E-01	0.	0.	1.392E+00	4.301E+00
2	5	3.217E-01	6.097E+00	1.183E-01	8.858E-01	8.462E-01	0.	0.	1.004E+00	6.943E+00
2	6	3.239E-01	5.843E+00	8.023E-01	1.864E+00	1.091E+00	0.	0.	2.666E+00	6.934E+00
2	7	3.441E-01	1.268E+01	1.972E-02	4.631E-01	6.342E+00	0.	0.	4.828E-01	1.902E+01
2	8	3.452E-01	1.339E+01	4.882E-04	6.998E-02	8.114E+00	0.	0.	7.047E-02	2.146E+01
2	9	3.218E-01	2.012E+01	1.316E-05	8.759E-03	1.210E+01	0.	0.	8.773E-03	3.221E+01
2	10	2.973E-01	2.111E+01	8.815E-07	1.405E-03	1.213E+01	0.	0.	1.406E-03	3.324E+01
2	11	2.617E-01	2.462E+01	6.123E-08	2.181E-04	1.268E+01	0.	0.	2.181E-04	3.729E+01
2	12	2.091E-01	2.589E+01	3.699E-09	3.817E-05	1.009E+01	0.	0.	3.818E-05	3.599E+01
2	13	1.334E-01	2.602E+01	1.761E-10	5.219E-06	4.660E+00	0.	0.	5.220E-06	3.067E+01

REACTION BALANCES OF BANK 2		PU-U(IV) REACTION							TOTAL PU	TOTAL U
	HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	U(IV)	HNO2	HYD			
FEED IN	2.668E+01	1.099E+03	3.135E+02	0.	9.600E+02	0.	1.166E+02	3.135E+02	2.059E+03	
FLOW OUT	3.336E+01	1.746E+03	1.521E+01	2.982E+02	3.130E+02	0.	1.011E+02	3.134E+02	2.059E+03	
PRODUCTION										
R-1	4.437E+00	2.640E+02	0.	5.303E+02	0.	0.	0.	5.303E+02	2.640E+02	
R-2	0.	0.	2.320E+02	0.	0.	4.854E-01	0.	2.320E+02	0.	
R-3	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
R-4	3.219E+00	3.830E+02	0.	0.	0.	0.	0.	0.	3.830E+02	
R-5	4.854E-01	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
TOTAL	8.142E+00	6.470E+02	2.320E+02	5.303E+02	0.	4.854E-01	0.	7.623E+02	6.470E+02	
CONSUMPTION										
R-1	0.	0.	5.303E+02	0.	2.640E+02	0.	0.	5.303E+02	2.640E+02	
R-2	1.456E+00	0.	0.	2.320E+02	0.	0.	0.	2.320E+02	0.	
R-3	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
R-4	0.	0.	0.	0.	3.830E+02	0.	0.	0.	3.830E+02	
R-5	0.	0.	0.	0.	0.	4.854E-01	1.553E+01	0.	0.	
TOTAL	1.456E+00	0.	5.303E+02	2.320E+02	6.470E+02	4.854E-01	1.553E+01	7.623E+02	6.470E+02	

単位 HNO₃, HNO₂ : mole/h その他 : g/h

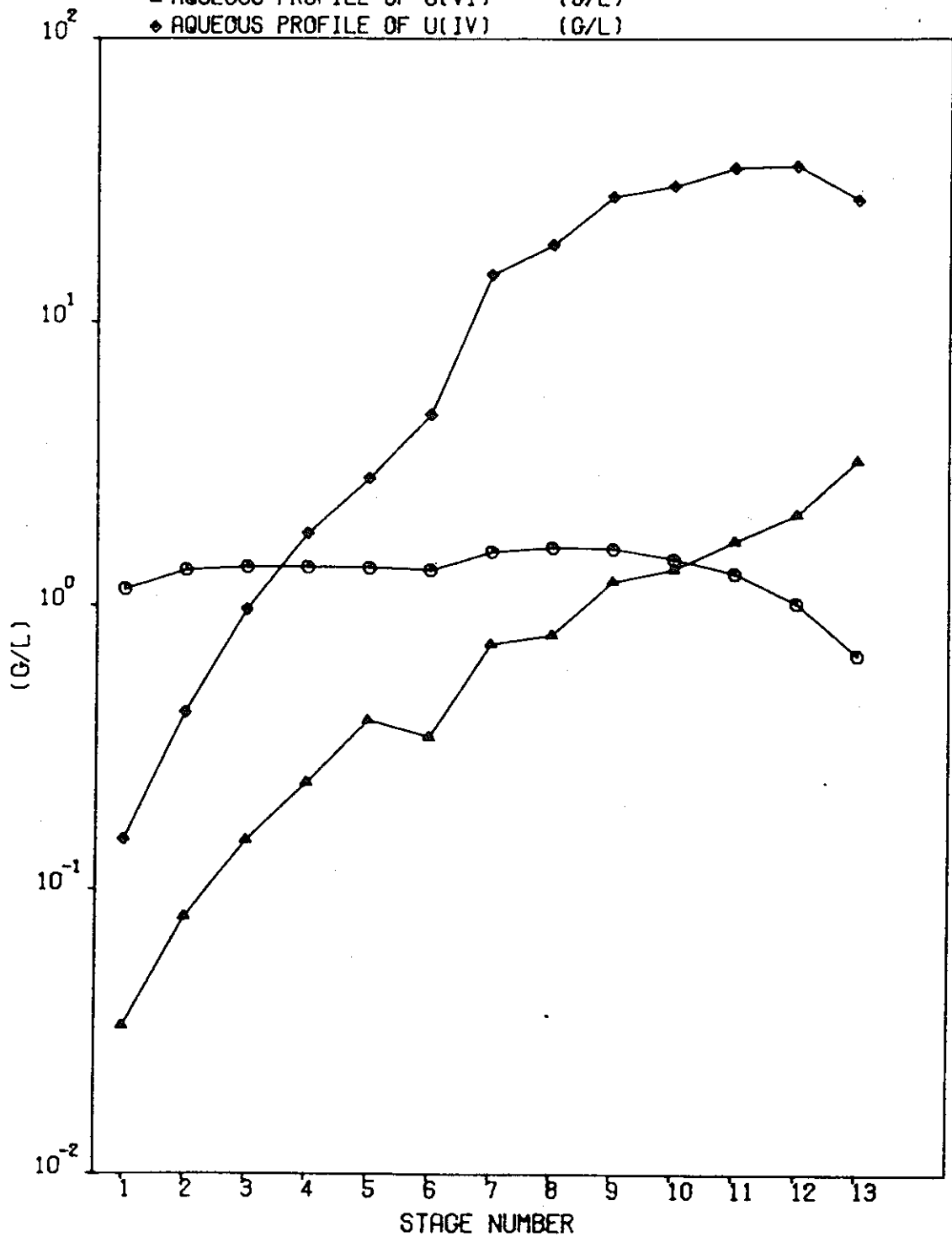
記号の説明
 R-1 : Pu(IV)の還元反応
 R-2 : Pu(III)の酸化反応
 R-3 : U(IV)のHNO₃酸化反応
 R-4 : U(IV)の空気酸化反応
 R-5 : HNO₃の分解反応



付図 3.2 Ext. IX水相のH⁺, Pu(IV), Pu(III)の濃度プロフィール

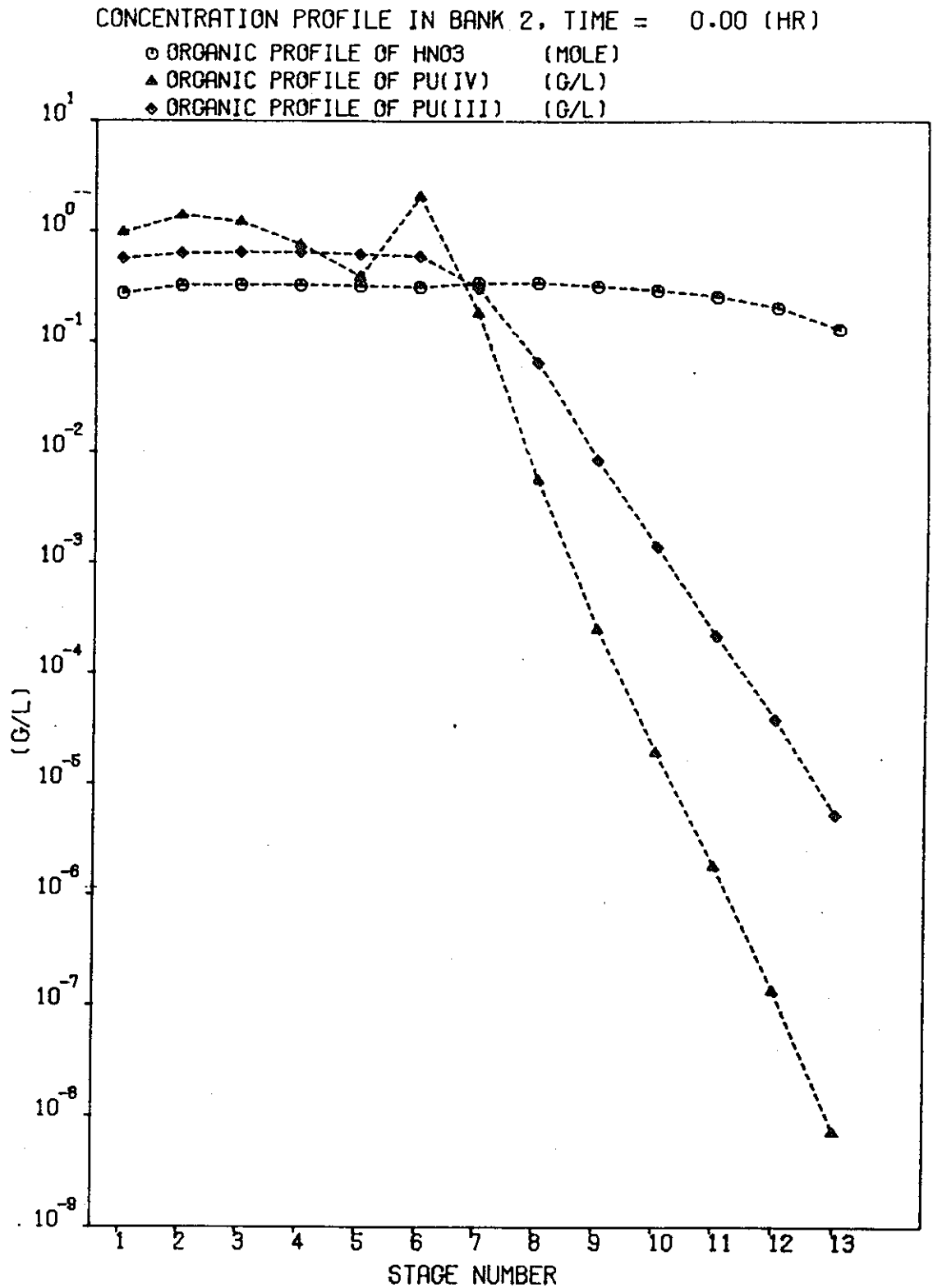
CONCENTRATION PROFILE IN BANK 2, TIME = 0.00 (HR)

- AQUEOUS PROFILE OF HNO₃ (MOLE)
- ▲ AQUEOUS PROFILE OF U(VI) (G/L)
- ◆ AQUEOUS PROFILE OF U(IV) (G/L)



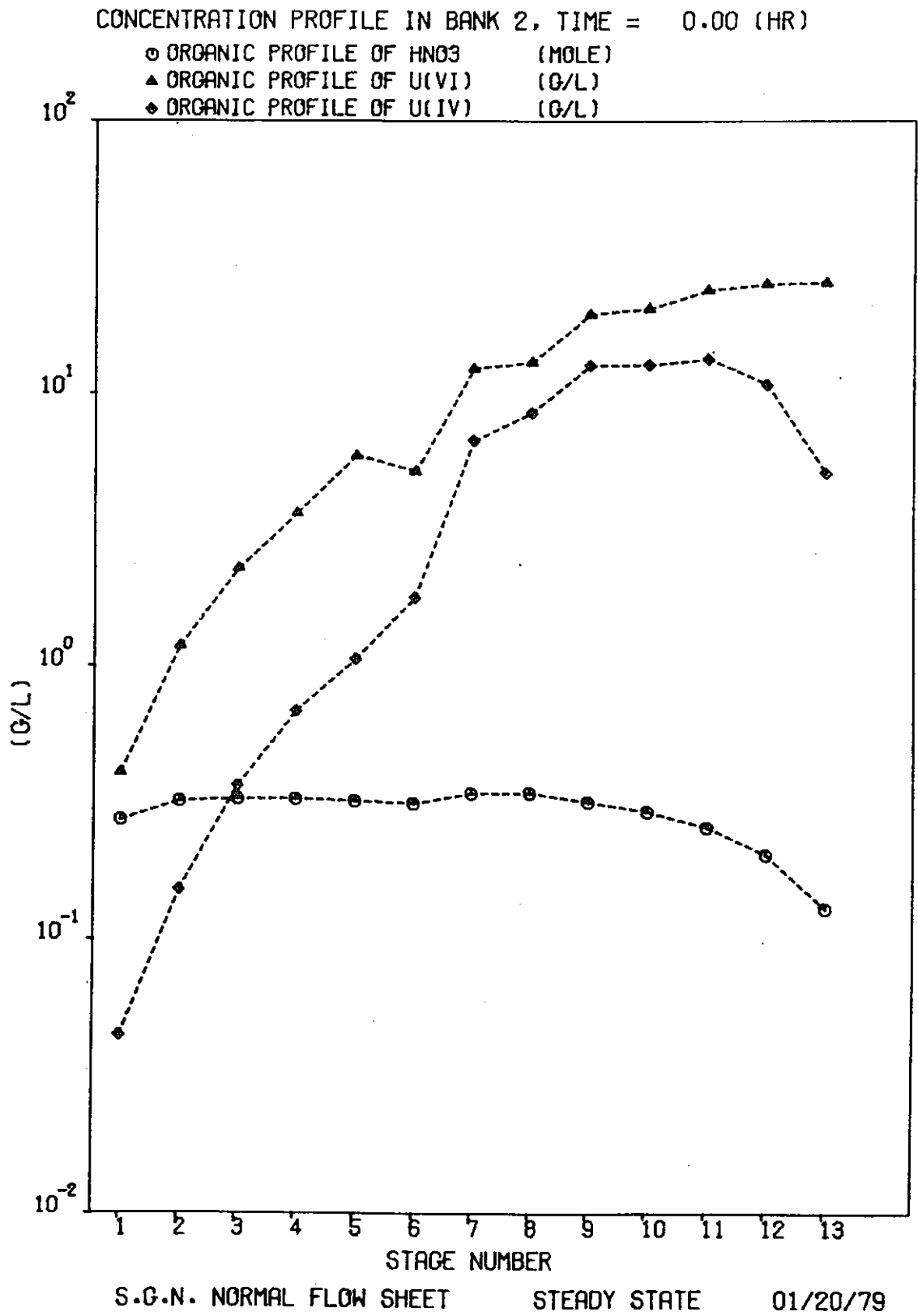
S.G.N. NORMAL FLOW SHEET STEADY STATE 01/20/79

付図 3.3 Ext. IX水相のH⁺, U(VI), U(IV)の濃度プロフィール



S.G.N. NORMAL FLOW SHEET STEADY STATE 01/20/79

付図 3.4 Ext. IX有機相のH⁺, Pu(IV), Pu(III)の濃度プロフィール



付図 3.5 Ext. IX有機相のH⁺, U(VI), U(IV)の濃度プロフィール

計算例 2

1. 計算目的

Pu 精製サイクル (Ext. VIII, IX) におけるPNCフローシート条件の過渡計算を行なう。

2. 計算内容

Ext. VIII, IXの酸平衡状態からスタートして、付図 3.1 に示すフィード条件で10時間までを過渡計算する。

3. 載録データ

(1) データ入力仕様

(2) 過渡的濃度変化のプロットアウト結果

付図 3.6 Ext. IX 1 段目水相の H^+ , Pu(III), U(VI), U(IV)の濃度変化

付図 3.7 Ext. IX 13 段目有機相の H^+ , Pu(IV), U(VI), U(IV)の濃度変化

インプットデータリストと30分おきに計算した各段の濃度計算結果は省略した。

* S.G.N. NORMAL FLOW SHEET ACID EQUIL. - TRANSIENT CALCU.

STAGE 2,15,13,6

VOLUME 5.4R9,3.08R6,1.3R5,3.08R8 ; 30.73R9,12.47R6,5.09R5,12.47R8

COMPONENT 7,2,3,7

FEEDS(1,1,-1) 0,52,0R7 1-3,52,0R7

FEEDS(2,1, 9) 0,165,3.5,0R6 1-3,165,3.5,0.84,1.9,0R4

FEEDS(3,1,15) 0,25,1,0R6 1-3,25,1,0R6

FEEDS(4,2,-1) 0,15,0R7 1-3,15,0R7

FEEDS(5,2, 7) 0,0R8, 1-3,4.0,1.5,100,0,0,100,0,6

FEEDS(6,2, 9) 0,0R8, 1-3,4.0,1.5,100,0,0,100,0,6

FEEDS(7,2,11) 0,0R8, 1-3,1.6,1.5,100,0,0,100,0,6

FEEDS(8,2,13) 0,11.8,0.2,0R5,5 1-3,11.8,0.2,0R5,5

REACTION (2,2)

COIST (1,6,10) (1,7,0) (2,6,10) (2,7,0)

INITIAL(1,1,1) 3.13,3.31,3.32R6,3.31,1.80,1.29,1.10,1.02,1,1

INITIAL(2,1,1) 0.75,0.92,0.98,1R3,0.98,0.96,0.92,0.86,0.77,0.64,0.46

TPLOT (2,1,1,1,1) (2,1,2,1,2) (2,1,4,1,2) (2,1,5,1,2) \$

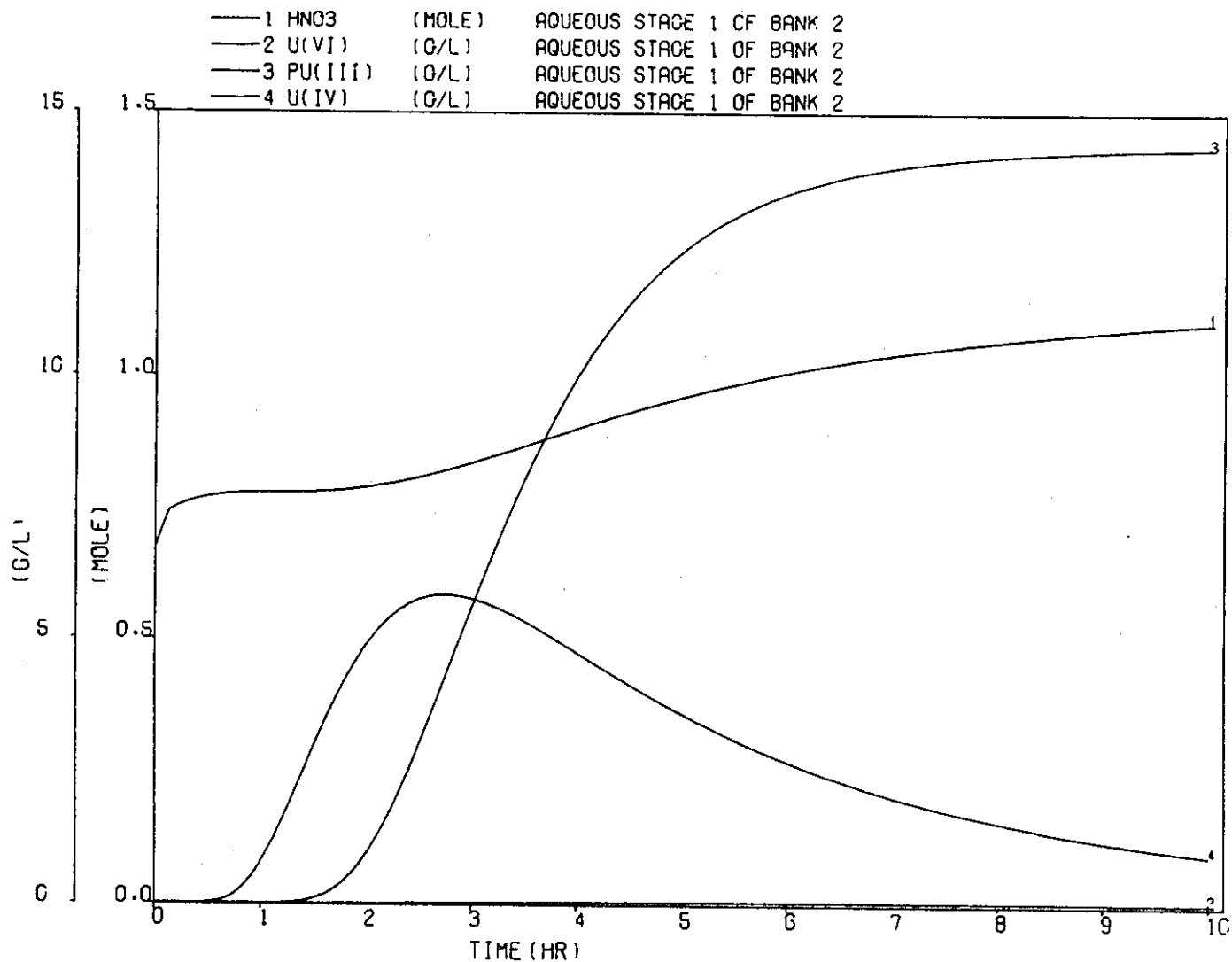
(2,-13,1,2,1) (2,-13,2,2,2) (2,-13,3,2,2) (2,-13,5,2,2)

TAU 0.020,0.03125

PRINT (0.5,-1) (9.5,18) (10,-1)

CONTROL -11,1,2,10,250.

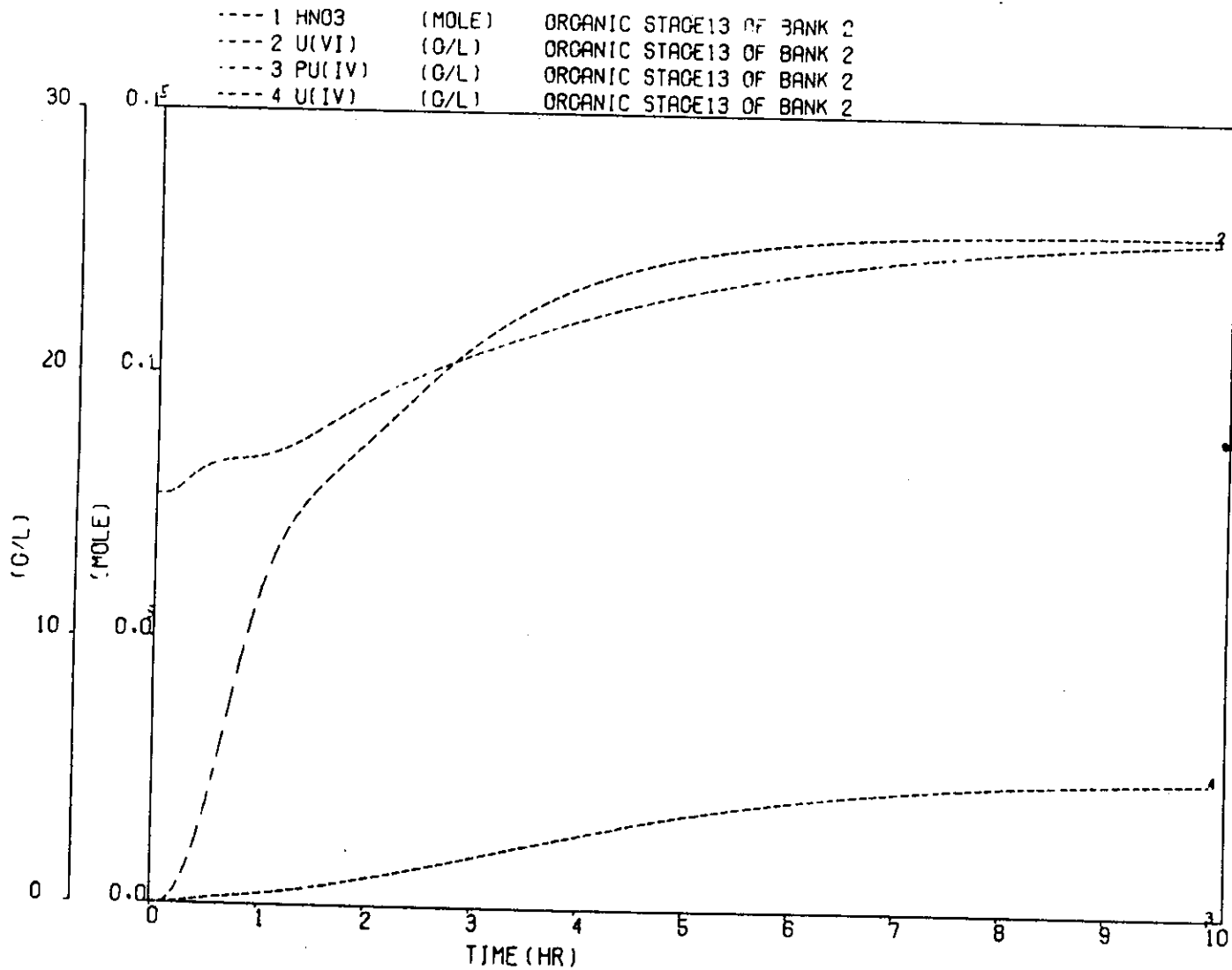
BEGIN



S.G.N. NORMAL FLOW SHEET ACID EQUIL. - TRANSIENT CALCUL.

01/24/79

付図 3.6 Ext. IX 1 段目水相の H⁺, Pu(III), U(VI), U(IV) の濃度変化



S.G.N. NORMAL FLOW SHEET ACID EQUIL. - TRANSIENT CALCUL.

01/24/79

付図 3.7 Ext. IX 13 段目有機相のH⁺, Pu(IV), U(VI), U(IV)の濃度変化

計算例 3

1. 計算目的

Pu 精製サイクル (Ext. VII, IX) の誤動作試験として、 N_2H_4 を添加せずに PNC フローシート条件を実施した場合の過渡計算を行なう。

2. 計算内容

計算例 1 に示す定常状態からスタートして、Uranous Nitrate と Pu Strip の N_2H_4 濃度を $0g/l$ にして供給した時 (付図 3.8) の濃度変化を 10 時間まで過渡計算する。

3. 載録データ

(1) データ入力仕様

(2) 過渡的濃度変化のプロットアウト結果

付図 3.9 Ext. IX 1 段目水相の H^+ , Pu(IV), Pu(III), N_2H_4 の濃度変化

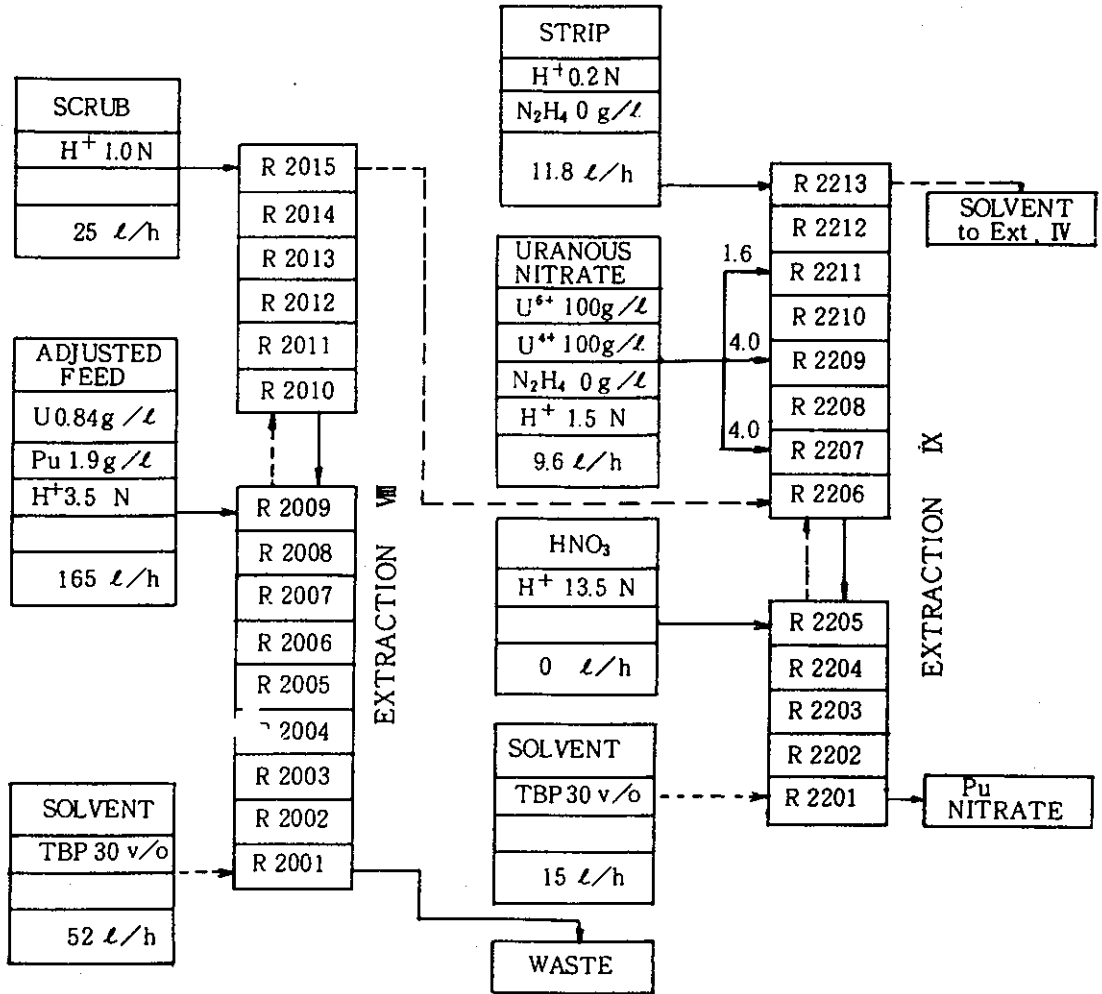
付図 3.10 Ext. IX 6 段目水相の H^+ , Pu(IV), Pu(III), U(IV) の濃度変化

付図 3.11 Ext. IX 6 段目有機相の H^+ , Pu(IV), Pu(III), U(IV) の濃度変化

付図 3.12 Ext. IX 13 段目有機相の Pu(IV), Pu(III), U(VI), U(IV) の濃度変化

付図 3.13 Ext. IX 13 段目有機相の H^+ , HNO_2 の濃度変化

インプットデータリストと 30 分おきに計算した各段の濃度計算結果は省略した。

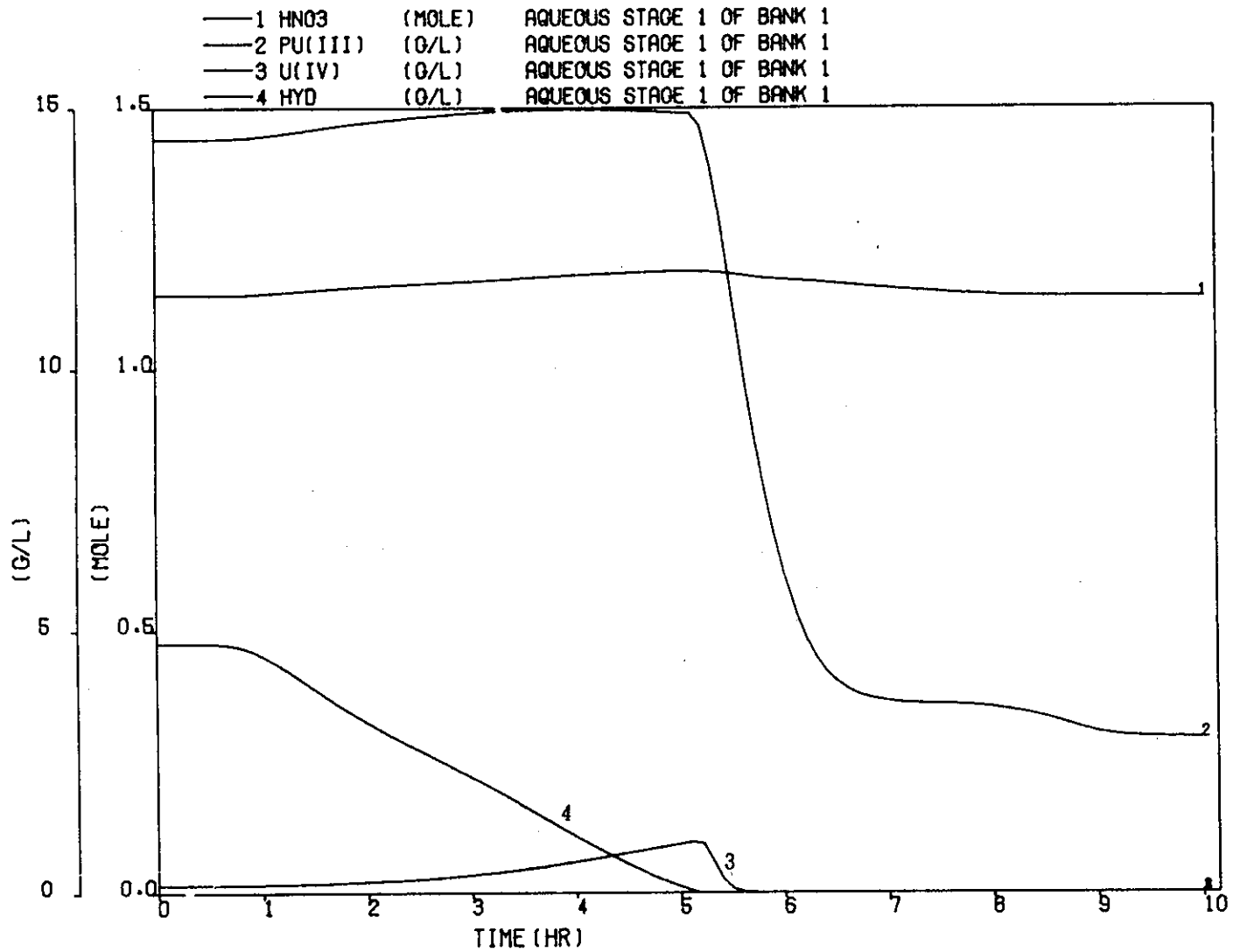


付図 3.8 計算例 3 のフローシート

```

* MAL-OPERATION OF EXT.-9
STAGE 1,13
VOLUME 1.3R5,3.08R8, 5.09R5,12.47R8
COMPONENT 7,2,7
FEEDS(1,1,-1) 0,15,0R7, 1-3,15,0R7
FEEDS(2,1,-6) 0,52,0,1907,2.665,6.029,0R4, $
                1-3,52,0,1907,2.665,6.029,0R4,
FEEDS(3,1, 7) 0,4,0,1.5,100,0,0,100,0,6, 1-3,4,0,1.5,100,0,0,100,0,0
FEEDS(4,1, 9) 0,4,0,1.5,100,0,0,100,0,6, 1-3,4,0,1.5,100,0,0,100,0,0
FEEDS(5,1,11) 0,1,6,1.5,100,0,0,100,0,6, 1-3,1,6,1.5,100,0,0,100,0,0
FEEDS(6,1,13) 0,11,8,0.2,0R5,5, 1-3,11,8,0.2,0R6
INITIAL(1,1,1) 1.4R13
PRINT (0.5,-1) (9.5,1R) (10,-1)
TAU 0.03125
CDIST (1,7,0)
VDIST(1,1,6,1) 0,1,1.5, 0,5,15, 1,16, 2,15, 3,2,6
RFACTION (1,2)
TPLOT (1,-13,1,1,1) (1,-13,4,1,1) $
      (1,-13,2,2,2) (1,-13,3,2,2) (1,-13,4,2,2) (1,-13,5,2,2) $
      (1, 6,1,3,1) (1, 6,3,3,3) (1, 6,4,3,3) (1, 6,5,3,3) $
      (1, -6,1,4,1) (1, -6,3,4,3) (1, -6,4,4,3) (1, -6,5,4,3) $
      (1, 1,1,5,1) (1, 1,4,5,4) (1, 1,5,5,4) (1, 1,7,5,4)
CONTROL -4,1,2,10,150
BFGIN

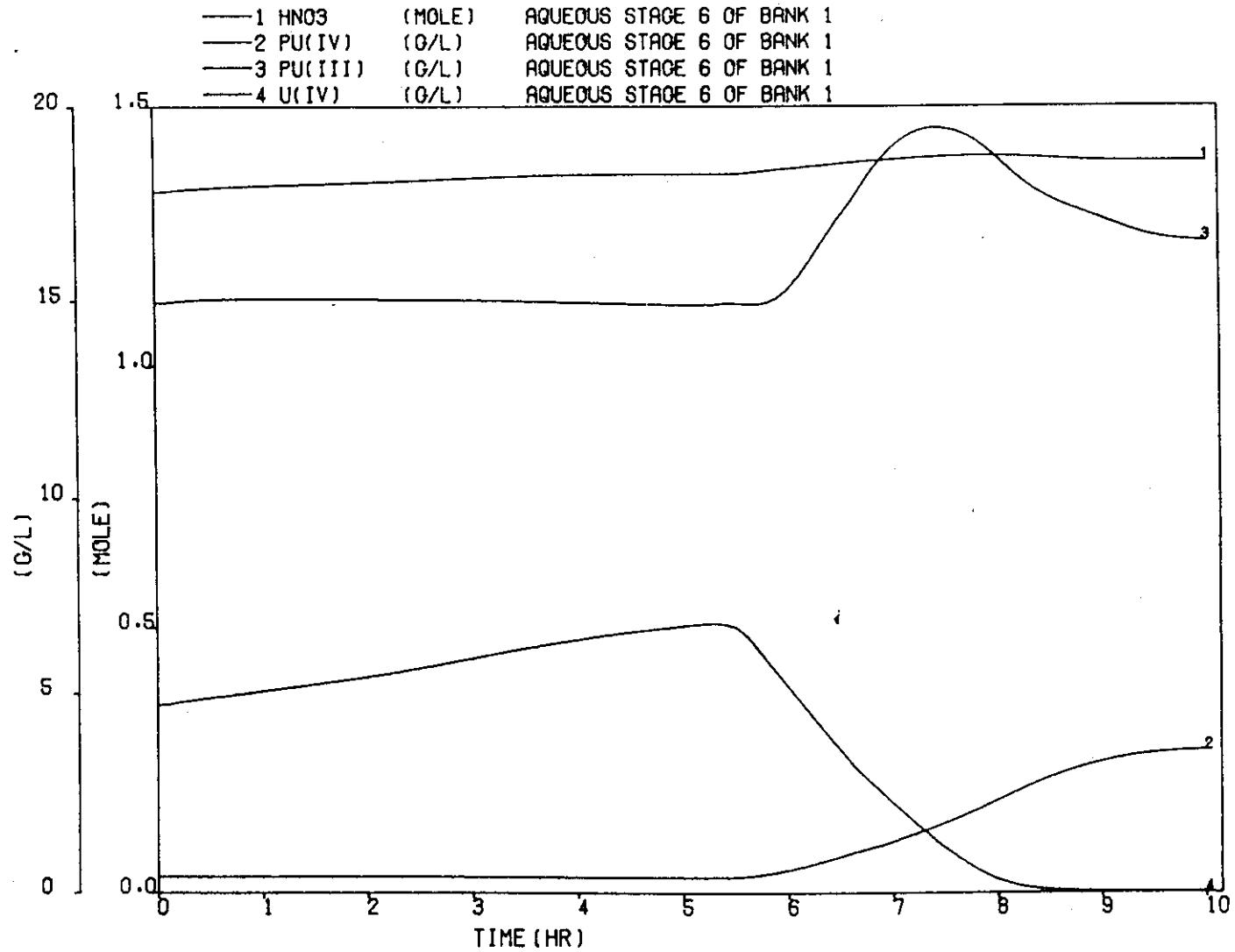
```



MAL-OPERATION OF EXT.-9

01/25/79

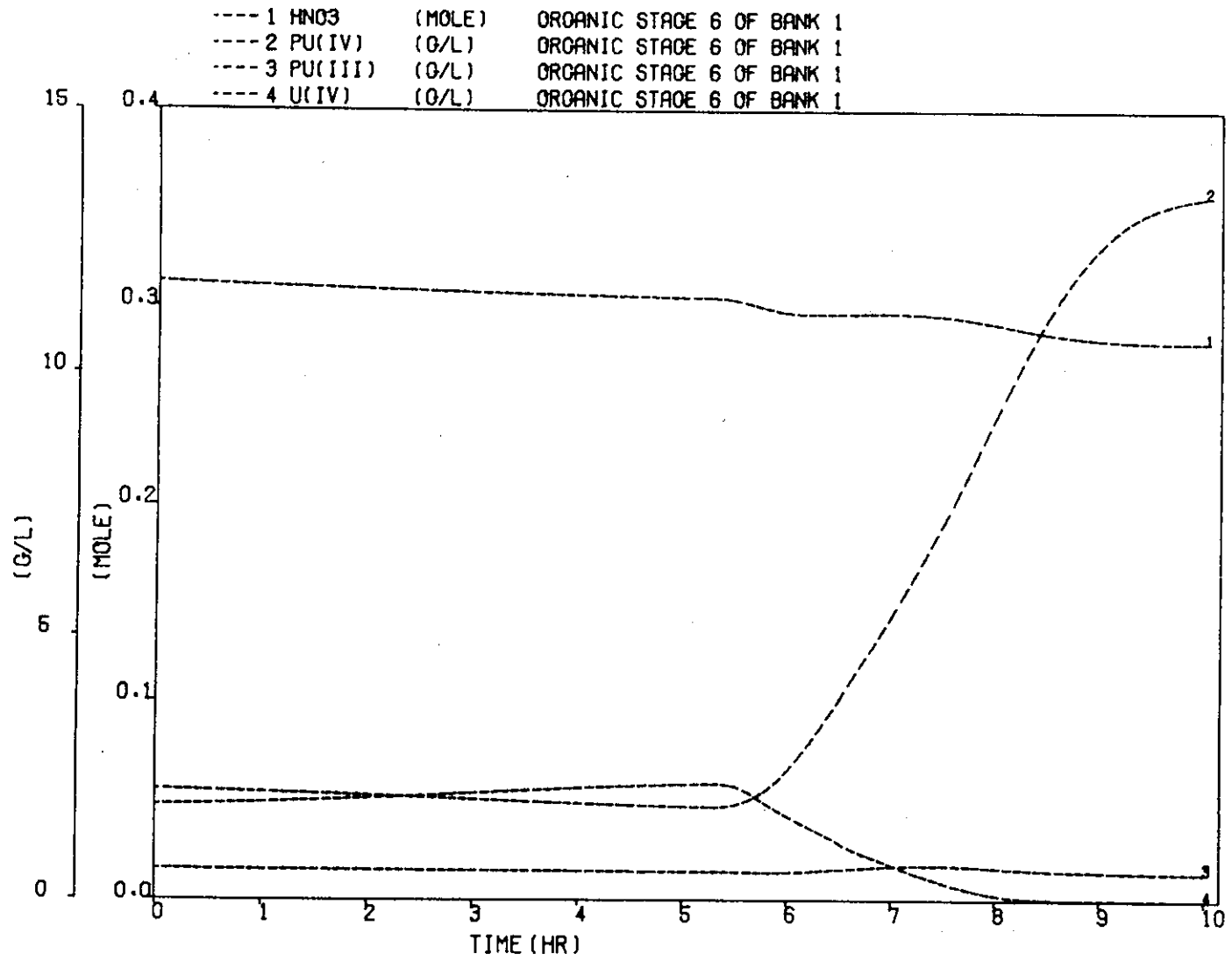
付図 3.9 Ext. IX 1 段目水相の H⁺, Pu(IV), Pu(III), N₂H₄ の濃度変化



MAL-OPERATION OF EXT.-9

01/25/79

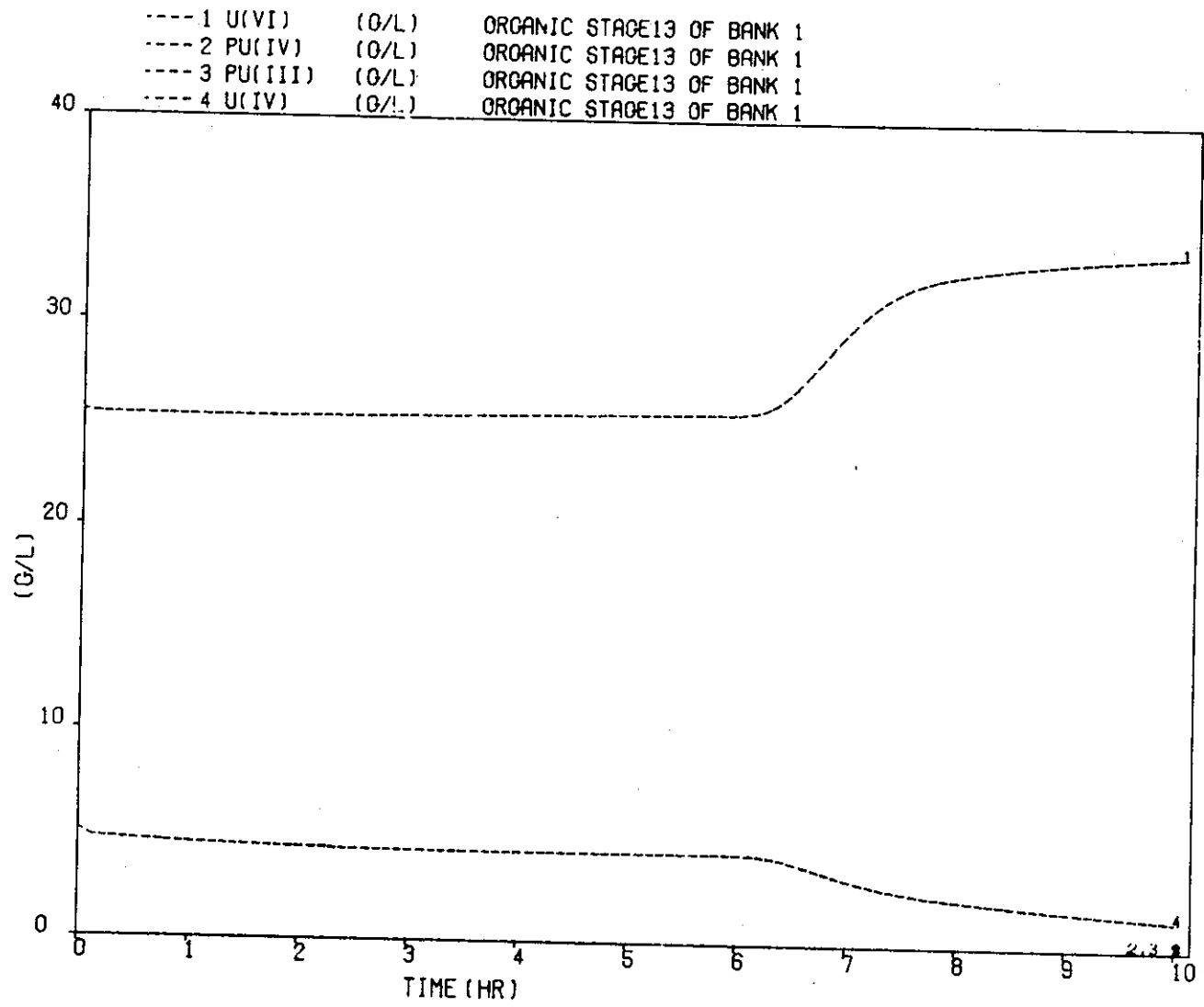
付図 3.10 Ext. IX 6 段目水相の H⁺, Pu(IV), Pu(III), U(IV) の濃度変化



MAL-OPERATION OF EXT.-9

01/25/79

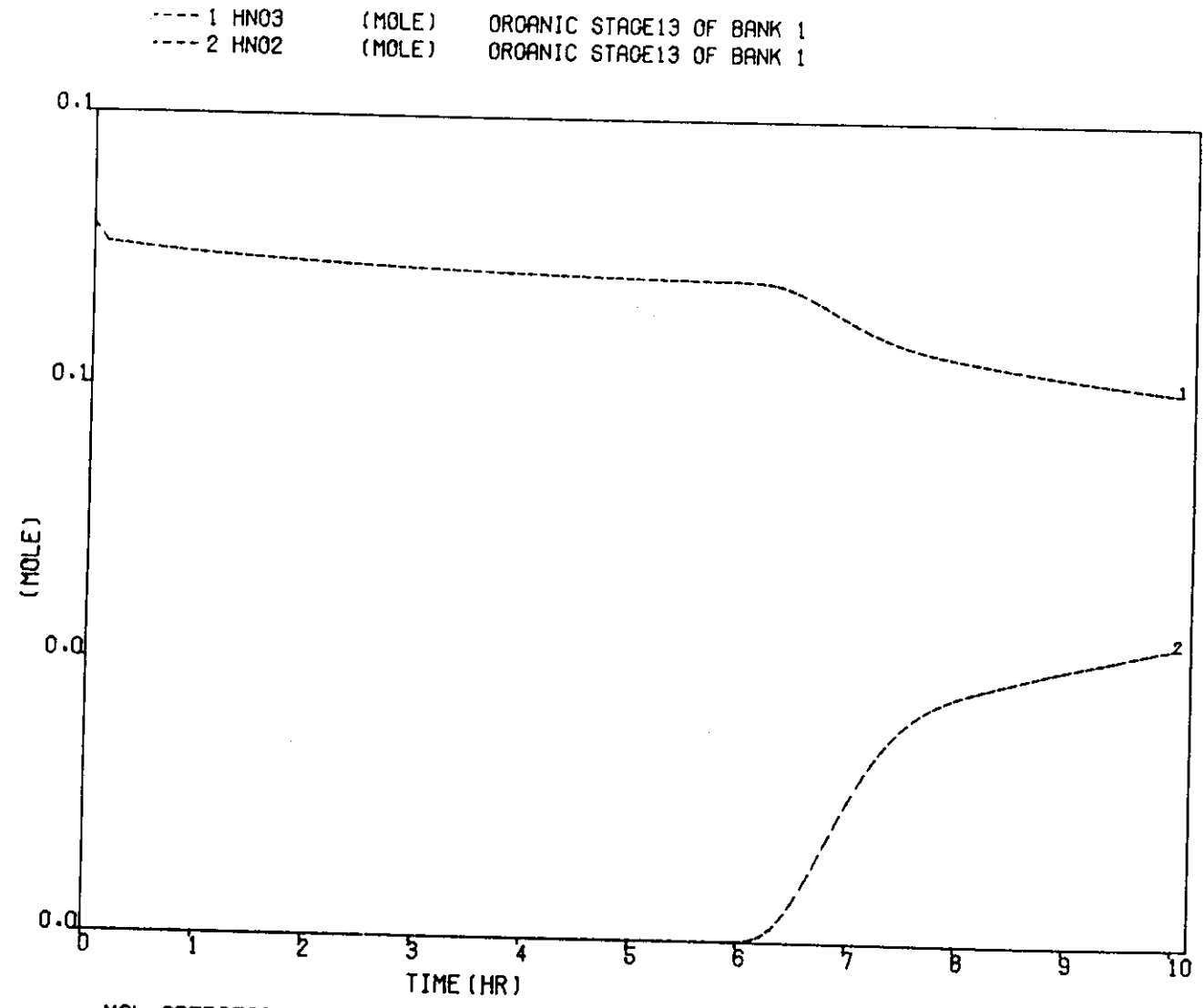
付図 3.11 Ext. IX 6 段目有機相のH⁺, Pu(IV), Pu(III), U(IV)の濃度変化



MAL-OPERATION OF EXT.-9

01/25/79

付図 3.12 Ext. IX 13 段目有機相の Pu(IV), Pu(III), U(VI), U(IV) の濃度変化



MAL-OPERATION OF EXT.-9

01/25/79

付図 3.13 Ext. IX 13 段目有機相のH⁺, HNO₂ の濃度変化

計算例 4

1. 計算目的

Pu 精製サイクル (Ext. V, IX) において、還元剤としてHANを用いるPu-U非分離抽出試験(混合抽出法)の定常計算を行なう。

2. 計算内容

付図 3.14 に示すフローシート条件で定常計算する。

3. 載録データ

(1) データ入力仕様

(2) インプットデータリスト

(3) 定常状態における各段の濃度計算結果

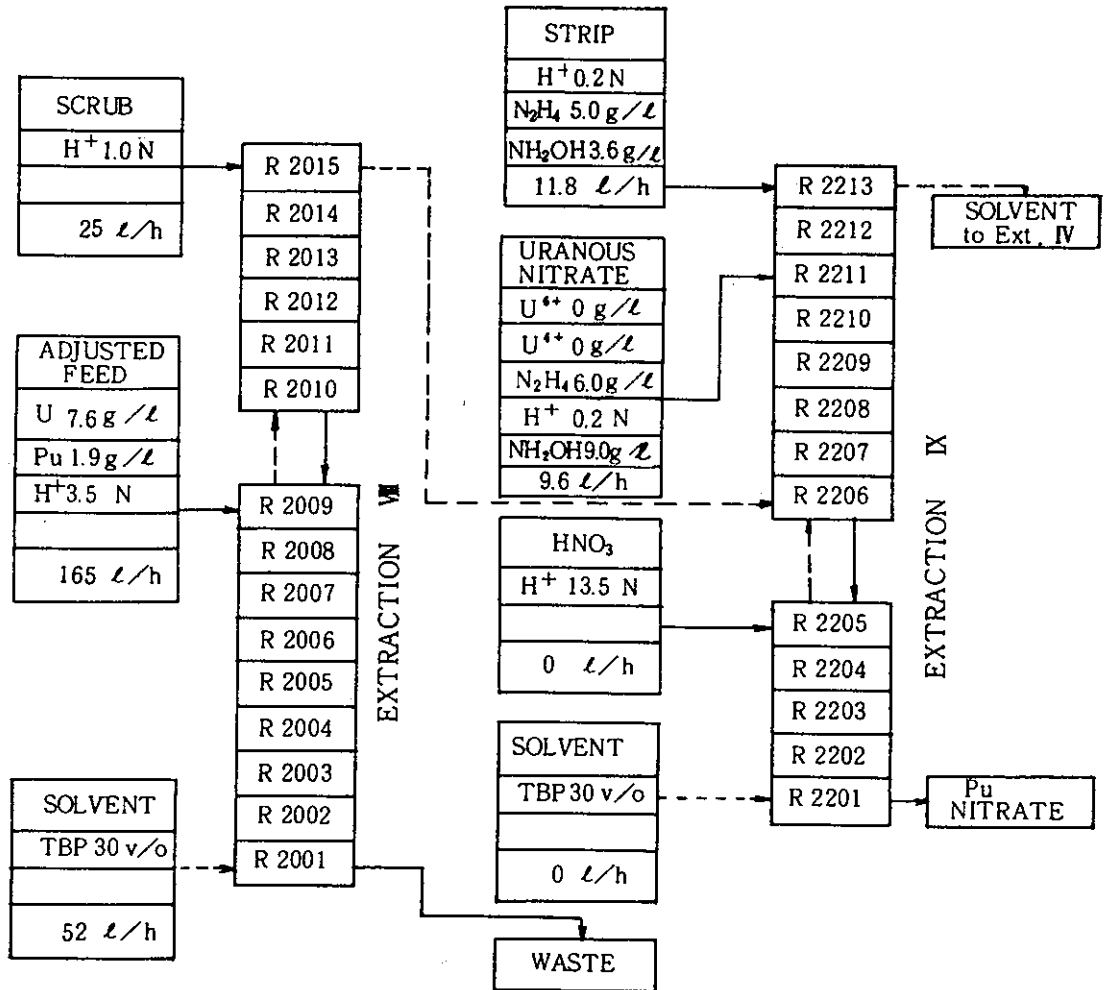
(4) 同上のプロットアウト結果

付図 3.15 Ext. IX水相の H^+ , Pu(IV), Pu(III), U(VI)の濃度プロフィール

付図 3.16 Ext. IX水相の H^+ , HAN, N_2H_4 の濃度プロフィール

付図 3.17 Ext. IX有機相の H^+ , Pu(IV), Pu(III), U(VI)の濃度プロフィール

(5) 化学反応に伴う各化学種の物質収支



付図 3.14 計算例 4 のフローシート

```

*****
* CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STADY STATE
STAGE 2,15,8,1
VOLUME 5.4R9,3.08R6,3.08R8, 30.73R9,12.47R6,12.47R8
COMPONENT 7,1,3,7
FEEDS(1,1,-1) 0,52,0R7
FEEDS(2,1, 9) 0,165,3.5,7.6,1.9,0R4
FEEDS(3,1,15) 0,25,1,0R6
FEEDS(4,2, 6) 0,9.6,0.2,0R3,9,0,6
FEEDS(5,2, 8) 0,11.8,0.2,0R3,3.6,0,5
PLOT (0,3,2,5,1,5,7) (0,4,2,2,1,2,3,4) (0,4,2,2,-1,-2,-3,-4)
CDIST (1,5,0) (1,6,10) (1,7,0) (2,5,0) (2,6,10) (2,7,0)
INITIAL(1,1,1) 3.13,3.31,3.32R6,3.31,1.80,1.29,1.10,1.02,1,1
INITIAL(2,1,1) 0.2R8
EPSILON (3,2-4)
CONTROL 13,0,2
BEGIN

```

INPUT DATA LIST

STAGE SPECIFICATION

NUMBER OF BANKS = 2		VOLUME		NUMBER OF STAGES IN BANK = 15		8	LEVEL HEIGHT		BANK LINKAGE
BANK	STAGE	MIXER (L)	SETTLER (L)	FEED STREAM INDEX		RECYCLE FLOW RATE (L/HR)	INITIAL LEVEL HEIGHT	TAULE INDEX	INDEX
				AQUEOUS	ORGANIC				
1	1	5.40E+00	3.07E+01	0	1	0.	.50	0	
1	2	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	3	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	4	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	5	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	6	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	7	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	8	5.40E+00	3.07E+01	0	0	0.	.50	0	
1	9	5.40E+00	3.07E+01	2	0	0.	.50	0	
1	10	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	11	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	12	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	13	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	14	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
1	15	3.08E+00	1.25E+01	3	0	0.	.50	0	
2	1	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	**
2	2	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	3	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	4	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	5	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	6	3.08E+00	1.25E+01	4	0	0.	.50	0	
2	7	3.08E+00	1.25E+01	0	0	0.	.50	0	
2	8	3.08E+00	1.25E+01	5	0	0.	.50	0	

COMPONENT SPECIFICATION

NCOMP = 7		ICOMP = 1		NDCAL = 3 7								
		COMPONENT NO.		1	2	3	4	5	6	7		
BANK	NAME	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)				
	CONVERSION RATIO	1.000E+00	4.202E-03	4.184E-03	4.184E-03	3.030E-02	1.000E+00	3.125E-02				
	CHARGE	1.00	2.00	2.00	3.00	1.00	0.00	1.00				
	EXTRACTION	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00				
	STATUS											
	DB.COEFF. OPTION	0	0	0	0	200	200	200				
1	RF ACTION OPTION	0	0	0	0	0	0	0				
	DB.COEFF. OPTION	0	0	0	0	200	200	200				
2	RF ACTION OPTION	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1				

FEED STREAMS

NO.	BANK	STAGE	PHASE	TIME (HR)	FLOW RATE (L/HR)	SOLUTE CONCENTRATIONS						
						HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	1	ORG.	0.000	5.200E+01	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.

CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STATE

NO	BANK	PHASE	Q	CONC	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
2	1	9	AQU.	0.000	1.650E+02	3.500E+00	7.600E+00	1.900E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
3	1	15	AQU.	0.000	2.500E+01	1.000E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
4	2	6	AQU.	0.000	9.600E+00	2.000E-01	0.	0.	0.	9.000E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.
5	2	8	AQU.	0.000	1.180E+01	2.000E-01	0.	0.	0.	3.600E+00	0.	0.	0.	0.	0.	0.

01/23/79

PAGE 2

DISTRIBUTION COEFFICIENTS

** DBCNT(CONSTANT)

BANK	1	2	3	4	5	6	7
1	0.	0.	0.	0.	0.	1.00E+01	0.
2	0.	0.	0.	0.	0.	1.00E+01	0.

REACTION RATE CONSTANTS

BANK	1	2	3	4	5	6	7
BANK 1	AQ.PHASE - 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
	OG.PHASE - 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
BANK 2	AQ.PHASE - 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.
	OG.PHASE - 0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.

CONTROL DATA

TAU(1) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 1 CPLIM = 0. CPU TIME LIMIT(SEC)
 TAU(2) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 2 TFINL = 0.00
 TAU(3) = 0.000 TIME STEP SIZE IN BANK 3 UNIT OF TIME IS(HR)
 ICALC = 13 0/1/2/3/4 : TRANSIENT ONLY/EITRC1/EITRC2/STOYR1/STOYR2 (SUCCESSIVE TRANSIENT CALC. IF NEGATIVE)
 IFLOW = 0 0/1/2/3 : CONST.FEED IF ZERO, VARIABLE FEED IF POSITIVE.
 INCON = 2 0/1/2/3 : ZERO/PREVIOUS PROB./INPUT XM/INPUT ALL FOR INITIAL CONCENTRATIONS
 CTBP = .300000 TBP VOLUME FRACTION
 CTBPM = 1.096132 TBP MOLARITY(MOL/L)
 EPSTR(1)=1.00E-05 EPSTR(2)=1.00E-04 EPSTR(3)=2.00E-04 EPSTR(4)=1.00E-03 EPSTR(5)=2.00E+02
 EPSTR(6)=1.50E+02 EPSTR(7)=1.50E+02 EPSTR(8)=1.50E+02 EPSTR(9)=1.00E-03 EPSTR(10)=1.00E-06

INITIAL AQUEOUS CONCENTRATIONS FOR INTERACTIVE COMPONENTS

(1, 1)	3.13E+00	3.31E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.32E+00	3.31E+00	1.80E+00	1.29E+00	1.10E+00
	1.02E+00	1.00E+00	1.00E+00									
(2, 1)	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01	2.00E-01			

* PRINTOUT TIMES = 0.0 0

* STAGE PROFILE PLOT

TIME = 0.00 LPLOT = 3 BANK = 2 LPSC = 5 COMPONENT = 1 5 7
 TIME = 0.00 LPLOT = 4 BANK = 2 LPSC = 2 COMPONENT = 1 2 3 4
 TIME = 0.00 LPLOT = 4 BANK = 2 LPSC = 2 COMPONENT = -1 -2 -3 -4

CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STATE
 FLOW RATES AND PHASE VOLUMES AT TIME = 0.001(HR)

01/23/79

PAGE

3

BANK	STAGE	VOLUME OF MIXER			VOLUME OF SETTLER			FLOW RATE (L/HR)		PHASE RATIO
		TOTAL	AQUEOUS	(L) ORGANIC	TOTAL	AQUEOUS	(L) ORGANIC	AQUEOUS	ORGANIC	
1	1	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	2	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	3	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	4	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	5	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	6	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	7	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	8	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	9	5.4000	4.2397	1.1603	30.7300	15.3650	15.3650	190.0000	52.0000	3.6538
1	10	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	11	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	12	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	13	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	14	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
1	15	3.0800	1.0000	2.0800	12.4700	6.2350	6.2350	25.0000	52.0000	.4808
2	1	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	2	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	3	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	4	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	5	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	6	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	7	3.0800	.8980	2.1820	12.4700	6.2350	6.2350	21.4000	52.0000	.4115
2	8	3.0800	.5697	2.5103	12.4700	6.2350	6.2350	11.8000	52.0000	.2269
			.5697	2.5103	12.4700	6.2350	6.2350	11.8000	52.0000	.2269

* SUCCESS TO CONVERGE IN EITRC1; IT= 26 NB=1 I=12 J=3 LMAX= 8.8338E-06

** SUCCESS TO CONVERGE IN STDYR1; IT= 71 NB=2 I= 8 J=3 LMAX= 1.9693E-04

CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STATE

01/23/79

PAGE

4

CONCENTRATION PROFILE AT TIME = 0.00(HR)

AQUEOUS MIXER BANK		HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	3.130E+00	8.569E-08	6.788E-05	0.	0.	0.	0.
1	2	3.313E+00	7.352E-07	2.709E-04	0.	0.	0.	0.
1	3	3.322E+00	5.962E-06	9.413E-04	0.	0.	0.	0.
1	4	3.323E+00	4.785E-05	3.113E-03	0.	0.	0.	0.
1	5	3.323E+00	3.833E-04	1.014E-02	0.	0.	0.	0.
1	6	3.323E+00	3.067E-03	3.281E-02	0.	0.	0.	0.
1	7	3.322E+00	2.444E-02	1.056E-01	0.	0.	0.	0.
1	8	3.320E+00	1.914E-01	3.342E-01	0.	0.	0.	0.
1	9	3.311E+00	1.378E+00	9.723E-01	0.	0.	0.	0.
1	10	1.798E+00	2.901E+00	2.588E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.290E+00	4.580E+00	4.419E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.097E+00	5.626E+00	5.542E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.023E+00	6.082E+00	5.888E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	9.960E-01	6.115E+00	5.516E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	9.892E-01	5.323E+00	4.026E+00	0.	0.	0.	0.

ORGANIC MIXER BANK		HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	6.718E-01	2.373E-06	7.418E-04	0.	0.	0.	0.
1	2	7.040E-01	2.147E-05	3.191E-03	0.	0.	0.	0.
1	3	7.055E-01	1.745E-04	1.113E-02	0.	0.	0.	0.
1	4	7.054E-01	1.400E-03	3.679E-02	0.	0.	0.	0.
1	5	7.049E-01	1.121E-02	1.196E-01	0.	0.	0.	0.
1	6	7.031E-01	8.929E-02	3.859E-01	0.	0.	0.	0.
1	7	6.957E-01	6.992E-01	1.221E+00	0.	0.	0.	0.
1	8	6.613E-01	5.037E+00	3.552E+00	0.	0.	0.	0.
1	9	5.353E-01	2.551E+01	7.273E+00	0.	0.	0.	0.
1	10	2.909E-01	2.632E+01	8.153E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.978E-01	2.682E+01	8.693E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.624E-01	2.704E+01	8.859E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.494E-01	2.706E+01	8.681E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.462E-01	2.667E+01	7.964E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.514E-01	2.412E+01	6.029E+00	0.	0.	0.	0.

- 234 -

PNCT 841-79-26

AQUEOUS SETTLER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	3.130E+00	8.569E-08	6.788E-05	0.	0.	0.	0.
1	2	3.313E+00	7.352E-07	2.709E-04	0.	0.	0.	0.
1	3	3.322E+00	5.962E-06	9.413E-04	0.	0.	0.	0.
1	4	3.323E+00	4.785E-05	3.113E-03	0.	0.	0.	0.
1	5	3.323E+00	3.833E-04	1.014E-02	0.	0.	0.	0.
1	6	3.323E+00	3.067E-03	3.281E-02	0.	0.	0.	0.
1	7	3.322E+00	2.444E-02	1.056E-01	0.	0.	0.	0.
1	8	3.320E+00	1.914E-01	3.342E-01	0.	0.	0.	0.
1	9	3.311E+00	1.378E+00	9.723E-01	0.	0.	0.	0.
1	10	1.798E+00	2.901E+00	2.588E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.290E+00	4.580E+00	4.419E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.097E+00	5.626E+00	5.542E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.023E+00	6.082E+00	5.888E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	9.960E-01	6.115E+00	5.516E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	9.892E-01	5.323E+00	4.026E+00	0.	0.	0.	0.

ORGANIC SETTLER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)
1	1	6.718E-01	2.373E-06	7.418E-04	0.	0.	0.	0.
1	2	7.040E-01	2.147E-05	3.191E-03	0.	0.	0.	0.
1	3	7.055E-01	1.745E-04	1.113E-02	0.	0.	0.	0.
1	4	7.054E-01	1.400E-03	3.679E-02	0.	0.	0.	0.
1	5	7.049E-01	1.121E-02	1.196E-01	0.	0.	0.	0.
1	6	7.031E-01	8.929E-02	3.858E-01	0.	0.	0.	0.
1	7	6.957E-01	6.992E-01	1.221E+00	0.	0.	0.	0.
1	8	6.613E-01	5.037E+00	3.552E+00	0.	0.	0.	0.
1	9	5.353E-01	2.551E+01	7.273E+00	0.	0.	0.	0.
1	10	2.909E-01	2.632E+01	8.153E+00	0.	0.	0.	0.
1	11	1.978E-01	2.682E+01	8.693E+00	0.	0.	0.	0.
1	12	1.624E-01	2.704E+01	8.859E+00	0.	0.	0.	0.
1	13	1.494E-01	2.706E+01	8.681E+00	0.	0.	0.	0.
1	14	1.462E-01	2.667E+01	7.964E+00	0.	0.	0.	0.
1	15	1.514E-01	2.412E+01	6.029E+00	0.	0.	0.	0.

AQUEOUS MIXER

BANK	STAGE	HNO3 (MOLE)	U(VI) (G/L)	PU(IV) (G/L)	PU(III) (G/L)	HAN (G/L)	HNO2 (MOLE)	HYD (G/L)	TOTAL PU (G/L)
2	1	6.027E-01	4.119E+00	2.589E+00	1.206E+01	4.267E+00	0.	5.405E+00	1.465E+01
2	2	4.817E-01	4.853E+00	2.126E+00	1.090E+01	4.571E+00	0.	5.429E+00	1.303E+01
2	3	3.997E-01	5.750E+00	1.203E+00	8.046E+00	4.976E+00	0.	5.442E+00	9.249E+00
2	4	3.284E-01	6.976E+00	3.296E-01	4.254E+00	5.483E+00	0.	5.447E+00	4.584E+00
2	5	2.672E-01	8.231E+00	2.662E-02	1.110E+00	5.892E+00	0.	5.448E+00	1.137E+00
2	6	2.301E-01	8.497E+00	4.697E-04	1.039E-01	6.013E+00	0.	5.449E+00	1.044E-01
2	7	2.255E-01	1.043E+01	8.480E-06	7.953E-03	3.600E+00	0.	5.000E+00	7.961E-03
2	8	2.093E-01	9.695E+00	4.187E-08	3.845E-04	3.600E+00	0.	5.000E+00	3.846E-04

CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STATE

01/23/79-

PAGE 6

ORGANIC MIXER		HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	HAN	HNO2	HYD	TOTAL PU
BANK	STAGE	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)	(G/L)
2	1	1.085E-01	2.442E+01	5.083E+00	2.796E-01	0.	0.	0.	5.363E+00
2	2	8.454E-02	2.479E+01	3.576E+00	2.300E-01	0.	0.	0.	3.807E+00
2	3	6.772E-02	2.529E+01	1.735E+00	1.519E-01	0.	0.	0.	1.887E+00
2	4	5.270E-02	2.581E+01	3.983E-01	6.945E-02	0.	0.	0.	4.677E-01
2	5	4.046E-02	2.592E+01	2.731E-02	1.566E-02	0.	0.	0.	4.296E-02
2	6	3.407E-02	2.479E+01	4.457E-04	1.365E-03	0.	0.	0.	1.811E-03
2	7	3.039E-02	2.462E+01	6.499E-06	8.481E-05	0.	0.	0.	9.131E-05
2	8	2.829E-02	2.242E+01	3.141E-08	4.014E-06	0.	0.	0.	4.045E-06

AQUEOUS SETTLER		HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	HAN	HNO2	HYD	TOTAL PU
BANK	STAGE	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)	(G/L)
2	1	6.125E-01	4.119E+00	1.663E+00	1.299E+01	4.073E+00	0.	5.373E+00	1.465E+01
2	2	4.933E-01	4.853E+00	8.932E-01	1.214E+01	4.358E+00	0.	5.409E+00	1.303E+01
2	3	4.079E-01	5.750E+00	3.059E-01	8.943E+00	4.830E+00	0.	5.432E+00	9.249E+00
2	4	3.310E-01	6.976E+00	4.648E-02	4.537E+00	5.437E+00	0.	5.444E+00	4.584E+00
2	5	2.674E-01	8.231E+00	2.040E-03	1.134E+00	5.887E+00	0.	5.448E+00	1.137E+00
2	6	2.301E-01	8.497E+00	2.339E-05	1.044E-01	6.013E+00	0.	5.449E+00	1.044E-01
2	7	2.255E-01	1.043E+01	5.717E-07	7.961E-03	3.600E+00	0.	5.000E+00	7.961E-03
2	8	2.093E-01	9.695E+00	4.574E-09	3.846E-04	3.600E+00	0.	5.000E+00	3.846E-04

ORGANIC SETTLER		HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)	HAN	HNO2	HYD	TOTAL PU
BANK	STAGE	(MOLE)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(G/L)	(MOLE)	(G/L)	(G/L)
2	1	1.085E-01	2.442E+01	5.083E+00	2.796E-01	0.	0.	0.	5.363E+00
2	2	8.454E-02	2.479E+01	3.576E+00	2.300E-01	0.	0.	0.	3.807E+00
2	3	6.772E-02	2.529E+01	1.735E+00	1.519E-01	0.	0.	0.	1.887E+00
2	4	5.270E-02	2.581E+01	3.983E-01	6.945E-02	0.	0.	0.	4.677E-01
2	5	4.046E-02	2.592E+01	2.731E-02	1.566E-02	0.	0.	0.	4.296E-02
2	6	3.407E-02	2.479E+01	4.457E-04	1.365E-03	0.	0.	0.	1.811E-03
2	7	3.039E-02	2.462E+01	6.499E-06	8.481E-05	0.	0.	0.	9.131E-05
2	8	2.829E-02	2.242E+01	3.141E-08	4.014E-06	0.	0.	0.	4.045E-06

PNCT 841-79-26

CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STATE

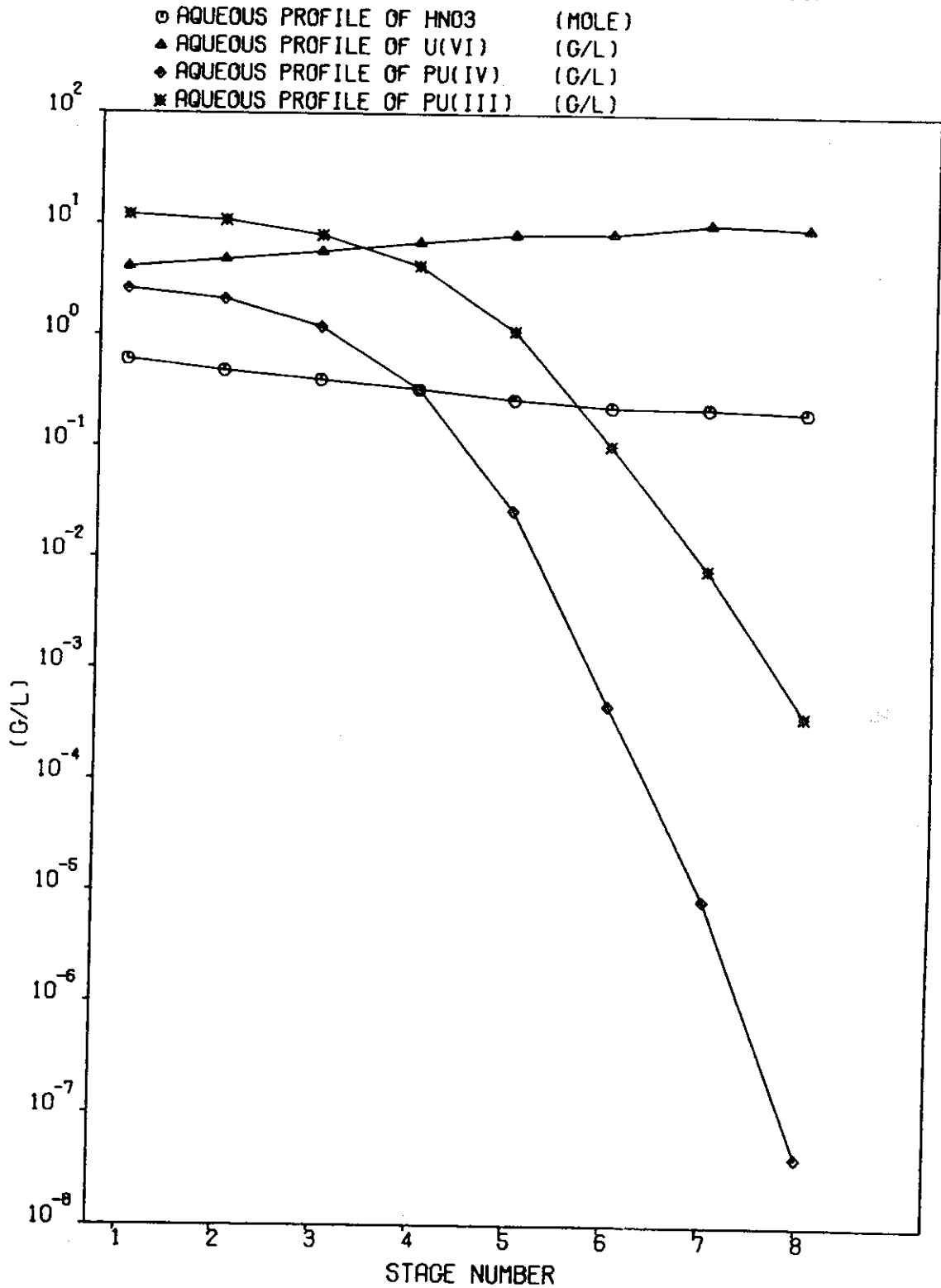
01/23/79 PAGE 7

	REACTION BALANCES OF BANK 2		PU-HAN REACTION				HAN	HNO2	HYD	TOTAL PU
	HNO3	U(VI)	PU(IV)	PU(III)						
FEED IN	1.215E+01	1.254E+03	3.135E+02	0.	1.289E+02	0.	0.	0.	3.135E+02	
FLOW OUT	1.458E+01	1.254E+03	3.558E+01	2.779E+02	8.715E+01	0.	0.	1.166E+02	3.135E+02	
PRODUCTION								1.150E+02	3.135E+02	
R-1	2.529E+00	0.	0.	3.022E+02	0.	0.	0.	0.	3.022E+02	
R-2	0.	0.	2.429E+01	0.	0.	0.	5.081E-02	0.	2.429E+01	
R-3	5.081E-02	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
R-4	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
TOTAL	2.579E+00	0.	2.429E+01	3.022E+02	0.	0.	5.081E-02	0.	3.265E+02	
CONSUMPTION										
R-1	0.	0.	3.022E+02	0.	4.173E+01	0.	0.	0.	3.022E+02	
R-2	1.524E-01	0.	0.	2.429E+01	0.	0.	0.	0.	2.429E+01	
R-3	0.	0.	0.	0.	0.	0.	5.081E-02	1.626E+00	0.	
R-4	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	0.	
TOTAL	1.524E-01	0.	3.022E+02	2.429E+01	4.173E+01	0.	5.081E-02	1.626E+00	3.265E+02	

単位 HNO₃ , HNO₂ : mole/h その他:g/n

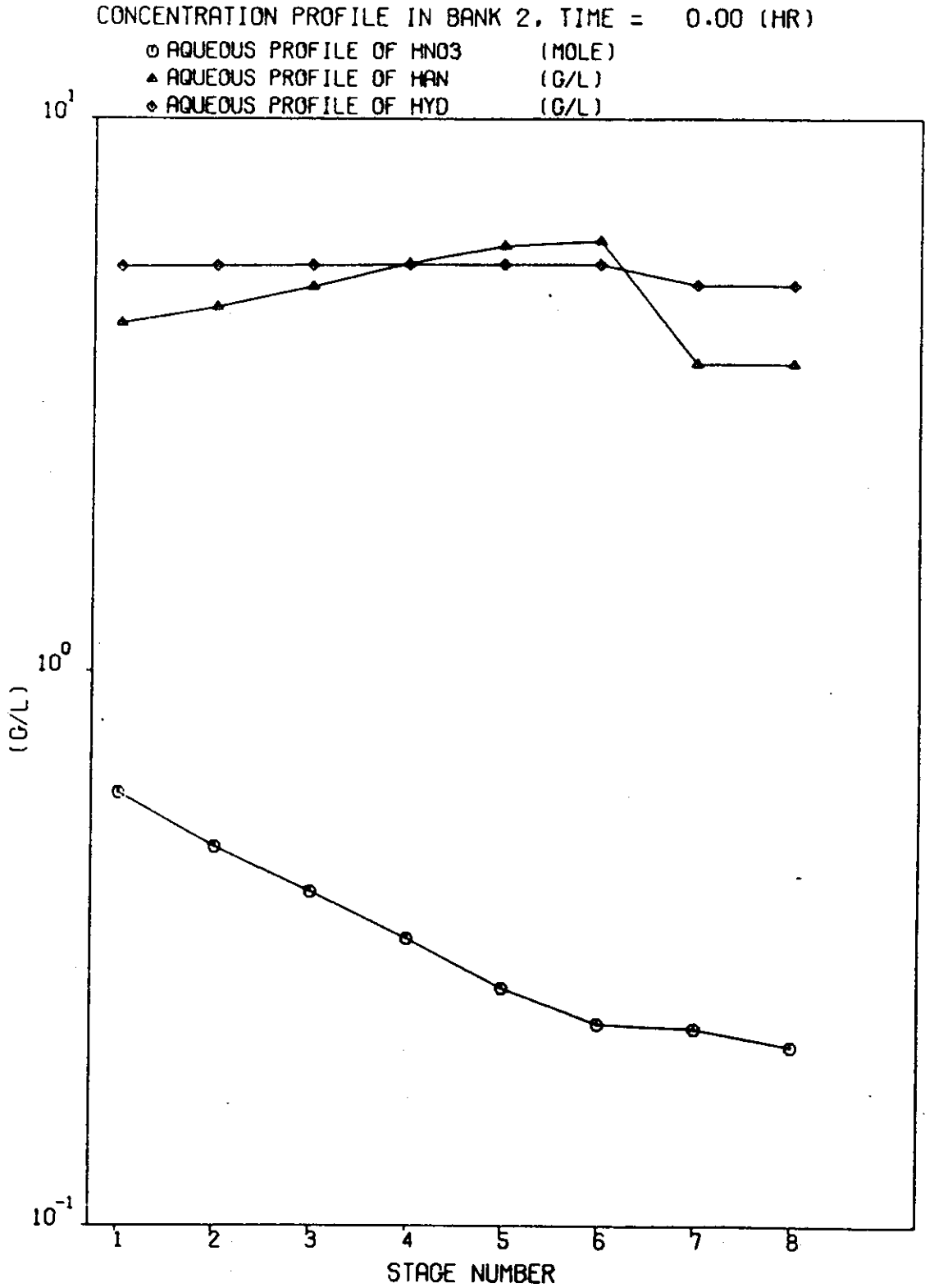
記号の説明
 R-1 : Pu(IV)の還元反応
 R-2 : Pu(III)の再酸化反応
 R-3 : HNO₃のN₂H₄による分解反応
 R-4 : HNO₃のHANによる分解反応

CONCENTRATION PROFILE IN BANK 2, TIME = 0.00 (HR)



CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STAT 01/23/79

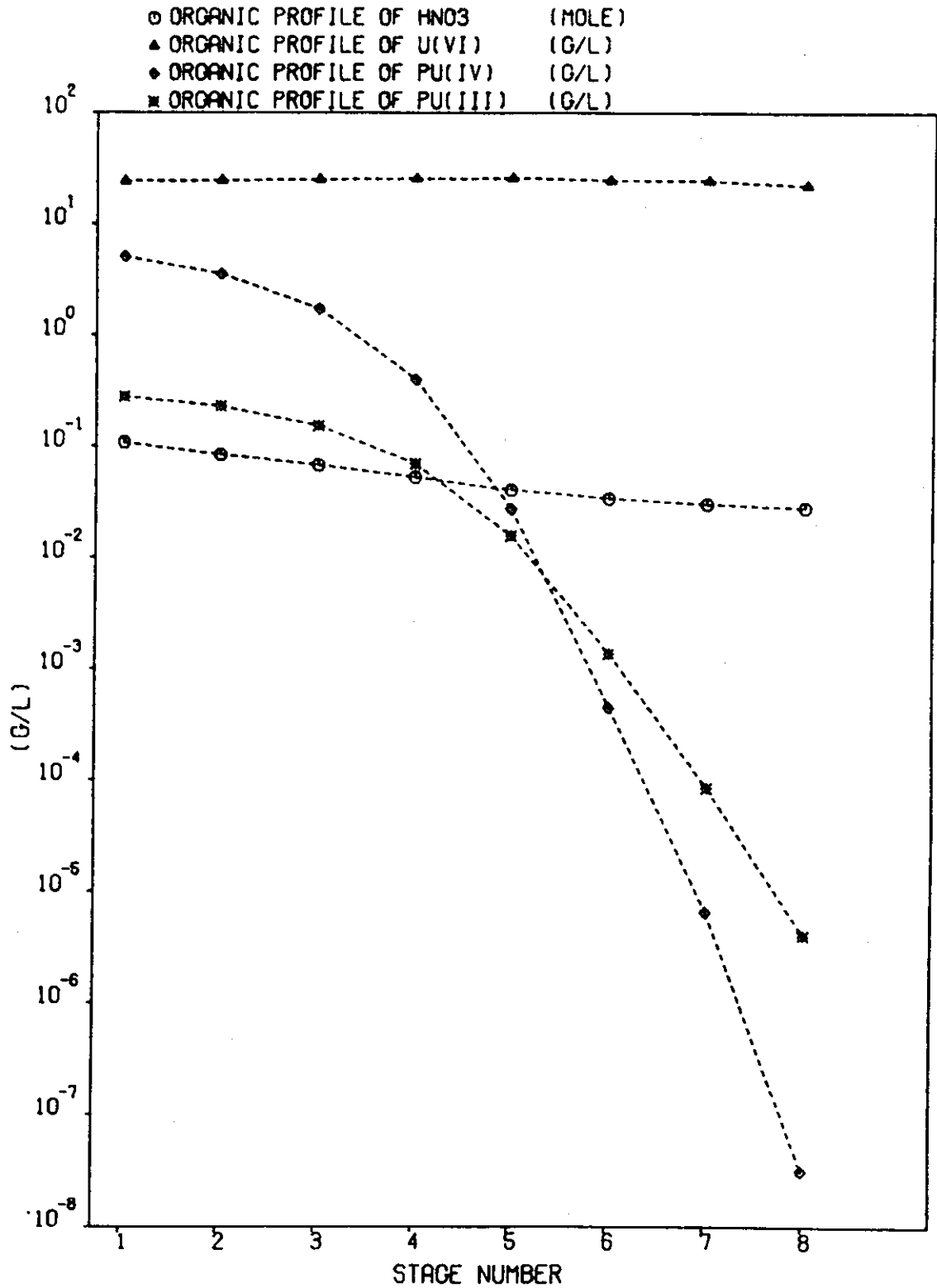
付図 3.15 Ext. IX水相のH⁺, Pu(IV), Pu(III), U(VI)の濃度プロフィール



CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STAT 01/23/79

付図 3.16 Ext. IX水相のH⁺, HAN, N₂H₄の濃度プロフィール

CONCENTRATION PROFILE IN BANK 2, TIME = 0.00 (HR)



CO-PROCESS WITH PU - HAN REACTION STEADY STAT 01/23/79

付図 3.17 Ext. Ⅰ有機相のH⁺, Pu(Ⅳ), Pu(Ⅲ), U(VI)の濃度プロフィール

㊦ 高橋情報システム株式会社

東京都中央区新川2-3-1

電話 (03) 551-6421 (代)

FAX (03) 551-6428

年 月 日 製作