

Purexプロセスの運転管理計算コード
TRANPES

CALCULATION CODE TRANPES FOR
TRANSITIONAL PUREX PROCESS

September. 1980

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

東海事業所技術部技術課 東海(02928)2-1111 内線355

Enquires about copyright and reproduction should be adressed to ;

Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel Development
Corporation,

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

Purex プロセスの運転管理計算コード
TRANPES

CALCULATION CODE TRANPES FOR
TRANSITIONAL PUREX PROCESS

報告者 権田 浩三* 滝口 照夫*
福田 章二**

要 旨

溶媒抽出工程のリアルタイムの運転データをもとに、抽出器内における成分濃度の分布を連続的に把握する計算コード TRANPES を開発した。

TRANPES は抽出工程の運転データ、即ち

- 1) 抽出器に供給される各種供給液の流量と組成
- 2) 抽出器の全段における水相と有機相の界面位置
- 3) インライン測定器及び化学分析による、少数の特定な段における成分濃度

の連続的な測定値から、抽出器の全ての段におけるプルトニウム、ウラン、酸の濃度分布を逐次計算する。

TRANPES は、抽出器の一部の段における成分濃度測定値と計算値との最小二乗法によるフィッティング計算によって抽出器の数式モデルのパラメーターサーベイを行なう。ついで、求めたパラメーターにより抽出器全段の成分濃度を計算する。また、TRANPES では濃度測定値に含まれる測定誤差の濃度計算値への影響を評価し、濃度計算値の信頼区間を求める事ができる。

* 再処理建設所工務部試験課. 319-11, 茨城県那珂郡東海村動力炉・核燃料事業団

** CRC (センチュリ・リサーチ・センター) 株式会社, 103, 東京都中央区日本橋本町3-2

CALCULATION CODE TRANPES FOR TRANSITIONAL PUREX PROCESS

Kozo GONDA*, Teruo TAKIGUCHI* and Shoji FUKUDA**

Abstract

A new calculation code TRANPES has been developed to have a continuous knowledge on the actual material present at any stage and any time in an mixer-settler type extractor. TRANPES makes continuous estimation of the concentration profiles of plutonium, uranium and acid in every stage of an extractor by calculating on the basis of the operating data shown below.

- 1) Feed concentrations and flow rates to an extractor.
- 2) Height of aqueous-organic interface level at each stage of an extractor.
- 3) Concentrations of plutonium, uranium and acid observed in several selected stages by in-line monitoring instruments and chemical analysis.

The present computer code can search the parameters for calculation by transitional least-squares fitting method. TRANPES can also evaluate the influence of measurement errors of concentrations observed upon concentrations calculated and show confidence region of the concentrations calculated.

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

** Century Research Center Co. LTD, Nihonbashi, 3-2 Tokyo, 103 Japan

Purex プロセスの運転管理計算コード

目 次

1. まえがき	1
2. 濃度の推定	3
2.1 濃度推定の計算モデル	3
2.1.1 抽出器のモデル化	3
2.1.2 分配平衡	4
2.1.3 段 効 率	6
2.1.4 界面変動	7
2.1.5 流量計算モデル	9
2.1.6 濃度推定の基本方程式	11
2.2 最小二乗法による実験データのフィティング	13
2.2.1 問題の定式化	13
2.2.2 最小二乗法によるフィティング	14
2.2.3 パラメータの選択	14
2.2.4 ガウス法による最小二乗法の手順	15
2.2.5 カルマン・フィルタによる濃度分布の推定（最小二乗法との比較）	17
2.3 信頼区間	19
2.3.1 線型化近似による信頼区間の推定	19
2.3.2 信頼区間の性質	21
2.3.3 計算例による信頼区間の考察	21
3. 参考文献	26
付 録	
付録1. プログラム	27
1.1 仕 様	28
1.2 プログラムの構成	28
1.3 入力仕様	31
付録2. プログラムリスト	36
付録3. 計 算 例	100
付録4. 数式の補足説明	159
4.1 三次スプライン関数による界面レベルの補間	160
4.2 線型最小二乗法における正規方程式の導出	161

1. ま え が き

再処理工場の各工程における物質の流れは、ベッセル中の液位、液体の流量、液密度、温度及び成分濃度等のインライン測定器によって検知され、これらの測定値をもとに各工程の運転管理が行なわれる。

近年、運転管理のためばかりでなく、保障措置技術の一つとして、再処理工程中の核物質存在量を詳しく把握する動的計量管理システムの開発が行なわれており、例えば、D. D. Cobb 等¹⁾は溶媒抽出工程における動的計量管理のための種々のモデルを検討している。これらは抽出器の数式モデルと、抽出器の運転データを組み合わせて、抽出器中の核物質存在量を推定する方法である。そこで、東海再処理工場の溶媒抽出工程の運転データをもとに抽出器中の核物質濃度分布を逐次計算によって推定する計算コードを検討した。

東海再処理工場の溶媒抽出工程は、共除染工程、分配工程、ウラン精製工程およびプルトニウム精製工程から成り、各工程は二ないし三台のミキサセトラ型抽出器から構成される。

溶媒抽出工程では

抽出器に供給される各種供給液の組成と流量

抽出器の全段における有機相と水相の界面位置

インライン測定器及び化学分析による少数の特定な段における成分濃度が経時的に測定、記録され、これらの測定値をもとに運転管理が行なわれる。

次に、共除染工程の第1抽出器を例にとり、溶媒抽出工程の運転管理方法を説明する。図1.1に第1抽出器へ供給される供給液の流量計及び抽出器中の成分濃度を測定するためのインラインモニター、サンプリングポイント(SP)の配置図を示す。溶媒、燃料溶解液及びスクラブ液は各々、第1、9及び17段に供給され、供給液の流量は流量制御記録計(FRC)あるいは流量指示計(FIP)に記録あるいは指示される。ミキサセトラの全段に界面指示計が設置され、界面位置が指示計の点灯個数で表示される。

ウラン濃度測定のための連続密度測定機(D.R)は、8、9、10段に、プルトニウム濃度検出のための中性子線インラインモニター(nR)は10、11、12、13、17段に設置されている。また、1、4、8、9、10、12、17段に設けられたサンプリングポイントから直接、試料が採取され、成分濃度の分析が行なわれ、D.R.記録値及びnR記録値との校正が行なわれる。溶媒抽出工程では、これらの運転データをもとに抽出器の運転管理が行なわれている。

しかし、抽出工程における物質の流れを詳しく把握するためには、抽出器の一部の段における成分濃度を知るだけでは不十分であり、測定器のない段における成分濃度を推定する必要がある。本研究では、抽出器の一部の段に設けられているインライン測定器による特定成分の濃度測定値と各種供給液条件及び界面位置の運転データをもとに、抽出器の各段における成分濃度を逐次計算によって推定し、溶媒抽出工程の運転状況をリアルタイムで正しく把握する計算コードを作成した。

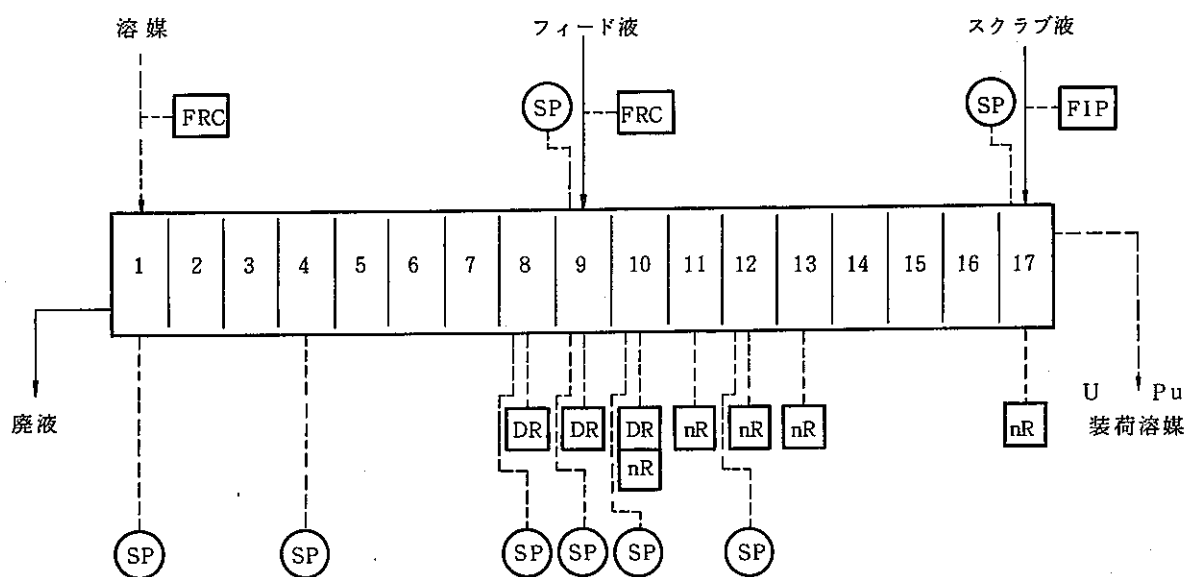


図 1.1 第1抽出器の供給液の流量計, インラインモニター, 及びサンプリングポイント

2. 濃 度 の 推 定

2.1 濃度推定の計算モデル

2.1.1 抽出器のモデル化

TRANPES は実験データとのフィティングによる抽出バンク内の濃度分布の動的変化の推定を目的とする計算コードであり、その基本的数式モデルは MIXSET²⁾ と同じものを用いた。TRANPES 計算コードでは抽出器のモデル化はなるべく簡単にし、計算手順を簡素化する必要があるため計算の対象としての抽出バンクを図 2.1 のような 1 バンク型の構造とした。

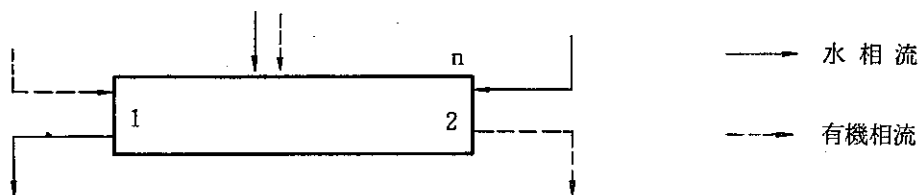


図 2.1 抽出器モデル

抽出バンクの構成数は最大 25 段であり、段数は 1 ~ 25 までの値を任意に指定することができる。

供給液は水相、有機相ともに抽出バンク内の任意の段に最大 15 個まで入力が可能である。ただし、第 1 段に有機相供給液、最終段には水相供給液の入力が必要である。各段はミキサとセトラから成っており、図 2.2 のような構造にモデル化されている。

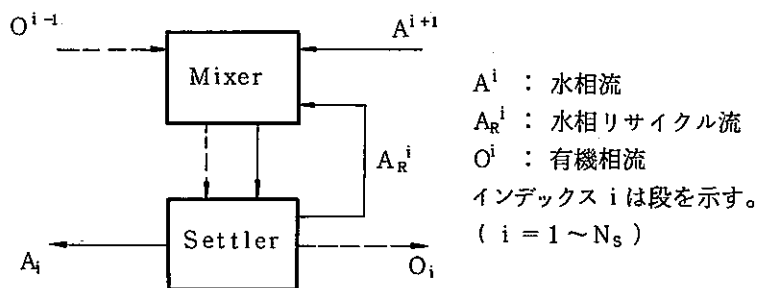


図 2.2 Stage の構造

ミキサ、セトラともに容積の指定が必要である。ミキサ内では水相と有機相流が完全に混合され、抽出成分の分配平衡が常に成立していると仮定した。ただし、段効率によって抽出平衡からのずれを指定する。すなわち、TRANPES コードでは段効率を最小二乗法のフィティングパラメーターとして選んでいるが、段効率の最適値はプログラム内で決定される。ミキサ内の水相と有機相の容積比は流量比と同じとするが、セトラ内の水相と有機相の容積割合は流量比とは無関係に“界面レベル”によって決定される。この界面レベルは段ごとに時間変化の数値を入力することができる。界面レベルは水相と有機相との接触面(界面)の高さを表わすものであるが、

東海再処理工場の抽出器では図 2.3 のように各段に 6 個のランプがついており、このランプの点灯個数によって界面位置が検知される。

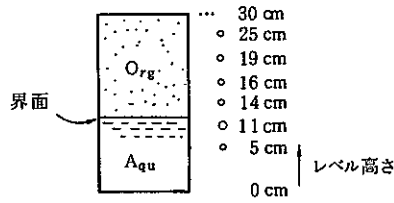


図 2.3 セトラ部の界面レベル

図 2.3 では下の 2 個が点灯しているので、界面は 11～14 cm の間にある。しかし界面の正確な位置を知ることはできない。TRANPES ではこの界面位置の不確定さを利用して界面の高さをもう一つのフィティングパラメータとして選んでいる。界面レベルのモデル化については 2.1.4 で述べる。

2.1.2 分配平衡

TRANPES version では抽出成分として $H^+ - UO_2^{2+} - Pu^{4+}$ の 3 成分系を扱い、分配係数は、Richardson³⁾ のデータが組み込まれている。

Richardson の分配データは Solute Free basis (S. F 基準) 濃度に対応しているので、TRANPES 内でも流量と濃度は S. F. 基準で計算を行う。

モル濃度から S. F. 基準濃度 (小文字) と通常のもル濃度 (大文字) との関係式を (2.1) 式および (2.2) 式に示す。

$$\left. \begin{aligned} \frac{m_a}{M_a} &= \frac{1.0}{1.0 - 0.0724 \cdot U_a - 0.13 \cdot Pu_a - 0.0309 \cdot H_a} \\ &= 1.0 + 0.0724 \cdot u_a + 0.13 \cdot Pu_a + 0.0309 \cdot h_a \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{m_o}{M_o} &= \frac{1.0}{1.0 - 0.097 \cdot U_o - 0.139 \cdot Pu_o - 0.043 \cdot H_o - 0.0174 \cdot W_o} \\ &= 1.0 + 0.097 \cdot u_o + 0.139 \cdot Pu_o + 0.043 \cdot h_o + 0.0274 \cdot w_o \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

m_a/M_a , m_o/M_o はそれぞれ水相, 有機相を表わす。U, Pu, H は成分濃度で単位は mol/l である。W_o と w_o は有機相における水の濃度であり (2.3), (2.4) 式で計算される。

$$W_o = (3.95 - 0.0144 \cdot t) \cdot \left(1.0 - \frac{U_o}{U_{os}} - \frac{Pu_o}{Pu_{os}} - \frac{0.65 \cdot H_o}{H_{os}}\right) \cdot F^{1.65} \quad (2.3)$$

$$w_o = (4.2 - 0.015 \cdot t) \cdot \left(1.0 - \frac{2 \cdot u_o}{T} - \frac{2 \cdot Pu_o}{T} - \frac{0.6 \cdot h_o}{T}\right) \cdot F^{1.69} \quad (2.4)$$

U_{os} , Pu_{os} , H_{os} はそれぞれ TBP を飽和させるのに必要なウラン, プルトニウム, 硝酸のモル濃度であり, (2.5), (2.6), (2.7) 式で計算される。

$$U_{os} = \frac{0.5 \cdot T}{1.0 + 0.046 \cdot T} \quad (2.5)$$

$$Pu_{os} = \frac{0.5 \cdot T}{1.0 + 0.09 \cdot T} \quad (2.6)$$

$$H_{os} = \frac{T \cdot [1.0 - 0.00609 \cdot (3.95 - 0.0144 \cdot t) \cdot F^{1.65}]}{1.0 + 0.043 \cdot T} \quad (2.7)$$

(2.3) ~ (2.7) 式中の F , T , t は

$$\left. \begin{array}{l} F : \text{無水の Solute-free solvent 中の TBP の体積分率} \\ T = 3.651 \cdot F \left(\begin{array}{l} \text{TBP n-Dodecane に水が飽和している状態での} \\ \text{TBP モル濃度} \end{array} \right) \\ t : \text{温度 } ^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad (2.8)$$

である。

供給液の流量と濃度は (2.1) または (2.2) 式を用いて S. F. 基準濃度へ変換される。

m_a/M_o , m_o/M_o は溶液の密度に相当する。プログラム内部の計算濃度 (S. F. 基準) からプリントされるモル濃度への変換にも (2.1), (2.2) 式が使用される。

流量が S. F. であるからミキサ, セトラの容量も S. F. 基準でなければならないが, 抽出器内の濃度プロファイルは時間とともに変動するので, S. F. 容積をあらかじめ決定するのは困難である。TRANPES では時間区分毎にミキサ, セトラのホールドアップ量を時間区分の初期濃度を用いて (2.1) ~ (2.4) 式により計算している。時間区分内では一定の S. F. 基準ホールドアップ量が適用される。

S. F. 基準濃度 x_H , x_u , x_{pu} に対し Richardson の分配データは以下のように与えられる。

成分 j (H^+ , UO_2 , Pu^{4+}) のみかけの平衡定数 K_j を

$$K_j = \frac{y_j}{x_j \cdot T_f^{n_j}} \quad (2.9)$$

ここで,

x_j, y_j = 成分 j の水相, 有機相中での濃度

T_f = free TBP 濃度

n_j = 成分 j の TBP 配位数

と定義し, K_j を硝酸・濃度 x_{NO_3} の関数として表わす,

$$\left. \begin{aligned} x_{NO_3} &= x_H + 2 \cdot (x_{uo_2} + x_{pu}) \\ K_{H1} &= (0.135 \cdot x_{NO_3}^{0.82} + 0.0052 \cdot x_{NO_3}^{3.44}) \cdot (1 - 0.5 e^{15 \cdot F}) \cdot \\ K_{H2} &= K_{H1} \\ K_{uo_2} &= (3.7 \cdot x_{NO_3}^{1.57} + 1.4 \cdot x_{NO_3}^{3.9} + 0.11 \cdot x_{NO_3}^{7.3}) \cdot (4 \cdot F^{-0.17} - 3) \\ K_{pu} &= K_{uo_2} \cdot (0.2 + 0.55 \cdot F^{1.25} - 0.0074 \cdot x_{NO_3}^2) \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

free TBP 濃度 T_f は TBP のバランスを表わす。

$$T_f = T - 2 \cdot (K_{H2} \cdot x_H + K_{uo_2} \cdot x_{uo_2} + K_{pu} \cdot x_{pu}) \cdot T_f^2 - K_{H1} \cdot x_H \cdot T_f \quad (2.11)$$

の二次方程式を解けば求められる。分配係数 D_j は (2.9) 式より,

$$\left. \begin{aligned} D_H &= k_{H1} \cdot T_f + k_{H2} \cdot T_f^2 \\ D_{uo_2} &= K_{uo_2} \cdot T_f^2 \\ D_{pu} &= K_{pu} \cdot T_f^2 \end{aligned} \right\} \quad (2.12)$$

と計算される。

2.1.3 段効率

TRANPES コードでは段効率が一つのフィティングのパラメータとして選ばれる。ここでは Murphree 型の段効率を採用する。

ミキサ部の時間 t におけるマスバランスを図 2.4 のようにモデル化する。

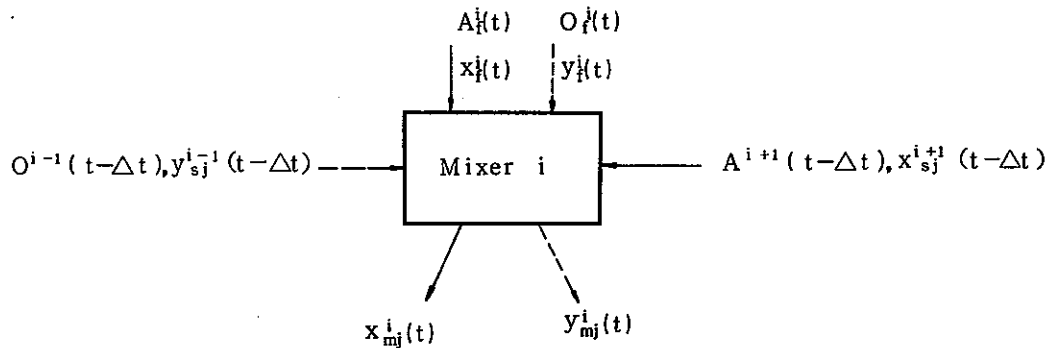


図 2.4 段効率に関するミキサ内のマスバランス

Δt はタイムステップである。となりの段からの入力を前のタイムステップの値を使用するのは数値解法上の理由によるものである。段効率は水相濃度または有機相濃度のどちらかによって定義される。

○水相について

$$\left. \begin{aligned} E_f^{i,j} &= \frac{x_{mj}^i(t) - x_{in}}{x^* - x_{in}} \\ x^* &= y_{mj}^i(t) / D_{ij}(t) \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

$$x_{in} = \frac{A^{i+1}(t-\Delta t) \cdot x_s^i(t-\Delta t) + A_t^i(t-\Delta t) \cdot x_j^i(t-\Delta t)}{A^{i+1}(t-\Delta t) + A_t^i(t-\Delta t)}$$

有機相についても同様に定義される。

段効率の範囲 E_f は (2.13) 式より

$$E_f = 0. \text{ とおくと, } x_{mj}^i(t) = x_{in} \tag{2.14}$$

$$E_f = 1.0 \text{ とおくと, } x_{mj}^i(t) = y_{mj}^i(t) / D_j(t)$$

となり、段効率と分配係数の意味から、 $0 < E_f < 1.0$ が妥当な範囲と考えられる。

2.1.4 界面変動

TRANPES では任意の段(セトラ)の界面変動の履歴を時間変化入力することができる。実際のプラントにおける界面レベルの変動は連続的であるが、サンプリングできるデータの数には限度があるため TRANPES ではある時間間隔をおいた離散的な点列で与えることにする。この時間間隔は計算コード内のタイムステップより長いため、補間が必要となる。また、レベル変化による流量変動を求めるためにはレベル変化の微係数も必要となる。MIXSETコードでは線型補間による近似式を用いているが、この方法では一次の導関数は不連続となるので実際のレベル変動の変化を表現するには不適當である。TRANPES では三次スプライン関数による補間法を用いる。ある段の界面レベルが図 2.5 のように与えられていると、

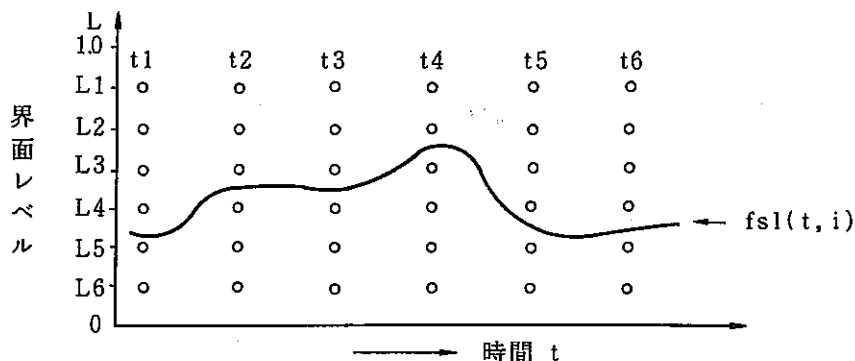


図 2.5 段 i の界面レベル変動のサンプル

TRANPES コード内では与えられた離散点のレベル点の中位点を用いて界面変動の連続関数

$$f_{se}(t, i) \text{ (Cubic spline function)}$$

を設定する。 $f_{se}(t, i)$ の具体的な計算法については付録 4.1 に述べる。

TRANPES においても MIXSET と同様、流量計算モデルは押し出し流れを採用しているので、セトラ部の界面が変動することによってセトラから流出する流量が変る。

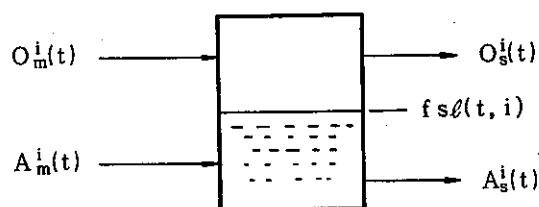


図 2.6 セトラ部における流量モデル

時間 t にて段 i のセトラ部の状況が図 2.6 のようになっていると仮定すると、

$$A_s^i(t) = A_m^i(t) + H_s^i \cdot \frac{d}{dt} f_{s\ell}(t, i) \tag{2.15}$$

$$O_s^i(t) = O_m^i(t) - H_s^i \cdot \frac{d}{dt} f_{s\ell}(t, i)$$

ここで、 H_s^i はセトラ i の容量である。

により流量は $A_s^i(t)$ 、 $O_s^i(t)$ として計算される。 $f_{s\ell}(t, i)$ は三次スプライン関数なのでその一次導関数も連続であり、滑らかな流量補正が期待できる。

段 i の界面変動が最小二乗法のフィティングパラメータとして選ばれた場合、関数 $f_{s\ell}(t, i)$ は測定レベル点間の中位点を通るということではなく、流量補正項 $\frac{d}{dt} f_{s\ell}(t, i)$ が最適値になるように決定される。

次に、フィティングパラメータとしての界面変動の取り扱いを以下に説明する。

界面位置が変動することによって流量が変わり、この流量変化が濃度分布へ与える効果は大きいので、この流量変化量を $\Delta F^i(t)$ とおく。界面レベルの位置は 2.1.1 に述べたように、パラメータとしての性質によってレベル点の中位点に固定する理由はないから、流量変化量 $\Delta F^i(t)$ についてもある許容幅を考慮する必要がある。

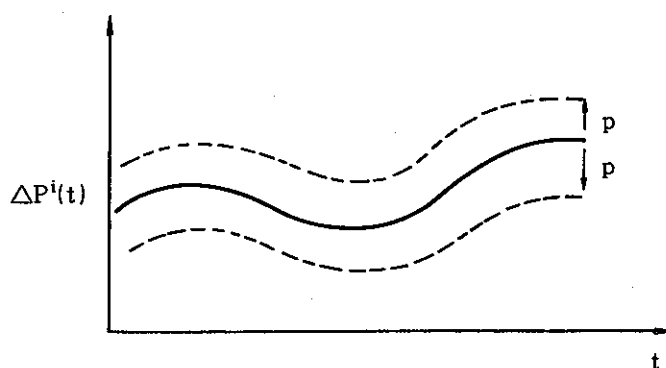


図 2.7 流量変化量 $\Delta F^i(t)$ とパラメーター P

TRANPES ではこの流量変化量 $\Delta F^i(t)$ に対する一様（時間に対して）な流量補正 P を界面変動におけるパラメータとして定義する。 P は界面変化による流量変化パターンを変えることなく、ただパターンを平行移動させるだけである。（図 2.7 参照） P は任意の値をとることはでき

ず、界面レベルの範囲により制約を受ける。全流量変化量を $af\ell(t)$ とおくと、段インデックス i は省略して

$$af\ell(t) = H_s ds\ell(t) + P \quad (2.16)$$

ここで $ds\ell(t) = \frac{d}{dt} fs\ell(t)$

と表わされる。 $af\ell(t)$ が界面変動によって生じたものとし、この仮想的な界面変動関数を $OL(t)$ とおくと、定義により

$$H_s \frac{dOL(t)}{dt} = af\ell(t) \quad (2.17)$$

となる。 $OL(t)$ は図 2.5 に示されているレベル点範囲をはみ出してはならないから、測定時間 t_k におけるレベルの範囲が $L_{\ell,k} \sim L_{\ell+1,k}$ とおくと、

$$L_{\ell,k} \leq OL(t) \leq L_{\ell+1,k} \quad (2.18)$$

の制約条件が導出できる。(2.17) 式を $0 \sim t_k$ まで積分すると、

$$\left. \begin{aligned} H_s \int_0^{t_k} dOL(t) &= \int_0^{t_k} af\ell(t) dt \\ OL(t_k) &= \frac{1}{H_s} \int_0^{t_k} [H_s \cdot ds\ell(t) + P] dt + OL(0) \\ &= \left[fs\ell(t) + \frac{P}{H_s} t \right]_0^{t_k} + OL(0) \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

となり (2.19) 式の右辺の $fs\ell(0)$ と $OL(0)$ はともに $t=0$ における界面レベルの位置を表わしており、初期条件は入力によって明示されるので、 $OL(t) = fs\ell(0)$ となる。したがってパラメータ P の範囲として (2.18) 式より

$$\left[L_{\ell,k} - fs\ell(t_k) \right] \frac{H_s}{t_k} \leq P \leq \left[L_{\ell+1,k} - fs\ell(t_k) \right] \cdot \frac{H_s}{t_k} \quad (2.20)$$

が導かれる。(2.20) 式はレベル測定点 $k = 1 \sim N$ についてそれぞれ設定されるので、この中から最も条件の厳しいものを P の制約条件として選ぶ。

2.1.5 流量計算モデル

抽出器内の流量は“完全押し出し”を仮定して簡単に計算される。段間の流れは図 2.8 のように模式的に表わされる。

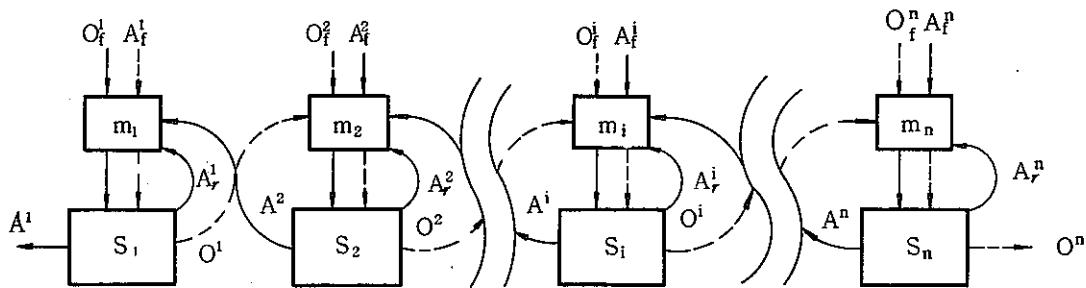


図 2.8 抽出器内の流れ

水相流と有機相流は常に向流であり、並流は取り扱えない。一般に水相流は硝酸塩液、有機相流は30% TBP n-dodecane 液であるが、水と n-dodecane の相互溶解はないと仮定されている。2.1.2で述べたように濃度は S. F. 基準によっているので、図2.6中の A^i , Q^i 等の流量はそれぞれ純粋の水と30% TBP n-dodecaneの流量となる。供給液流量は溶質を含んだ通常のモル濃度で入力されるので、計算の開始前に(2.1), (2.2)式によってS. F. 基準濃度に変換される。また(2.1), (2.2)式には n-dodecane 中に含まれる水分の項があり、実質的には n-dodecane 中に水が溶けこむことを考慮していることになるが、プログラム中ではこれによる水分流量の補正を行っていない。

押し出し流れでは、ある段 i での流量バランスは

$$\begin{aligned} A^i(t) &= A^{i+1}(t) + A_f^i(t) - ds\ell(t, i) \\ O^i(t) &= O^{i-1}(t) + O_f^i(t) + ds\ell(t, i) \quad i = 1 \sim N_s \end{aligned} \tag{2.21}$$

ここで、 $ds\ell(t, i) = H_s^i \cdot \frac{d}{dt} fs\ell(t, i)$

となる。

(2.21)式にて、供給液入力 $A_f^i(t)$, $O_f^i(t)$ は任意であり、最大10個まで指定できる。ただし、第1段には有機相供給液、第 N_s 段には水相供給液が必要である。水相流は第 N_s 段から第1段へ、有機相流は第1段から第 N_s 段へ流れる。(2.21)式はぜん化式となるので水相、有機相とも流れの方向に従って順次流量が計算される。

ミキサ部、セトラ部の相容積は流量が計算された後で、

$$\left. \begin{aligned} H_{ma}^i(t) &= H_m^i \cdot [A^{i+1}(t) + A_f^i(t)] / [A^i(t) + O^i(t)] \\ H_{mo}^i(t) &= H_m^i - H_{ma}^i(t) \\ H_{sa}^i(t) &= H_s^i \cdot fs\ell(t, i) \\ H_{so}^i(t) &= H_s^i - H_{sa}^i(t) \end{aligned} \right\} \tag{2.22}$$

によって計算される。

2.1.6 濃度推定の基本方程式

ミキサ，セトラ抽出器内の濃度分布を推定するためには，濃度分布の時間変化を記述する数式モデルが必要となるが，TRANPES では集中定数化法による微分方程式モデルを採用する。

図 2.9 で示された 1 段のミキサ，セトラ内の濃度分布を 4 個の代表点で近似する。成分は硝酸，ウランおよびプルトニウムの三成分であるから（現 Version ではこれらの 3 個に固定），一つの段では $4 \times 3 = 12$ 個の変数点が定義されることになる。4 個の点とは水相ミキサ，有機相ミキサ，水相セトラ，有機相セトラであり，これら内部の濃度表示をそれぞれ $x_{mj}^i, y_{mj}^i, x_{sj}^i, y_{sj}^i$ （ i は段インデックス， j は成分インデックス）である。これらの濃度間の流れは図 2.9 のようにモデル化できる。

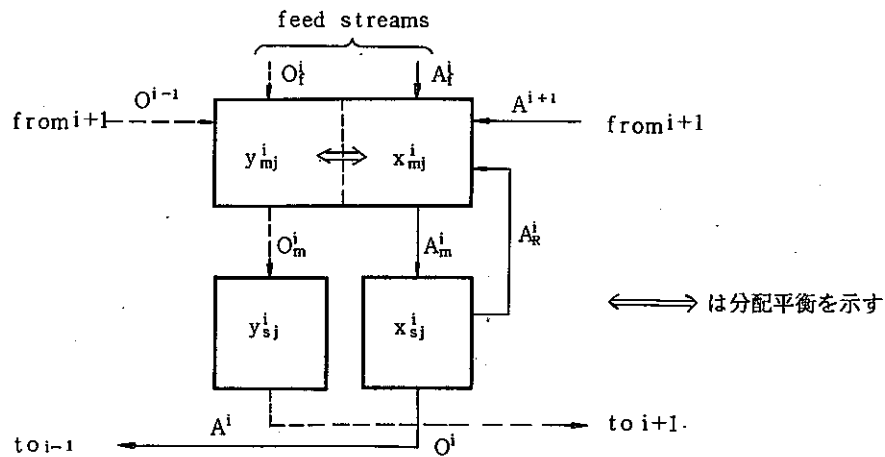


図 2.9 1 段内の濃度点の関係

これらの 4 個の濃度点は (2.20) 式で定義されるホールドアップ量の平均濃度と考え，ステージ間流量，ホールドアップは 2.1.5 のように計算される。ステージ間流量，ホールドアップは微小時間 dt 内では一定とすると，物質収支式は以下のように表わされる。

$$H_{ma}^i \cdot \frac{dx_{mj}^i}{dt} + H_{mo}^i \cdot \frac{dy_{mj}^i}{dt} = A^{i+1} \cdot x_{sj}^{i+1} + O^{i-1} \cdot y_{sj}^{i-1} + A_R^i \cdot x_{sj}^i + A_f^i \cdot x_{fj}^i + O_f^i \cdot y_{fj}^i - A_m^i \cdot x_{mj}^i - O_m^i \cdot y_{mj}^i \quad (2.23)$$

$$H_{sa}^i \cdot \frac{dx_{sj}^i}{dt} = A_m^i \cdot x_{mj}^i - (A^i + A_R^i) \cdot x_{sj}^i \quad (2.24)$$

$$H_{so}^i \cdot \frac{dy_{sj}^i}{dt} = O_m^i \cdot y_{mj}^i - O^i \cdot y_{sj}^i \quad j = 1 \sim 3, \quad i = 1 \sim N_s \quad (2.25)$$

段効率と分配係数 (D_j) によって x_{mj}^i と y_{mj}^i の関係が (2.13) 式で表わされるので， y_{mj}^i は x_{mj}^i によって表わされ消去できる。(2.23) ~ (2.25) 式を差分法で解く際，流入項については前タイムステップの値を，流出項についてはタイムステップ間の平均値を用いると，

差分方程式は以下のようになる。

ミキサ部の差分方程式

$$x_{mj}^i(t + \Delta t) = F_j^i / (H_x^i + H_y^i \cdot E_{fj}^i \cdot D_j) \quad (2.26)$$

$$= [F_j^i + H_y^i \cdot D_j \cdot x_{inj}^i \times (1 - E_{fj}^i) / E_{fj}^i] / [H_x^i + H_y^i \cdot D_j / E_{fj}^i] \quad (2.26)'$$

$$y_{mj}^i(t + \Delta t) = E_{fj}^i \cdot D_j \cdot x_{mj}^i(t + \Delta t) - (1 - E_{fj}^i) \cdot y_{inj}^i \quad (2.27)$$

$$= D_j \cdot x_{mj}^i(t + \Delta t) / E_{fj}^i - (1 - E_{fj}^i) \cdot D_j \cdot x_{inj}^i / E_{fj}^i \quad (2.27)'$$

(2.26)' , (2.27)' 式は水相基準, (2.26) , (2.27) 式は有機相基準段効率を表わす。係数は,

$$H_x^i = A_m^i(t + \tau) \cdot \tau + H_{ma}^i(t + \tau)$$

$$H_y^i = O_m^i(t + \tau) \cdot \tau + H_{mo}^i(t + \tau)$$

$$F_{inj}^i = A_f^i(t + \tau) \cdot x_{fj}^i(t + \tau) + O_f^i(t + \tau) \cdot y_{fj}^i(t + \tau) + A^{i+1}(t) \cdot x_{sj}^i(t) + A_R^i(t) \cdot x_{sj}^i(t) + O^{i-1}(t) \cdot y_{sj}^{i-1}(t) + [H_{ma}^i(t + \tau) - A_m^i(t + \tau) \cdot \tau] \cdot x_{mj}^i(t) + [H_{mo}^i(t + \tau) - O_m^i(t + \tau) \cdot \tau] \cdot y_{mj}^i(t) \quad (2.28)$$

$$x_{inj}^i = [A^{i+1}(t) \cdot x_{sj}^i(t) + A_f^i(t) \cdot x_{fj}^i(t)] / [A^{i+1}(t) + A_f^i(t)] \quad (2.29)$$

$$y_{inj}^i = [O^{i-1}(t) \cdot y_{sj}^i(t) + O_f^i(t) \cdot y_{fj}^i(t)] / [O^{i-1}(t) + O_f^i(t)] \quad (2.30)$$

ここで, Δt は計算タイムステップであり, $t \rightarrow t + \Delta t$ についての差分式である。 τ は $\Delta t / 2$ を表す。

分配係数 D_j^i は (2.10) 式及び (2.11) 式で示されるように水相濃度の非線型関数として表わされる。

$$D_j^i = f(x_{mh}^i(t + \Delta t), x_{mu}^i(t + \Delta t), x_{mpu}^i(t + \Delta t)) \quad (2.31)$$

(2.26) 式または (2.26)' 式は, $x_{mh}^i(t + \Delta t)$, $x_{muo_2}^i(t + \Delta t)$, $x_{mpu}^i(t + \Delta t)$ の三元非線型連立方程式となる。となりの段からの入力 x_s , y_s に前ステップの値を用いたため段毎の連立方程式は独立した方程式である。この仮定を設けたことでミキサ部とセトラ部は別々に解くことができ, 計算時間の短縮がはかれる。TRANPES コードではこの三元連立方程式を分配係数 D_j^i についての反復法によって解いている。

セトラ部の差分方程式

セトラ部の物質収支式は, 水相と有機相は独立した方程式であり, ミキサ部のような反復計算は必要なくなる。前述のようにミキサ部とセトラ部は別々に解くことができ, 且つ TRANPES ではミキサ部の方が先に解かれるので, $t \rightarrow t + \Delta t$ のタイムステップ計算によって,

$x_{mj}(t+\Delta t)$ ($i=1\sim N_s, j=1\sim 3$) はすでに明らかになっている。(2.24) (2.25) 式の流入, 流出項ともに平均値を使って差分化すると, セトラ部の差分方程式は,

$$x_{sj}(t+\Delta t) = \{ [x_{mj}(t) + x_{mj}(t+\Delta t)] \cdot A_m^i(t+\tau) \cdot \tau + [H_{sa}^i(t+\tau) - (A^i(t+\tau) - A_R^i) \cdot \tau] \cdot x_{sj}(t) \} / [H_{sa}^i(t+\tau) + \{ A^i(t+\tau) + A_R^i \} \cdot \tau] \quad (2.32)$$

$$y_{sj}(t+\Delta t) = \{ [y_{mj}(t) + y_{mj}(t+\Delta t)] \cdot O_m^i(t+\tau) \cdot \tau + [H_{so}^i(t+\tau) - O^i(t+\tau) \cdot \tau] \cdot y_{sj}(t) \} / [H_{so}^i(t+\tau) + O^i(t+\tau) \cdot \tau] \quad (2.33)$$

ここで, $\tau = \Delta t/2$

と表わされる。

2.2 最小二乗法による実験データのフィティング

2.2.1 問題の定式化

2.1にてミキサ, セトラ型抽出器内の濃度分布の時間変化を記述する数式モデルが差分方程式によって表わされることを示したが, ここでこれを簡略化して任意の時間点 k における濃度点 i の濃度 x_k^i を

$$x_k^i = f(k, i) \quad (2.34)$$

ここで, x_k^i は 2.1 における $x_{mj}(t), y_{mj}(t)$ 等を含めた濃度記号である。のように表現する。 x_k^i は数式モデルによる計算値であり抽出器内の任意の時間点における任意の段の成分濃度が求まる。数式モデルは実際の抽出器の挙動を模擬しており, x_k^i に対応して実測値データ X_k^i が存在する。ただし, 実測点はサンプリング点と測定間隔の制約から計算点ほど多くは望めないので, 実測点のみから任意の時間の抽出器内の濃度分布を推定するのは困難である。そこで実測値と計算値をうまく組み合わせて, 実際の抽出器内の濃度分布にもっとも近い値を計算するのが TRANPES コードのねらいである。

計算値 x_k^i と実測値 X_k^i とがすべて等しければ (非常に近い値であれば) 計算による濃度分布は実際の抽出器内の濃度をよく表現していると云える。しかし一般に計算値と実測値が一致することはまれである。この原因としては,

実測値側 : 測定過程における誤差

計算値側 : 数式モデル化に含まれる誤差, 例えば分配係数, 物性データが有する誤差が考えられる。

最小二乗法はこの実験値と計算値との差, つまり (2.35) 式の S を最小にするように

$$S = \sum (X_k^i - x_k^i)^2 \quad (2.35)$$

計算値 x_k^i を推定する方法であるが, 本問題では計算値 x_k^i の関数 $f(i, k)$ が 2.1 で示されたような非線型の差分方程式で表わされるため, 一般の最小二乗法にはない困難がある。

2.2.2 最小二乗法によるフィティング

TRANPES における最小二乗法は (2.34) 式で示された計算濃度 x_k^i の関数に段効率, レベル変動の不確定要素をフィティングパラメーターとして考えることによって, 実験値との誤差の二乗を最小にするようにパラメーターを決定する方法である。2.1.6 で示したような集中定数化法による差分方程式によって抽出器内の濃度分布が記述される時に, 実験値と計算値が異なることの主な原因は分配係数の値によるものである。一般に抽出器内では 2.1.2 の分配平衡が完全に成立していることはまれであり, この分配平衡からのずれを表わすのが段効率であるから, フィティングパラメーターとしての段効率は有効なパラメーターとして考えられる。段効率は成分, 抽出器の段によっても異なり, また時間とともに変化することも想定されるので, 全時間点を同じ段効率セットでフィティングするのは適当でない。TRANPES では時間点列 $K (k=0, 1, 2, \dots,)$ をいくつかの時間区分に分けて,



図 2.10 時間区分の定義

それぞれの時間区分 $K_r (r = 1 \sim S)$ ごとに独立にその区分に含まれる実験データと対応する計算点のフィティングを行って最適なパラメーター値を決定する。

数学的には以下に定義される関数 $F (P_r)$

$$\left. \begin{aligned}
 F(P_r) &= \sum_{k \in K_r} \sum_i \{ X_k^i - x_k^i \}^2 \\
 P_r &= (P_r^1, P_r^2, \dots, P_r^p)^T \quad r = 1 \sim S \\
 x_k^i &= f(k, i, P_r) \quad \text{計算値}
 \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

を最小にするようなパラメーター P_r を決定すればよい。(2.36) 式にて計算点 x_k^i を $f(k, i, P_r)$ としたのは差分方程式により時間点 k と測定点 i およびパラメーター値が決定されれば x_k^i が計算できることを意味する。

2.2.3 パラメーターの選択

抽出器内の濃度分布の時間変化を記述する差分方程式を支配するパラメーターとして,

- i) 供給液の流量と成分濃度
- ii) ミキサ, セトラの容積 (ホールドアップ)
- iii) 分配係数
- iv) 段効率
- v) 界面レベルの高さ

の5つの項目が 2.1.6 の差分方程式から挙げられる。この中で i), ii) は入力データとして抽出

器の運転条件が使われる。流量や容積も、ある測定過程を経て得られる値であるから、厳密な意味では確定値として扱えないが、それらの誤差は大きくないことが知られているのでここでは、フィティングのパラメーターとしては採用しない。iii) と iv) の分配係数と段効率を両者合わせて水相と有機相の濃度比を決定するものであるが、分配係数については Richardson の信頼のおけるデータがあるので、段効率のみをフィティングパラメーターとする。分配係数は水相濃度の非線型関数として表現され、分配係数自身をパラメーターとして選ぶと成分毎、段毎に分配係数が異なるため、パラメーター数が非常に多くなり、実質上最小二乗法のフィティングはできなくなる。段効率は分配係数を補正する意味で使用されているので、濃度分布への影響も大きく、フィティングパラメーターとしては適していると云えよう。v) の界面レベルの高さは、2.1.4 で説明されたように実験値データとしてはレベル点の位置の幅が規定されているだけで、正確な値は明示されていないので、フィティングパラメーターとして有効である。

したがって、TRANPES コードでは、

段 効 率
界面の高さ

をフィティングパラメーターとして採用する。

2.2.4 ガウス法による最小二乗法の手順

時間区分 K において最小にすべき目的関数を簡単に

$$F(\mathbf{P}) = \sum_{\ell} \{ X_{\ell} - f(\ell, \mathbf{P}) \}^2 \quad (2.37)$$

とおく。ここで、インデックス ℓ は時間区分 K に含まれるすべての測定点を表わす。前述のように $f(\ell, \mathbf{P})$ はパラメーター \mathbf{P} に関して非線型であるから、線型化法 (Gauss-Newton 法) によって (2.37) 式を最小化する。まず関数 $f(\ell, \mathbf{P})$ を \mathbf{P}_0 点について Taylor 展開し一次の項までに止めると、

$$f(\ell, \mathbf{P}) \doteq f(\ell, \mathbf{P}_0) + \sum_{j=1}^m \frac{\partial f(\ell, \mathbf{P}_0)}{\partial P_j} \cdot (P_j - P_{0j}) \quad (2.38)$$

となり、 $f_{0\ell} = f(\ell, \mathbf{P}_0)$ 、 $\Delta P_j = P_j - P_{0j}$ 、 $Z_{\ell j} = \frac{\partial}{\partial P_j} \cdot f(\ell, \mathbf{P}_0)$ とおくと、

$$f(\ell, \mathbf{P}) \doteq f_{0\ell} + \sum_{j=1}^m Z_{\ell j} \cdot \Delta P_j \quad (2.39)$$

とおける。測定値 X_{ℓ} と計算値 $f(\ell, \mathbf{P})$ との差、即ち誤差 ε_{ℓ} は

$$\varepsilon_{\ell} = X_{\ell} - f_{0\ell} - \sum_{j=1}^m Z_{\ell j} \Delta P_j \quad (2.40)$$

と示され、測定点のすべてについて行列形式で書くと、

$$\epsilon = X - f_0 - Z \cdot \Delta P \tag{2.41}$$

ここで, $Z = \begin{pmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \dots & Z_{1m} \\ Z_{21} & Z_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{n1} & \vdots & \dots & Z_{nm} \end{pmatrix}$

n : は時間区分 K に含まれるすべての測
定点数

$$X = (X_1, X_2, \dots, X_n)^T$$

$$\Delta p = (\Delta P_1, \Delta P_2, \dots, \Delta P_m)^T$$

m はパラメーターの数

$$f_0 = (f_{01}, f_{02}, \dots, f_{0n})^T$$

$$\epsilon = (\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_n)^T$$

となる。

測定値 X_ℓ ($\ell = 1 \sim n$) は成分, 時間, 場所によってオーダーが異なるので, 各測定点における誤差 ϵ_ℓ ($\ell = 1 \sim n$) の分散もそれぞれ異ってくる。しかし一般最小二乗法の理論を応用するためには (2.41) 式の誤差ベクトルが平均値ゼロで一様な分散 σ^2 を持つ確率分布に従わなければならないという規則がある。つまり

$$E(\epsilon) = 0, \quad V(\epsilon) = I \sigma^2 \tag{2.42}$$

である。これを満足させるためには重み行列 W を下の様に

$$W = \begin{pmatrix} 1/\sigma_1^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sigma_2^2 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1/\sigma_n^2 \end{pmatrix}$$

ここで σ_i^2 は測定値 i の分散

定義して, 最小にすべき関数を (2.37) 式の代りに, $e^T W e$ を最小にする, つまり

$$(X - f_0 - Z \Delta P)^T \cdot W (X - f_0 - Z \Delta P) \tag{2.43}$$

を最小にすればよい。

(2.43) 式より ΔP の最小二乗推定量 $\hat{\Delta P}$ に関する正規方程式が

$$\left. \begin{aligned} A \hat{\Delta P} &= b \\ A &= Z^T \cdot W Z \\ b &= Z^T \cdot W \cdot (X - f_0) \end{aligned} \right\} \tag{2.44}$$

が導出される。正規方程式の導出については, 付録 4.2 に述べる。

$\hat{\Delta P}$ が (2.44) 式によって計算されたなら,

$$\hat{P} \leftarrow P_0 + \hat{\Delta P} \quad (2.45)$$

とし, この推定量 \hat{P} を用いて (2.44), (2.45) 式からの計算を, $\hat{\Delta P}$ が十分小さくなるまでくり返す。

以上の Gauss 法では 1 ステップ毎にヤコビ行列 Z の計算が必要となるが, 計算濃度点 $x_\ell (= f(\ell, P))$ はパラメータ P の陽の関数でないので直接偏微分値を計算することはできない。ここでは数値差分で偏微分を計算する。

Newton の前進差分公式により,

$$Z_{\ell j} \equiv \frac{\partial f(\ell, P)}{\partial P_j} \equiv \frac{\partial x_\ell}{\partial P_j} \doteq \frac{x_\ell(P + \delta_j e_j) - x_\ell(P)}{\delta_j} \quad (2.46)$$

となる。 e_j はパラメータの第 j 成分が 1 で他の成分はすべてゼロの単位ベクトル, δ_j は数値微分用のきざみ幅である。 $x_\ell(P + \delta_j e_j)$ は $P + \delta_j e_j$ というパラメータ値において差分方程式によって計算された測定点 ℓ の濃度である。 Gauss 法の 1 回の反復過程毎にヤコビ行列 Z が必要となるから, そのたびにパラメータ数 (m) だけの時間区分内の差分方程式による過渡計算を実行しなければならない。

2.2.5 カルマン・フィルタによる濃度分布の推定 (最小二乗法との比較)

線型の差分方程式で表わされるシステムの状態推定にはカルマン・フィルタ⁵⁾による方法がある。 Purex 法の溶媒抽出工程にカルマン・フィルタを応用した例⁶⁾もあるのでカルマン・フィルタの方法の概略を示し TRANPES へ応用した場合の問題点を述べる。

2.1.6 において抽出器内の濃度分布を記述する微分方程式から差分方程式への展開に際して分配係数, 段効率等が濃度の非線型関数でないと仮定すると, この差分方程式系は線型システムとなり, 濃度点ベクトル x_K は (2.47) 式のような形で表わされる。

$$x_{K+1} = A_K \cdot x_K + B_K u_K \quad (2.47)$$

$$K = 0, 1, 2, \dots \text{ (時間列)}$$

ここで, u_K : r 次元の確率変数ベクトル

A_K : $n \times n$ 次元の確定行列

B_K : $n \times r$ 次元の確定行列

n : 濃度点ベクトルの次元

u には白色ランダム系列とみなされ, 差分方程式における定数項目をまとめたものと, 数式モデル化による誤差の項目を含んでいる。 u_K の平均値, 分散は既知とする。濃度ベクトル x_K は推定すべき信号であり, 直接測ることはできないが, 次のような測定機構を通して, 出力(つま

り測定値) y_k ($K = 0, 1, 2, \dots$) が測れる。

$$y_k = C_k \cdot x_k + w_k \quad (2.48)$$

ここで, $C_k = m \times n$ の確定行列

$w_k = m$ 次元の誤差ベクトル

とすると, 問題は出力 y_k ($K = 0, 1, 2, \dots$) を得て, 信号 x_k の最もよい推定値を構成することである。詳細な説明は成書⁵⁾にゆずるが, 数学的には, 信号 x_k の推定値は測定値 y_0, y_1, \dots, y_k の線型演算として (2.49) 式

$$\hat{x}_k = d_k + \sum_{\ell=0}^k F_{k\ell} y_\ell \quad (2.49)$$

ここで, d_k : n 次元定数ベクトル

$F_{k\ell}$: $n \times m$ 次元定数行列

に従うものとし, 問題を誤差ベクトル

$$e_k = \hat{x}_k - x_k \quad (2.50)$$

の分数行列が二次形式の意味で最小になるように d_k と $F_{k\ell}$ を定めることにおきかえる。このようにして求めた \hat{x}_k が最小二乗推定量となる。

このカルマン・フィルターによる方法はパルスカラムの溶媒抽出工程へも応用された例がある。⁶⁾ J. V. Candy⁶⁾ からも分配係数として Richardson のデータを使用しており, 問題となる非線型項は一次の Taylor 展開によって線型化している。基本式は,

$$\dot{x}_k = f(x_k) + g(u_k) + w_k \quad (2.51)$$

ここで, $f(x_k) = F \cdot x_k + f_d(x_k)$

$g(u_k) = G \cdot u_k$

F : $n \times n$ の確定行列

G : $n \times m$ の確定行列

w_k : n 次の白色雑音

u_k : m 次元の定数ベクトル

と表わされ, 入力パラメーターの不確定性, モデル化による誤差を考慮するため, 白色ノイズ (White Gaussian noise) w_k を (2.51) 式に導入している。

以上のように Purex 法の溶媒抽出工程にはカルマン・フィルターを応用した例はあるが, TRANPES にてこれを採用するには次のようないくつかの問題点がある。

i) 計算時間がかかり過ぎる

最小二乗推定量 x_k はいくつかの行列演算によって求まるが, 濃度点数の次数 n は 2.1 で述

べたモデルでは、20 段の抽出器の場合

$$n = 20 \times 3 \times 3 = 180$$

となり、行列演算（逆行列演算）だけでもかなりの量となる。計算ステップ数が1000以上になることもまれではない。

- ii) 測定値 y_k [$K = 0, 1, 2, \dots$] を計算タイムステップと同じ間隔で得る事は困難である。測定値の間隔が粗くても計算はできるが手順はさらに複雑になる。Neutron Recorderの様に連続計測データなら時間間隔は自由にとれるが、サンプリングによる分析ではかなり間隔は大きくなる。

2.3 信頼区間

2.3.1 線型化近似による信頼区間の推定^{7,8)}

Gauss 法の線型化最少二乗法によって時間区分毎に測定値と計算値の誤差の二乗和を最小にするような最小二乗推定パラメーター \hat{P} が決定され、これを用いて抽出器内全段の濃度分布が計算される。このように計算された最小二乗推定量 \hat{P} の近傍では濃度関数 $f(k, l, \hat{P})$ (つまり差分方程式) が十分に線型に近似できるとして、 \hat{P} の分散を線型近似により求める。

\hat{P} に十分近い点 P_0 から \hat{P} が計算されたと仮定すると、

$$\hat{P} = P_0 + \Delta \hat{P} \tag{2.52}$$

であり、 $\Delta \hat{P}$ は (2.4 4) 式より

$$\left. \begin{aligned} \Delta \hat{P} &= A^{-1} Z^T \cdot W(X - f_0) \\ \text{ここで, } A &= Z^T \cdot WZ \end{aligned} \right\} \tag{2.53}$$

と書ける。点 P_0 付近での線型性を仮定すれば、(2.5 3) 式より最小二乗推定量 \hat{P} は定数ベクトル P_0 に推定量 $\Delta \hat{P}$ を足したものであるから $\Delta \hat{P}$ の分散が \hat{P} の分散そのものになると考えられる。 $\Delta \hat{P}$ は確率変数 ΔP の期待値であるから、 ΔP の分散は以下のように計算される。

$$\begin{aligned} \Delta P - \Delta \hat{P} &= A^{-1} A \cdot \Delta P - A^{-1} Z^T W(X - f_0) \\ &= A^{-1} [A \Delta P - Z^T W(X - f_0)] \\ &= A^{-1} [Z^T WZ \cdot \Delta P - Z^T W(X - f_0)] \\ &= A^{-1} \cdot Z^T W(Z \cdot \Delta P - X + f_0) \end{aligned} \tag{2.54}$$

(2.4 1) 式より $\epsilon = Z \Delta P + f_0 - X$ であるから、

$$\Delta P - \Delta \hat{P} = A^{-1} Z^T W \epsilon \tag{2.55}$$

となり、その期待値は、

$$E \{ (\Delta \mathbf{P} - \Delta \hat{\mathbf{P}}) (\Delta \mathbf{P} - \Delta \hat{\mathbf{P}})^T \} = E \{ \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{Z}^T \cdot \mathbf{W} \varepsilon \varepsilon^T \mathbf{W}^T \mathbf{Z} (\mathbf{A}^{-1})^T \} \quad (2.56)$$

となる。ε ε^T 以外はすべて確定値であり、且つ (2.42) 式より、

$$E (\varepsilon \varepsilon^T) = \mathbf{W}^{-1} \sigma^2 \quad (2.57)$$

が定義されるから、

$$\begin{aligned} E \{ (\Delta \mathbf{P} - \Delta \hat{\mathbf{P}}) (\Delta \mathbf{P} - \Delta \hat{\mathbf{P}})^T \} &= \mathbf{A}^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{W} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{W}^T \mathbf{Z} (\mathbf{A}^{-1})^T \sigma^2 \\ &= \mathbf{A}^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{W}^T \mathbf{Z} (\mathbf{A}^{-1})^T \sigma^2 \\ &= \mathbf{A}^{-1} \cdot \sigma^2 \end{aligned} \quad (2.58)$$

となる。行列A, Wは対称行列であるから (A⁻¹)^T = A⁻¹, W^T = W となる。

結局、パラメータ Δ $\hat{\mathbf{P}}$ の分散は

$$\begin{aligned} V(\Delta \hat{\mathbf{P}}) &= \mathbf{A}^{-1} \sigma^2 \\ &= (\mathbf{Z}^T \mathbf{W} \mathbf{Z})^{-1} \sigma^2 \end{aligned} \quad (2.59)$$

と推定できる。誤差の分散 σ² は推定値の不偏分散 s² で置き換える。

測定点 l における推定濃度 \hat{x}_l は

$$\hat{x}_l = f(l, \mathbf{P}_0) + \mathbf{Z}_l \cdot \Delta \hat{\mathbf{P}} \quad (2.60)$$

ここで、 $\mathbf{Z}_l = \left(\frac{\partial f(l, \mathbf{P}_0)}{\partial P_1}, \frac{\partial f(l, \mathbf{P}_0)}{\partial P_2}, \dots \right)^T$

と表わされるから、 $f(l, \mathbf{P}_0)$ を定数とみなせば推定値 \hat{x}_l の分散は $\mathbf{Z}_l \cdot \Delta \hat{\mathbf{P}}$ の分散と考えられ、

$$V(\hat{x}_l) = V(\mathbf{Z}_l \Delta \hat{\mathbf{P}}) = s^2 \cdot \mathbf{Z}_l^T (\mathbf{Z}^T \mathbf{W} \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}_l \quad (2.61)$$

となる。推定値 \hat{x}_l の 100 (1 - α) % 信頼区間は Student の t - 分布値を用いて、

$$\hat{x}_l \pm t(n-p, 1 - \frac{\alpha}{2}) s \sqrt{\mathbf{Z}_l^T (\mathbf{Z}^T \mathbf{W} \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}_l} \quad (2.62)$$

と表わされる。不偏分散 s² は

$$s^2 = \sum_i W_i [X_i - f(i, \hat{\mathbf{P}})]^2 / (n-p) \quad (2.63)$$

i : は時間区分に含まれるすべての測定点を示す

n : 測定点数

p : パラメーター数

と計算される。

2.3.2 信頼区間の性質

パラメーター P の分散行列は(2.59)式により

$$V(P) = (Z^T W Z)^{-1} \sigma^2 \quad (2.59)$$

と計算される。このパラメーターの分散から(2.61)式により濃度計算値 \hat{x}_e の分散が求められ、さらに(2.62)式により濃度計算値の信頼区間が計算される。これらの式は濃度計算値 \hat{x}_e の関数 $f(l, P)$ がパラメーター P に関して線型であるという仮定のもとに展開して得られたものであるから、非線型性が強いと信頼区間は確かなものでなくなる。また(2.59)式の行列 Z は測定点における感度 $\frac{\partial x_{ke}}{\partial p_j}$ によって構成されるので、分散を計算するために使われる濃度測定点の感度と、任意の濃度計算点の感度が大きく異なると、そのような濃度計算点の信頼区間は確かなものでなくなる。例えば17段からなる抽出器各段の濃度の過渡変化を求める時、パラメーターとして段効率を選び、測定値として7, 12段の濃度が得られる場合を考えてみると、最小二乗法はこの7と12段の測定濃度と計算濃度の差の二乗和を最小にすることであり、考慮される関数も7段と12段だけである。このため(2.59)式で定義される分散行列も7段と12段の性質つまり感度によって決定される。そして、この分散行列を使って他の段の濃度計算値の信頼区間を計算する。したがって、7, 12段以外の段における濃度の段効率に対する変化割合、感度 $(\frac{\partial x}{\partial p})$ が、7, 12段の感度と同様の挙動を示す場合は、精度良い信頼区間を求めうる事が期待される。しかし、抽出器内の各段における、段効率に対する濃度の変化割合、感度 $(\frac{\partial x}{\partial p})$ は、段の位置等によってかなり異なると考えるべきであり、例えば、洗浄段の中でも12段とスクラブ液が供給される17段では感度も大きく異なると思われる。

この様な状況を考えてみると線型近似による信頼区間の推定は、ある程度限定された方法となり、その適用については測定点の数、配置などに十分な考慮が必要である。抽出器内の濃度を精度良く求めるには、抽出器内の各段の特質を知るとともに、全段の濃度変化を追跡するに十分な数の測定点を設定しなければならない。

2.3.3 計算例による信頼区間の考察

最小二乗法によって、実測値からパラメーターを推定するフィティング計算の状況は、付録3の計算例に示されているが、模式的に図2.11の様に表示される。

パラメーターとして段効率を選択した場合も、界面位置を選択した場合も、抽出器の濃度変化を十分に追跡できる。

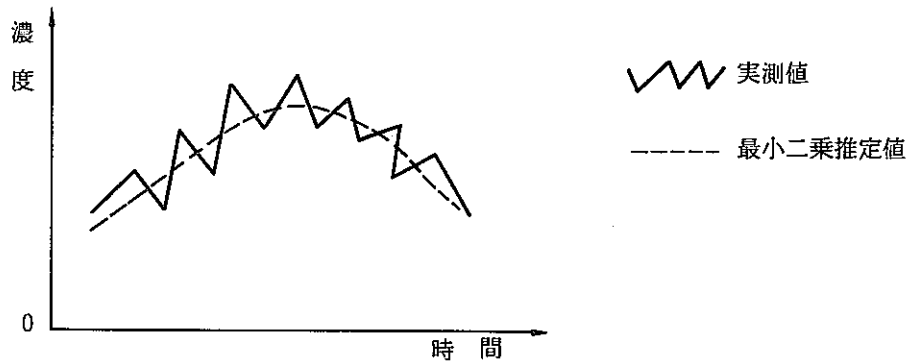


図 2.1 1 実測値-推定値のモデル図

最小二乗推定値と実測値との間の誤差はランダム誤差と仮定し、この誤差を基にして線型近似によりパラメーターの分散（即ち誤差）が計算される。分散で示されるパラメーターの不確定さの濃度計算値への影響は時間、段および成分によって異なり、各段における感度を用いてある時間におけるある段の成分濃度の誤差の大きさを求めて信頼区間を算出している。

前節で、TRANPES コードにおける信頼区間推定法の問題点について考察したが、ここでは付録 3 に記載されている計算例を引用して信頼区間の性質をより具体的に説明する。計算例の中で、段効率をパラメーターとした計算例 1 及び 2 の計算結果について述べる。

表 2.1 に、計算例 1 および 2 における段効率、濃度測定点の設定を示す。

表 2.1 計算例 1 および 2 における段効率、濃度測定点の設定

計算例	段効率の設定	濃度測定点の設定
1.1	全段（1～17段）で共通とする	7 および 12 段水相の成分濃度を測定する。
1.2		1, 7, 9, 12, 17 段水相の成分濃度を測定する。
2.1	抽出段（1～9段）と洗浄段（10～17段）の2つに分ける	7 および 12 段水相の成分濃度を測定する。
2.2		1, 7, 9, 12, 17 段水相の成分濃度を測定する。

表 2.2, 2.3 に各計算例の T = 8 Hr における水相成分濃度の 90 % 信頼区間巾を示す。

- 1) 濃度測定点の少ない計算例 1.1 及び 2.1 では、90 % 信頼区間巾が大きく、計算例 2.1 では 100 % を越える 90 % 信頼区間巾が現れている。しかし、濃度測定点の数を増した計算例 1.2 および 2.2 では 90 % 信頼区間巾は狭くなる。すなわち、濃度測定点の数を増すと、濃度計算

表 2.2 計算例 1 の 90%信頼区間巾

段	計算例 1. 1		計算例 1. 2	
	U	Pu	U	Pu
1	32	37	29	32
2	44	66	29	34
3	32	36	28	33
4	29	35	26	31
5	26	30	23	27
6	22	23	19	21
7	16	15	15	13
8	11	10	9	7
9	5	8	3	2
10	13	21	3	4
11	1	1	1	1
12	1	2	0.4	1
13	1	1	0.3	0.3
14	0.1	0.2	0.1	0.1
15	1	2	0.2	0.3
16	3	4	1	1
17	5	6	1	1

$$90\% \text{信頼区間巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間の下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100 \quad [\%]$$

表 2.3 計算例 2 の 90 % 信頼区間巾

段	計算例 2. 1		計算例 2. 2	
	U	Pu	U	Pu
1	35	41	29	32
2	49	74	29	34
3	35	42	28	33
4	31	38	26	30
5	28	32	23	26
6	23	24	19	21
7	17	17	14	13
8	13	16	9	7
9	7	15	3	3
10	35	51	4	6
11	22	21	2	3
12	21	20	1	2
13	27	28	1	1
14	41	42	1	2
15	80	73	2	4
16	221	176	5	8
17	731	572	13	22

$$90\% \text{信頼区間巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間の下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100 \quad [\%]$$

値の信頼性は向上する。

- 2) 表 2.2 および表 2.3 より, 90 %信頼区間巾の値は, 抽出器の各段において異なっており, 例えば計算例 1.2 では 0.1 ~ 34 %の値をとる。

一方, 運転データの濃度測定値は, MIXSETの計算値に, 計算値の 5 %のランダム誤差 (標準偏差) を加えたものである。このランダム誤差による各濃度測定点の 90 %信頼区間巾を累積正規分布表より求めると, 90 %信頼区間はほぼ

$$\mu \pm 1.282 \sigma$$

但し, μ は平均値, σ は標準偏差 (σ^2 は分散) である
となり, 90 %信頼区間巾は,

$$1.282 \times 5 \times 2 = 12.8 \%$$

となる。すなわち, 90 %信頼区間巾の真の値は約 13 %であると云える。

前節で説明したように, 段効率の分散の大きさは, 濃度測定点の中で最も大きい感度を示す濃度測定点の感度によってほぼ決定される。計算例 1.2 の濃度測定点は 7, 9, 12, 17 段であるが, 表 2.2 より 7 段のウラン, プルトニウムの 90 %信頼区間巾が 13 ~ 15 %となっており, 7, 9, 12, 17 段の中で 7 段の感度が最も大きく, これがパラメーターである段効率の分散の大きさをきめている事がわかる。計算例 2.2 では, 段効率を抽出部の段効率と洗浄部の段効率に分け, 抽出部では 7, 9 段が, 洗浄部では 12, 17 段が濃度測定点であるが, 表 2.3 より, 抽出部では 7 段の, 洗浄部では 17 段の 90 %信頼区間巾が 13 ~ 22 %となっており, これらの段における感度がそれぞれの段効率の分散を決めている事がわかる。

以上述べた様に, 同じ実験データについてフィティングした場合でも, 段効率の設定範囲及びこれに関連して測定点の位置によって, 90 %信頼区間の巾は変る。これは, 信頼区間の巾が, その段の感度に強く結びついているためである。したがって, より確かな 90 %信頼区間を求めするためには, 同じ様な感度を示す段を一つのブロックとして, これに対して一つの段効率と一つの濃度測定点を設定する事が必要である。

3. 参 考 文 献

- 1) D. D. Cobb, C. A. Ostenak, "Dynamic Material Accounting For Solvent - Extraction Systems" LA-UR-79-3221(1979)
- 2) 権田浩三他 "Purex プロセス計算コード Revised MIXSET" PNCT841-79-26(1979)
- 3) G. L. Richardson, " The Effect of High Solvent Radiation Exposures on TBP Processing of Spent LMFBR Fuels", HEDL-TME 73-51(1973)
- 4) S. B. Watson, R. H. Rainey, " Modification of The SEPHIS computer code for calculating the Purex Solvent Extraction System" ORNL-TM-5123(1975)
- 5) 有本 卓 "カルマン・フィルター" 産業図書(1977)
- 6) J. V. Candy, G. K. Patterson, " Process Monitor Design for an Extraction Column, An Application of Estimation/Detection" UCID-18128(1979)
- 7) N. ドレーパー, H. スミス, " 応用回帰分析" 森北出版(1967)
- 8) 小山謹二, 笹本宣雄 "非線型最小二乗法コード「LSQKGD」" JAERI-M5133(1973)
- 9) 市田浩三, 吉本富士市, "スプライン関数とその応用" 数育出版(1979)
- 10) 吉村 功 "数理統計学" 培風館(1969)
- 11) その他, 参考とした成書
岡村総吾, 寺尾 満, "測定論 I" 岩波書店(1969)
小松昭英, 梅田富雄, "プロセスシステム設計" 工業調査会(1973)

付録1 プログラムについて

1.1) 仕様

TRANPES コードの仕様は以下の通りである。

使用言語：FORTRAN-4 (CDC6600 FORTRAN Extended)

使用機種：CDC6600 又はCYBER74

プロッターはCALCOMP 1136

1.2) プログラムの構成

TRANPES は 1 個のメインプログラムと 41 個のサブプログラムからなっている。以下に各サブプログラムの機能を簡単に説明する。

TRANPES : メインプログラムであり、時間区分毎の最小二乗法によるフィティングの制御を行う。

INPUT : 入力データの読み込みを行う。入力は Keyword 方式による。Free Format 入力であるから必要な項目だけを入力すればよい。

FREAD : Free Format 入力ルーチン

INPRT : 入力データのプリントを行う。

DATST : 計算に必要な定数のセット。実験データの濃度と供給液の流量と濃度を Solute free unit へ変換する。

DENFC : Molarity から Solute free unit への変換定数を計算する。

INITL : 初期濃度をプリントする。

LEVEL : 界面レベル変動の変化を近似するスプライン関数型を決定する。時間区分に含まれるレベル点をサーチしそれを sub. SPLNE へ送り係数を計算する。

SPLNE : 一次導関数連続という条件のもとで三次スプライン関数の係数を計算する。

TRIBN : 三角対重行列を係数とする連立方程式を解く。

VSPLN : 三次スプライン関数の係数を用いて任意の時間の値を補間する。

FSLFC : 任意の段の界面レベル高さを計算する。レベル変動が時間依存のデータで与えられた場合は sub. LEVEL で決定されたスプライン関数を用いる。

DSLFC : 任意の段の界面レベル高さの時間微分値を求める。

FITPT : 時間区分に含まれる測定値データを最小二乗法ルーチンへ送るためにピックアップする。フィティング点の個数はここで決まる。

SFVOL : 供給液の濃度と流量, Solute-free unit の抽出器の各段のホールドアップを計算する。時間区分毎に 1 個 call される。

FLAWS : 段間の流量と相容積を計算する。

STPRM : フィティングパラメーターの上下限を設定する。

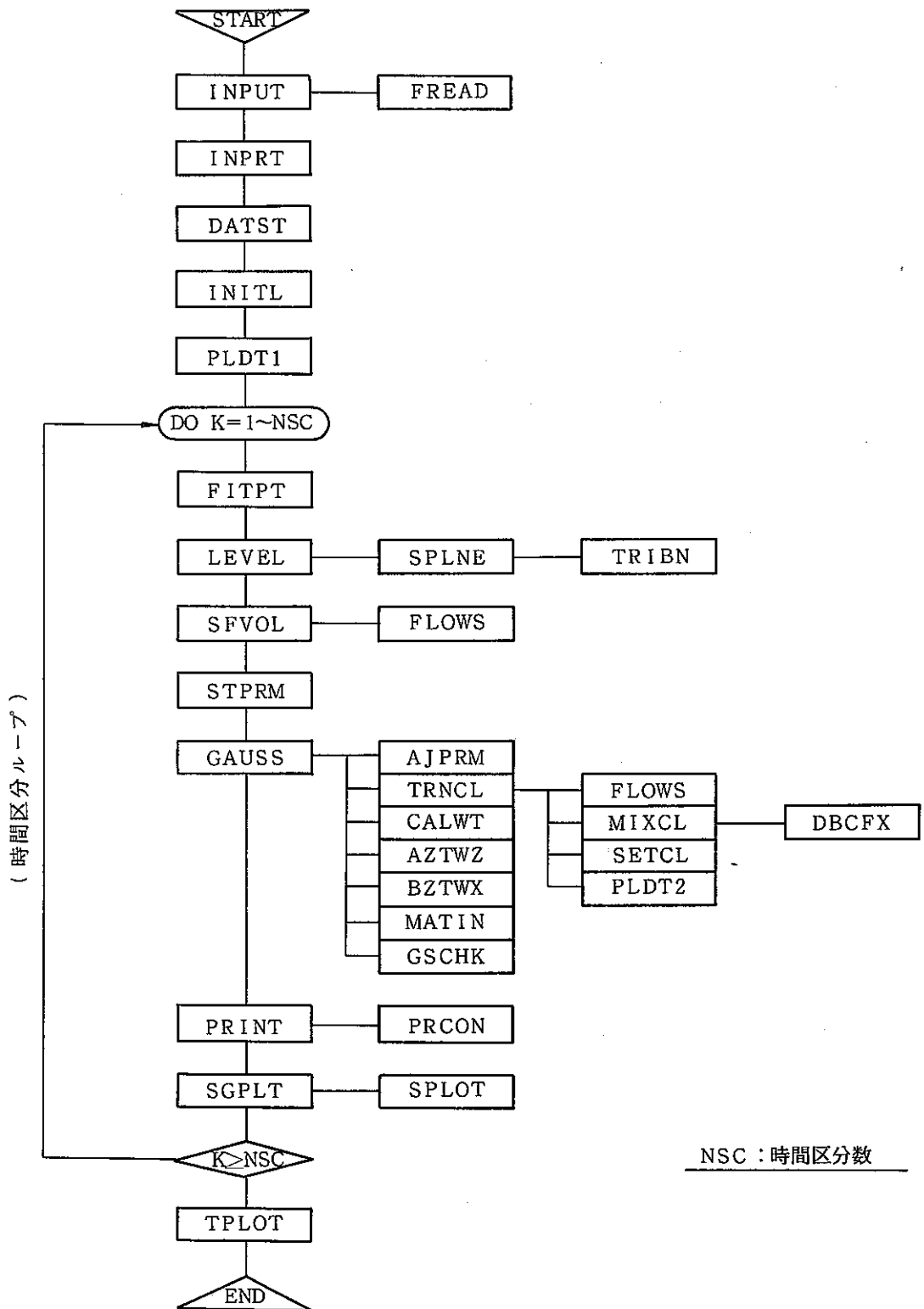
GAUSS : ガウス法による最小二乗法ルーチン, 測定点濃度の偏微分値を求めるための過渡計算ルーチンを呼ぶ。この偏微分値よりパラメーターに関する正規方程式を解き,

最小二乗推定値が得られるまでくり返し計算が実行される。

- AJPRM : GAUSS ルーチンにて設定されたパラメーター値に対応して段効率やレベル高さを変更し、過渡計算ルーチンへの連絡をする。
- CALWT : 測定データ点の濃度の分散より最小二乗法の重み行列を計算する。
- AZTWZ : $A = Z^T W Z$ の行列演算を実行する。
- BZTWX : $b = Z^T \cdot W \cdot (X - x)$ の行列演算を実行する。
- TRNCL : 抽出器内の過渡的濃度変化を与えられた時間区分について計算する。時間区分の始めの濃度分布が入力され、時間区分の終りの濃度分布が出力される。実質的な差分方程式を解くルーチンではなく計算ステップの制御を行う。
- MIXCL : 抽出器ミキサ部の差分方程式を1ステップ解く。
- SETCL : 抽出器セトラ部の差分方程式を1ステップ解く。
- DBCFX : 1段(ミキサ)の与えられた水相濃度に対する分配係数を計算する。
- GSCHK : GAUSS ルーチン内の最小二乗反復の収束をチェックする。
- PATRN* : パターン探索法による最小二乗法ルーチン。
- CMPLX* : コンプレックス法による最小二乗法ルーチン。
- PRINT : 時間区分セット毎に計算結果をプリントする。実験値 vs. 実測値, 抽出器内濃度分布。
- PRCON : 抽出器内の各段の濃度分布を90%信頼区間とともにプリントする。
- PLDT1 : プロッター用のデータ等の初期セットを行う。
- PLDT2 : 濃度の時間変化プロット用のデータをタイムステップ毎に保存する。
- TPLOT : 計算終了時にコールされ、PLDT2により保存された濃度データを用い“実測値 vs. 計算値プロット”をTAPE7に作成する。
- SGPLT : 時間区分毎に入力で指定された抽出器内濃度分布プロット用のデータを取り出し対応する実測値とともにSPLOTルーチンへ送る。
- SPLOT : SGPLTよりコールされ、ある時間の抽出器内濃度プロファイルプロットをTAPE7に作成する。
- SCALE : プロット用濃度データのスケーリングを行う。
- HEADR : 出力リストにタイトルをプリントし、改ページする。
- TERPN : 1次元配列の表入力データの内挿ルーチン。
- ITERP : 内挿のためのインデックス探索ルーチン。
- MEMST : 配列の定数セットルーチン。
- MEMOV : 配列から配列へのデータ転送ルーチン。

以上のサブルーチン内で*印のついたCMPLXとPATRNはダミールーチンであり、今後のVersion upの際機能を追加する予定である。

付図 1.1 にメインプログラムTRANPES内の各サブルーチンの概略フローを示す。



付図 1.1 TPANPES 概略フローチャート

1.3) 入力仕様

TRANPESの入力はKeyword方式のFree Format入力で行われる。1枚の入力カードはKeyword, DataとSeparatorの3種から構成されている。

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4文字以上の時、最初の4文字のみが意味をもつ。

Separator : KeywordとData, DataとDataとの区切りを示す。

blank, カンマ(,), カッコ(()), \$のいずれでもよい。

これらのSeparatorが2つ以上あっても機能は同じである。

Data : 入力データ, Separatorによって区切られる。データ形式としては数字とホリス定数の2種ある。

数字=整数と実数(10.0, 1.0E+1, 1+1, 1+1等)

ホリス=nH○○…○(n≤8)

カラム1~80の任意のカラムから始まってもよく、80カラム以内におさまらない場合は\$記号を使えば次のカードへData領域が続く。以下に説明される特殊characterは特別な意味をもつ。

Asterisk * : このカラム以降がコメントであることを示す。Keywordの代わりに*を使うとこのカードがtitleカードとして処理される。titleカードが2枚以上ある場合は最初のカードのみがtitleとなり他はコメントカードとされる。

Dollar\$: Separatorであると同時にDataが次のカードに続くことを表わす。

Repetition. R : データのrepetitionを示す。例えば1.0R4とパンチすると1.0が4個という意味となる。

TRANPESコードにて使用されている入力カード(keyword)を付表1.1に示す。

付表1.1 入力カード(keyword)の種類

番号	Keyword	内 容
1	STAGe	抽出器の段数と容積
2	FEEDs	供給液の入力段, 流量と成分濃度
3	RECYcle	水相のリサイクルフロー流量
4	EXPERiment	実測値の段, 成分と時間依存の濃度と分散
5	LEVEl	界面レベルの時間変化
6	PARAMeter	フィティングパラメーターの選択
7	INITial	初期濃度分布
8	TOLerance	収束計算の反復上限と許容誤差
9	CONTRol	制御変数
10	EFFIciency	段効率の初期値設定
11	DISTRibution	分配係数
12	SPLOT	濃度プロファイルプロットの設定
13	ENDEd	データ入力の終了

* DISTRibutionカードは現versionでは組み込まれていない。

付表 1.1 の keyword は意味を明確にするため全キャラクター・ストリングを書いたが、意味があるのは大文字で書いた 4 文字だけである。

TRANPES では成分は 3 個と固定され、成分番号によって指示される。

成分 1 = HNO₃

成分 2 = UO₂²⁺

成分 3 = Pu⁴⁺

である。

カード 1

STAG NST, [VMX(i), i=1~NST], [VST(i), i=1~NST]

NST : 抽出器の段数 (≤ 21)

VMX : ミキサ部の容積 (ℓ)

VST : セトラ "

カード 2

FEED I, (t₁, f₁, C_H¹, C_U¹, C_P¹), (t₂, f₂, C_H², C_U², C_P²),

I : 供給液の入力段, I > 0 なら水相流

I < 0 なら有機相流

t_i : 時間 (hr)

f_i : t_i における供給液流量 (ℓ/h)

C_Hⁱ : " 供給液の硝酸濃度 (N)

C_Uⁱ : " U(VI) 濃度 (g/ℓ)

C_Pⁱ : " P_u (IV) 濃度 (g/ℓ)

カード 3

RECY [RCL(i), i=1~NST]

RCL : 抽出器各段のリサイクルフロー流量 (ℓ/h)

カード 4

FXPE J, I, [TMS(1), CMS(1), VRC(1)], [TMS(2), CMS(2), VRC(2)],

J : 成分番号

I : 入力段を示すインデックス, 入力段を i とすると,

水相ミキサ (x_uⁱ) : I ← i

有機相ミキサ (y_uⁱ) : I ← i + 100

水相ミキサ (x_sⁱ) : I ← i + 200

有機相ミキサ (y_sⁱ) : I ← i + 300 となる。

TMS : 時間 (h)

CMS : 濃度 (N for HNO₃, g/ℓ for UO₂²⁺, Pu⁴⁺)

VRC : 測定濃度CMSの分散

カード5

LEVE I, HLT(I), [HTM(1), LVL(1)], [HTM(2), LVL(2)],

I : 界面レベルの入力段

HLT : 段Iの初期レベル高さ(0.~1.0)

HTM : 時間

LVL : HTMに対応するレベル位置(1~7)

レベル位置は1~7までの整数で表わされ、これに対応する高さは、

LVL=1	1.0	~0.833
2	0.833	~0.633
3	0.633	~0.533
4	0.533	~0.467
5	0.467	~0.367
6	0.367	~0.167
7	0.167	~0.

である。

カード6

PARA N, NSP(N), NSL(N), PMO(N), PMD(N), if NSP(N)=0

N : パラメーター番号(≤10)

NSP : =0, パラメーターは界面レベル位置である。

NSL : レベル位置の段番号

PMO : レベル位置内の初期高さ

PMD : ガウス法における増分値

PARA N, NSP(N), NSL(N), NSR(N), PMU(N), PML(N), PMO(N), PMD(N)

if NSP(N)≠0

N : パラメーター番号

NSP : NSP≠0の場合パラメーターNは段効率である、|NSP|が成分番号を示し、NSP>0なら水相、NSP<0なら有機相定義の段効率を表わす。

NSL : 段効率が適用される抽出器の最初の段番号

NSR : " " 最後の "

PMU : 段効率の上限(≤1.0)

PML : " " 下限(≥0.)

PMO : 段効率の初期値

PMD : ガウス法における増分値

カード7

INIT $[[X_m(j, i), j=1\sim 3], i=1\sim \text{NST}]$,
 $[[y_m(j, i), j=1\sim 3], i=1\sim \text{NST}]$,
 $[[x_s(j, i), j=1\sim 3], i=1\sim \text{NST}]$,
 $[[y_s(j, i), j=1\sim 3], i=1\sim \text{NST}]$
 X_m : ミキサ部水相の初期濃度 (mole/l)
 y_m : ミキサ部有機相 "
 x_s : セトラ部水相 "
 y_s : セトラ部有機相 "

カード8

TOLE IMR, EMR, MIT, ECN, EPM
IMR : ミキサ部での1段内の反復上限数 (20)
EMR : " の収束許容誤差 (10^{-3})
MIT : ガウス法における最大反復数 (10)
ECN : " 実験データと計算濃度の許容誤差 (10^{-2})
EPM : ガウス法の最小二乗法反復におけるパラメーターの収束許容誤差 (10^{-3})
()内は入力を省略した時の値

カード9

CONT LSM, IFL, ILV, NSC, TFN, TAU, DPL, [TSC(i), NPR(i),
 $i=1\sim \text{NSC}$]
LSM : 最小二乗法オプション, 現在は LSM=0 のみ
IFL : ダミ-Version up の際利用する。
ILV : "
NSC : 時間区分数 (≤ 20)
TFN : 計算する時間 (h)
TAU : タイムステップ (h)
DPL : 過渡濃度変化プロットの時間幅, DPLはTAUの整数倍であること,
DPL=0 ならプロットは作成されない。
TSC : 時間区分の長さ (h), $\text{TFN} = \sum \text{TSC}(i)$
NPR : 各時間区分内のプリント数

カード10

EFFI J, [EFC(j, i), $i=1\sim \text{NST}$]
J : 段効率を指定する成分番号
EFC : 段効率

カード 11

DIST

カード 12

SPLO

t, LPL, LSC, [LCP(j), j=1~LPL],同 左.....

t : 濃度プロファイルをプロットする時間

LPL : 図中の成分本数 (≤ 4)

LSC : 図の単位番号 (1, 2 3)

LCP : 図に含まれる成分の番号

時間 t は時間区分の区切りと一致しなければならない。

カード 13

ENDE

このカードがデータの終りを示し、計算が実行される。

TRANPES コードでは連続ランはできない。

付表 1.2 にデータ配列の大きさによる入力の制約を示す。

付表 1.2 入 力 制 限

<u>段数, 成分数に関するもの</u>	
段 数	21
濃度用データ配列	250
時間区分内プリント用濃度配列	1000
濃度の偏微分値保存配列	4000
<u>供給液に関するもの</u>	
供給液の数	10
全供給液用のデータ配列	200
<u>実験値データに関するもの</u>	
実験値の個数	50
実験データ保存配列	600
<u>フィテイングに関するもの</u>	
パラメーター個数	10
時間区分内の時間点の数	40
時間区分内の実験データ点の数	50
時間区分数	20
<u>界面レベル変動に関するもの</u>	
レベル変動用のデータ配列	200
<u>プロットに関するもの</u>	
濃度プロファイルプロットの本数	20
” の図数	10
実験値 vs. 計算値プロットの本数	20

付録2 プログラムリスト

BLOCK DATA BLKDT				
C	-----			
	COMMON/COMPS/JTM	,JFL	,JVL	,CNM(10) ,CNV(10)
	1,UNT(10)			
	COMMON/CONF/XEX(100)	,XCL(100)	,XCP(100)	
	COMMON/CONPR/XIN(250)	,XWK(250)	,KPR	,TPR(10) ,XPR(1000)
	1,XCF(1000)			
	COMMON/CORFL/CRF(21)			
	COMMON/DBCOF/DBC(100)	,FTC(100)		
	COMMON/CNTRL/LSM	,IFL	,ILV	
	COMMON/EFFIC/IEF(8)	,EFC(100)		
	COMMON/EQUIL/IDR(8)	,TBP	,CBP	,CUK ,CPK
	1,CHK ,NCH(8)	,F65	,F69	,UOS ,POS
	1,HLT ,WST	,HOS		
	COMMON/EXPVL/MPX	,MCP(50)	,MSG(50)	,MNO(50) ,MAD(50)
	1,CMS(1000) ,TMS(1000)	,VRC(1000)		
	COMMON/FEEDS/NFS	,IFS(10)	,NFL(10)	,IFA(10) ,FTL(200)
	COMMON/FITDT/KST	,KFT	,TPF(40)	,KNO(40) ,KMX(200)
	1,KE X(200)			
	COMMON/LVLDL/LNO	,HLT(21)	,HRG(8)	,LVL(21) ,LAD(21)
	1,LT L(21) ,LLV(200)	,HTM(200)	,LPA(21)	,LPS(21) ,HPT(100)
	2,LHV(100) ,HLV(100)	,HPM(100)		
	COMMON/NDIMN/NCP	,NST	,ISC	,IXM ,IYM
	1,IXS ,IYS	,JXY		
	COMMON/PARMS/NOP	,NSP(10)	,NSL(10)	,NSR(10) ,PMU(10)
	1,PML(10) ,PMO(10)	,PMD(10)	,PMF(10)	,PMG(10) ,IPS(10)
	COMMON/PLTDT/MPL	,MP1	,MPS(26)	,MPC(26) ,MPF(26)
	1,MPU(26) ,MCN(26)	,MPA(26)	,PLC(106,26)	,PLT(106,14)
	COMMON/PLTSG/LPN	,TPL(10)	,LPL(10)	,LSC(10) ,LCP(20)
	1,LCN ,JCN			
	COMMON/STAGE/VMX(21)	,VST(21)	,SMX(21)	,SST(21) ,SMA(21)
	1,SMO(21) ,SSA(21)	,SSO(21)	,RCL(21)	,AFL(21) ,OFL(21)
	2,AFH(21) ,OFM(21)	,AFD(21)	,OFD(21)	,XFD(100) ,YFD(100)
	COMMON/TIMES/SMO	,SMT	,TSC(20)	,NSC ,TFN
	2,TAU ,DPL	,NPR(20)		
	COMMON/TOLRC/IMR	,EMR	,MIT	,ECN ,EPM
	1,MFC ,EBP			
C	-----			
	DATA TBP,CBP/0.3,1.0953/			
	DATA NCP,JTM,JFL,JVL, IDR/3,4,5,6,8*0/			
	DATA CNM/4HHNO3,5HU(VI),6HPU(IV),4HTIME,8HFLOWRATE,6HVOLUME,4*1H /			
	DATA CNV/1.0,4.202E-3,4.184E-3,7*1.0/			
	DATA UNT/3H(N),2*5H(G/L),4H(HR),6H(L/HR),3H(L),4*1H /			
	DATA IEF,EFC/8*0,100*1.0/			
	DATA IFA/1,9*0/			
	DATA LAD/1,20*0/			
	DATA MAD/1,49*0/			
	DATA HRG/1.000,0.833,0.633,0.533,0.467,0.367,0.167,0. /			
C	-----			
	END			

```

PROGRAM TRANPES(INPUT,OUTPUT,TAPE7,TAPE5=INPUT,TAPE6=OUTPUT)
C
GCC  TRANPES : A COMPUTER CODE FOR TRANSIENT PROFILE ESTIMATION OF
C      SOLVENT EXTRACTION PROCESS.
C
C
COMMON/COMPS/JTH      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10) ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR      ,TPR(10) ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/CONF/XEX(100) ,XCL(100) ,XCP(100)
COMMON/CORFL/CRF(21)
COMMON/CNTRL/LSM      ,IFL      ,ILV
COMMON/DBCOF/DBC(100) ,FTC(100)
COMMON/EFFIC/IEF(8)   ,EFC(100)
COMMON/EQUIL/IDR(8)   ,TBP      ,CBP      ,CUK      ,CPK
1,CHK      ,NCH(8)   ,F65      ,F69      ,UOS      ,POS
1,HLT      ,WST
COMMON/FEEDS/NFS      ,IFS(10)   ,NFL(10) ,IFA(10) ,FTL(200)
COMMON/LVLDT/LNO      ,HLT(21)   ,HRG(8)  ,LVL(21) ,LAD(21)
1,LTL(21)   ,LLV(200) ,HTM(200) ,LPA(21) ,LPS(21) ,HPT(100)
2,LHV(100) ,HLV(100) ,HPM(100)
COMMON/EXPVL/MPX      ,MCP(50)   ,MSG(50) ,MNO(50) ,MAD(50)
1,CHS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/FITDT/KST      ,KFT      ,TPF(40) ,KNO(40) ,KMX(200)
1,KEX(200)
COMMON/NDIMN/NCP      ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
COMMON/PARMS/NOP      ,NSP(10)   ,NSL(10) ,NSR(10) ,PMU(10)
1,PML(10)   ,PMO(10) ,PHD(10) ,PMF(10) ,PMC(10) ,IPS(10)
COMMON/PLTDT/MPL      ,MP1      ,MPS(26) ,MPC(26) ,MPF(26)
1,MPU(26)   ,MCN(26) ,MPA(26) ,PLC(106,26) ,PLT(106,14)
COMMON/PLTSG/LPN      ,TPL(10)   ,LPL(10) ,LSC(10) ,LCP(20)
1,LCN      ,JCN
COMMON/STAGE/VMX(21) ,VST(21)   ,SMX(21) ,SST(21) ,SMA(21)
1,SMO(21)   ,SSA(21) ,SSO(21) ,RCL(21) ,AFL(21) ,OFL(21)
2,AFM(21)   ,OFM(21) ,AFD(21) ,OFD(21) ,XFD(100) ,YFD(100)
COMMON/TIME S/SMD      ,SMT      ,TSC(20) ,NSC      ,TFN
2,TAU      ,DPL      ,NPR(20)
COMMON/TOLRC/IMR      ,EMR      ,MIT      ,ECN      ,EPM
1,MFC      ,EBP
COMMON DTV(5000),BUF(1024)
COMMON/TITLE/TIT(6),DAY,THM,NPG
C
C
C CALL BLKDT
CALL HEADS
CALL INPUT
CALL DATST
CALL INPRT
CALL DATCV
CALL INITL(XIN(IXM),XIN(IYM),XIN(IXS),XIN(IYS),NCP,NST)
IF(DPL.GT.0..OR.LPN.NT.0) CALL PLDT1(BUF)
C
SMO=0.
DO 100 K=1,NSC
SMT=SMO+TSC(K)

```

```

CALL FITPT(K)
CALL LEVEL(K)
CALL SFVOL(K)
CALL STPRM(K,SST)
IF(LSM-1) 20,30,40
20 CALL GAUSS(K,IT)
   GOTO 50
30 CALL PATRN
   GOTO 50
40 CALL CMLX
50 CONTINUE
   CALL PRINT(K,IT)
   IF(LPN.GT.0) CALL SGPLT
C   REPLACEMENT FOR NEXT TIME STEP
   CALL MEMOV(XWK,XIN,ISC*4)
   DO 60 I=1,NST
60 HLT(I)=FSLFC(SMT,I)
   DO 62 N=1,NOP
62 PMD(N)=PMF(N)
   SMD=SMT
   CALL MEMOV(MCN,MPA,MPL)
100 CONTINUE
   IF(DPL.GT.0.) CALL TPLOT
   STOP
   END

```


C		
40	IF(ICD.GT.0)	GOTO 10
	CALL MEMOV(DTV,TIT,6)	
	GOTO 10	
50	NST=DTV(1)	
	CALL MEMOV(DTV(2),VMX,NST)	
	CALL MEMOV(DTV(2+NST),VST,NST)	
	ISC=NST*NCP	
	JXY=ISC*4	
	IXM=1	
	IYM=IXM+ISC	
	IXS=IYM+ISC	
	IYS=IXS+ISC	
	GOTO 10	
60	NFS=NFS+1	
	I=DTV(1)	
	IFS(NFS)=I	
	NO=(NNO-1)/JFL	
	NFL(NFS)=NO	
	IF(NFS.GT.1) IFA(NFS)=IFA(NFS-1)+NFL(NFS-1)*JFL	
	N=1	
	K=IFA(NFS)-1	
	DO 70 I=1,NO	
	DO 70 J=1,JFL	
	L=K+NO*(J-1)+I	
	N=N+1	
	FTL(L)=DTV(N)	
70	CONTINUE	
	GOTO 10	
80	CALL MEMOV(DTV,RCL,NST)	
	GOTO 10	
90	MPX=MPX+1	
	MCP(MPX)=DTV(1)	
	MSG(MPX)=DTV(2)	
	NO=(NNO-2)/3	
	MNO(MPX)=NO	
	IF(MPX.GT.1) MAD(MPX)=MAD(MPX-1)+MNO(MPX-1)	
	DO 100 I=1,NO	
	N=MAD(MPX)+I-1	
	TMS(N)=DTV(3*I)	
	CMS(N)=DTV(3*I+1)	
100	VRC(N)=DTV(3*I+2)	
	GOTO 10	
110	I=DTV(1)	
	IF(I.GT.0)	GOTO 112
	CALL MEMOV(DTV(2),HLT,NNO)	
	GOTO 10	
112	HLT(I)=DTV(2)	
	IF(NNO.EQ.2)	GOTO 10
	NO=(NNO-2)/2	
	LNO=LNO+1	
	LTL(LNO)=NO	
	LVL(I)=LNO	
	IF(LNO.GT.1) LAD(LNO)=LAD(LNO-1)+LTL(LNO-1)	
	DO 120 J=1,NO	
	L=LAD(LNO)+J-1	
	HTM(L)=DTV(J*2+1)	

```

120 LLV(L)=DTV(J*2+2)
    GOTO 10
130 NOP=NOP+1
    N=DTV(1)
    NSP(N)=DTV(2)
    NSL(N)=DTV(3)
    NSR(N)=DTV(4)
    I=4
    IF(NSP(N).EQ.0.AND.NSR(N).GT.0) GOTO 140
    PMU(N)=DTV(5)
    PML(N)=DTV(6)
    I=6
140 PMD(N)=DTV(I+1)
    PMD(N)=DTV(I+2)
    GOTO 10
150 CALL MEMOV(DTV,XIN,NNO)
    GOTO 10
160 IMR=DTV(1)
    EMR=DTV(2)
    MIT=DTV(3)
    ECN=DTV(4)
    EPM=DTV(5)
    MFC=DTV(6)
    EBP=DTV(7)
    GOTO 10
170 LSM=DTV(1)
    IFL=DTV(2)
    ILV=DTV(3)
    NSC=DTV(4)
    TFN=DTV(5)
    TAU=DTV(6)
    OPL=DTV(7)
    NO=(NNO-7)/2
    DO 180 I=1,NO
    TSC(I)=DTV(2*I+5)
180 NPR(I)=DTV(2*I+7)
    GOTO 10
190 J=DTV(1)
    JJ=IABS(J)
    IEF(JJ)=J
    DO 200 I=1,NST
    L=(I-1)*NCP+JJ
200 EFC(L)=DTV(I+1)
    GOTO 10
210 CONTINUE
    GOTO 10
220 CALL MEMST(0,LPN,53)
    N=0
    L=0
222 LPN=LPN+1
    N=N+1
    TPL(LP)=DTV(N)
    N=N+1
    LP=DTV(N)
    LPL(LP)=LP
    N=N+1
    LSC(LP)=DTV(N)

```

```
DO 224 I=1,LP  
L=L+1  
N=N+1  
224 LCP(L)=DTV(N)  
IF(N.LT.NNO) GOTO 222  
LCN=1  
GOTO 10  
230 CONTINUE  
C  
RETURN  
END
```



```

SUBROUTINE FREAD(KEYWD,NDATA,DATAV,IC,IEROR)
C
GCC  FREAD READS INPUT DECK OF CARDS BY FREE FORMAT .
C
C -----
      DIMENSION DATAV(1)
      DIMENSION NCHAR(80)
      EQUIVALENCE (VALUE,VALUE)
1000  FORMAT(20X,80R1)
1010  FORMAT(20X,24H *** ILLEGAL CHARACTER: ,R1,11H ON COLUMN ,I2)
2000  FORMAT(80R1)
C -----
C
      NINPT=5
      NTOUT=6
      NDATA=0
      KEYWD=0
      KHCNT=0
      KWCHK=0
      DO 10 N=1,400
10    DATAV(N)=0.0
      IC=0
15    READ(NINPT,2000) NCHAR
      IF(EOF(NINPT).NE.0.0) STOP
      IC=IC+1
      WRITE(NTOUT,1000) NCHAR
      NCOLM=0
      NCONT=0
20    VALUE=0.0
      NREAD=0
      NSIGN=0
      NPCNT=1
      NESGN=0
      NXPV=0
      KALPH=0
      NRPET=1
      KRPET=0
25    NCOLM=NCOLM+1
      IF(NCOLM.GT.81) GOTO 120
      IF(NCOLM.EQ.81) GOTO 50
      MARKX=NCHAR(NCOLM)
      IF(MARKX.LE.26) GOTO 30
      IF(MARKX.LE.36) GOTO 40
      IF(MARKX.EQ.1R+) GOTO 50
      IF(MARKX.EQ.1R-) GOTO 60
      IF(MARKX.EQ.1R ) GOTO 75
      IF(MARKX.EQ.1R,) GOTO 75
      IF(MARKX.EQ.1R()) GOTO 75
      IF(MARKX.EQ.1R.) GOTO 95
      IF(MARKX.EQ.1R$) GOTO 100
      IF(MARKX.EQ.1R*) GOTO 105
      IF(NREAD.LE.0) GOTO 35
27    CONTINUE
      IEROR=IEROR+1
      WRITE(6,1010) MARKX,NCOLM
      GOTO 25

```

```

30 IF(KWCHK.GT.0) GOTO 35
32 IF(NCHAR(NCOLM+1).GT.36) KWCHK=1
   IF(KWCNT.GE.4) GOTO 25
   KWCNT=KWCNT+1
   KEYWD=KEYWD*64+MARKX
   GOTO 25
35 IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RE) GOTO 55
   IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RR) GOTO 110
   IF(NREAD.EQ.1.AND.MARKX.EQ.1RH) GOTO 36
   GOTO 27
36 N=VALUE
   N1=NCOLM+1
   N2=NCOLM+N
   NCOLM=N2
   ENCODE(N,2000,VALUE) (NCHAR(I),I=N1,N2)
   KALPH=1
   GOTO 25
40 IF(KWCHK.LE.0) GOTO 32
   IF(KRPET.GT.0) GOTO 115
   IF(NESGN.NE.0) GOTO 45
   NREAD=1
   VALUE=VALUE*10+MARKX-27
   IF(NPCNT.GE.1) GOTO 25
   NPCNT=NPCNT-1
   GOTO 25
45 NEXPV=NEXPV*10+MARKX-27
   GOTO 25
50 IF(NREAD.GT.0) GOTO 55
   NSIGN=1
   GOTO 25
55 NESGN=1
   GOTO 25
60 IF(NREAD.GT.0) GOTO 65
   NSIGN=-1
   GOTO 25
65 NESGN=-1
   GOTO 25
75 IF(NREAD.LE.0.AND.KALPH.LE.0) GOTO 25
   IF(KALPH.GT.0) GOTO 90
80 IF(NPCNT.GE.0) GOTO 85
   VALUE=VALUE*0.1
   NPCNT=NPCNT+1
   GOTO 80
85 IF(NSIGN.LT.0) VALUE=-VALUE
   IF(NEXPV.LE.0) GOTO 90
   IF(NESGN) 86,90,87
86 E=1.0/10.0**NEXPV
   GOTO 88
87 E=10.0**NEXPV
88 VALUE=VALUE*E
90 NDATA=NDATA+1
   NRPET=NRPET-1
   DATAV(NDATA)=VALUE
   IF(NRPET.GT.0) GOTO 90
   GOTO 20
95 NPCNT=0
   GOTO 25

```

```
100 NCONT=1
    GOTO 75
105 IF(KWCHK.GT.0) GOTO 120
    N=1
    NCHAR(NCOLM)=12
    ENCODE(80,2000,DATAV) (NCHAR(I),I=N,80)
    KEYWD=4RTITL
    GOTO 120
110 KRPET=1
    NRPET=0
    GOTO 25
115 NRPET=NRPET*10+MARKX-27
    GOTO 25
120 IF(NCONT.GT.0) GOTO 15
C
    RETURN
    END
```

SUBROUTINE INPRT					
C					
CCC INPRT PRINTS INPUT DATA LIST					
C					

COMMON/COMPS/JTM	,JFL	,JVL	,CNM(10)	,CNV(10)	
1,UNT(10)					
COMMON/CNTRL/LSM	,IFL	,ILV			
COMMON/EXPVL/MPX	,MCP(50)	,MSG(50)	,MNO(50)	,MAD(50)	
1,CMS(1000)	,TMS(1000)	,VRC(1000)			
COMMON/FEEDS/NFS	,IFS(10)	,NFL(10)	,IFA(10)	,FTL(200)	
COMMON/LVLDI/LNO	,HLT(21)	,HRG(8)	,LVL(21)	,LAD(21)	
1,LTL(21)	,LLV(200)	,HTM(200)	,LPA(21)	,LPS(21)	,HPT(100)
2,LHV(100)	,HLV(100)	,HPM(100)			
COMMON/NDIMN/NCP	,NST	,ISC	,IXM	,IYM	
1,IXS	,IYS	,JXY			
COMMON/PARMS/NOP	,NSP(10)	,NSL(10)	,NSR(10)	,PMU(10)	
1,PML(10)	,PMO(10)	,PMF(10)	,PMC(10)	,IPS(10)	
COMMON/STAGE/VMX(21)	,VST(21)	,SMX(21)	,SST(21)	,SMA(21)	
1,SMO(21)	,SSA(21)	,SSO(21)	,RCL(21)	,AFL(21)	,OFL(21)
2,AFM(21)	,OFM(21)	,AFD(21)	,OFD(21)	,XFD(100)	,YFD(100)
COMMON/PLTSG/LPN	,TPL(10)	,LPL(10)	,LSC(10)	,LCP(20)	
1,LCN	,JCN				
COMMON/TIMES/SMD	,SMT	,TSC(20)	,NSC	,TFN	
2,TAU	,OPL	,NPR(20)			
COMMON/TOLRC/IMR	,EMR	,HIT	,ECN	,EPH	
1,MFC	,EBP				
COMMON DTV(1000)					

C					
6000	FORMAT(1H1,I27,37H*** TRANPES CODE INPUT DATA LIST ***)				
6010	FORMAT(1H0,4X,10HPARAMETERS/5X,10(1H-))				
6020	FORMAT(1H0,4X,20HSTAGE SPECIFICATIONS/5X,20(1H-))				
6030	FORMAT(1H0,4X,17HEXPERIMENTAL DATA/5X,17(1H-))				
6040	FORMAT(1H0,4X,17HLEVEL HEIGHT OATA/5X,17(1H-))				
6050	FORMAT(1H0,4X,11HFEEED TABLES/5X,11(1H-))				
6060	FORMAT(1H0,4X,20HINTEGER CONTROL DATA/5X,20(1H-))				
6070	FORMAT(1H0,4X,14HTOLERANCE DATA/5X,14(1H-))				
6080	FORMAT(1H0,4X,14HTIME STEP DATA/5X,14(1H-))				
6100	FORMAT(10X,5HLSM =,I3,70H OPTION FLAG FOR LEAST SQUARE METHOD, 10/1/2 : GAUSS/PATTERN/COMPLEX /				
	210X,5HIFL =,I3 /				
	310X,5HILV =,I3 /				
	410X,5HNCP =,I3,21H NO. OF COMPONENTS /				
	510X,5HNST =,I3,17H NO. OF STAGES /				
	610X,5HNSC =,I3,36H NO. OF TIME SECTIONS FOR FITTING /				
	7)				
6110	FORMAT(10X,5HNSC =,I3 /				
	110X,5HTFN =,F6.1,20H SIMULATING TIME /				
	210X,5HTAU =,F6.3,20H TIME STEP SIZE /				
	310X,5HOPL =,F6.3,27H TIME STEP FOR PLOTTING)				
6120	FORMAT(10X,10HTSC(NPR) =, 9(F8.2,1H(I2,1H))/(20X, 9(F8.2,1H(I2, 1 1H))))				
6130	FORMAT(I13,11HI FTL LVL,T29,3HVMX,T41,3HVST,T53,3HRCL,T65,3HHLI)				
6140	FORMAT(I13,2I5,3X,1P4E12.4)				
6150	FORMAT(10X,23HNOP NSP NSL NSR PMO,T43,3HPMU,T55,3HPML,T67, 13HPMO)				
6160	FORMAT(I13,3I5,1P4E12.4)				

```

6170 FORMAT(10X,23HMPX MCP MSG MAD MNO,8X,15HCOMPONENT,STAGE )
6180 FORMAT(I13,4I5,7X,A8,I5,4H-TH ,2A8)
6190 FORMAT(1H0,9X,15HSEQ.NO. SUB.NO.,T31,3HTMS,T43,3HCMS,T55,3HVRC)
6200 FORMAT(I16,I8,4X,1P3E12.4)
6210 FORMAT(1H )
6220 FORMAT(10X,16HTABLE NO. STAGE,3X,A8,5(A8,4X))
6230 FORMAT(12X,2I6,F11.3,1P6E12.4)
6240 FORMAT(24X,F11.3,1P6E12.4)
6250 FORMAT(10X,18HLNO LVL LAD LTL )
6260 FORMAT(8X,4I5)
6270 FORMAT(1H0,9X,15HSEQ.NO. SUB.NO.,T31,3HHTM,T43,3HLLV,T51,
113HHEIGHT RANGES )
6280 FORMAT(8X,2I8,4X,1PE12.4,I5,0PF9.4,2H -,F8.4)
6290 FORMAT(10X,5HIMR =,I3,7X,
1/10X,5HEMR =,1PE10.2,
2/10X,5HMIT =,I3,
3/10X,5HECN =,1PE10.2,
4/10X,5HEPM =,1PE10.2,
5/10X,5HMFC =,I3,
6/10X,5HEBP =,1PE10.2,
7)
6300 FORMAT(1H0,4X,13HPLOTTING DATA / 5X,I3(1H-))
6310 FORMAT(10X,5HDPL =,F6.2,44H IF DPL.GT.0, TRANSIENT PLOT IS AVAI
1LABLE )
6320 FORMAT(10X,31HSTAGE PROFILE PLOT IS SPECIFIED )
6330 FORMAT(10X,6HTIME =,F6.2,3X,5HLPL =,I3,3X,5HLSC =,I3,3X,5HLCP =
1 ,5I3 )

```

C
C

```

WRITE(6,6000)
WRITE(6,6060)
WRITE(6,6100) LSM,IFL,ILV,NCP,NST,NSC
WRITE(6,6080)
WRITE(6,6110) NSC,TFN,TAU,DPL
WRITE(6,6120) (TSC(K),NPR(K),K=1,NSC)
WRITE(6,6020)
WRITE(6,6130)
N=1
L=1
DO 20 I=1,NST
NF=0
IF(I.NE.IABS(N)) GOTO 10
NF=N
N=N+1
10 LF=0
IF(I.NE.LVL(L)) GOTO 20
LF=L
L=L+1
20 WRITE(6,6140) I,NF,LF,VMX(I),VST(I),RCL(I),HLT(I)
WRITE(6,6010)
WRITE(6,6150)
DO 30 N=1,NOP
30 WRITE(6,6160) N,NSP(N),NSL(N),NSR(N),PMO(N),PMU(N),PML(N),PMD(N)
WRITE(6,6030)
WRITE(6,6170)
DO 40 M=1,MPX
IS=MSG(M)/100

```

```

I=MSG(M)-IS*100
J=MCP(M)
PHS=8HAQUEOUS
IF (IS.EQ.1.OR.IS.EQ.3) PHS=8HORGANIC
MXS=8HMIKXER
IF (IS.GT.1) MXS=8HSETTLER
40 WRITE(6,6180) M,HCP(M),MSG(M),MAD(M),MNO(M),CNM(J),I,PHS,MXS
WRITE(6,6190)
I=0
DO 60 M=1,MPX
NO=MNO(M)
DO 50 J=1,NO
I=I+1
50 WRITE(6,6200) I,J,TMS(I),CMS(I),VRC(I)
60 WRITE(6,6210)
WRITE(6,6050)
WRITE(6,6220) CNM(JT4),CNM(JFL),(CNM(J),J=1,NCP)
NC2=NCP+1
DO 80 M=1,NFS
IA=IFA(M)
NL=NFL(M)
WRITE(6,6230) M,IFS(M),FTL(IA),FTL(IA+NL),(FTL(IA+NL*J),J=2,NC2)
IF(NL.LE.1) GOTO 80
IA=IA-1
DO 70 N=2,NL
70 WRITE(6,6240) FTL(IA+N),FTL(IA+NL+N),(FTL(IA+NL*J+N),J=2,NC2)
80 WRITE(6,6210)
IF(LNO.EQ.0) GOTO 120
WRITE(6,6040)
WRITE(6,6250)
LL=0
DO 90 L=1,LNO
85 LL=LL+1
IF(LVL(LL).EQ.0) GOTO 85
90 WRITE(6,6260) L,LL,LAD(L),LTL(L)
WRITE(6,6270)
I=0
DO 110 L=1,LNO
NO=LTL(L)
DO 100 J=1,NO
I=I+1
L1=LLV(I)
L2=L1+1
100 WRITE(6,6280) I,J,HTM(I),L1,HRG(L1),HRG(L2)
110 WRITE(6,6210)
120 WRITE(6,6070)
WRITE(6,6290) IMR,EMR,MIT,ECN,EPM,MFC,EBP
IF(DPL.EQ.0.AND.LPN.EQ.0) GOTO 140
WRITE(6,6300)
WRITE(6,6310) DPL
IF(LPN.EQ.0) GOTO 140
WRITE(6,6320)
L1=1
DO 130 I=1,LPN
L2=L1+LPL(I)-1
WRITE(6,6330) TPL(I),LPL(I),LSC(I),(LCP(L),L=L1,L2)
130 L1=L2+1
140 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE DATST
C
CCC   DATST SETS THE INTERNAL CONSTANTS .
CCC   DATCV CONVERTS THE UNIT OF FLOW TABLES TO SOLUTE-FREE MOLARITY .
C
C -----
COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10)  ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR      ,TPR(10)  ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/EQUIL/IDR(8)   ,TBP      ,CBP      ,CUK      ,CPK
1,CHK      ,NCH(8)    ,F65      ,F69      ,UOS      ,POS
1,WLT      ,HST      ,HOS
COMMON/FEEDS/NFS      ,IFS(10)  ,NFL(10)  ,IFA(10)  ,FTL(200)
COMMON/NDIHN/NCP      ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
C
C -----
COMMON DTV(50),X(3)
EQUIVALENCE (F,TBP),(T,CBP),(H,X(1)),(U,X(2)),(P,X(3))
DATA TEMPC/25./
C
C -----
CBP=1.0961321
CUK=4.*F**(-0.17)-3.
CPK=0.2+0.55*F**1.25
CHK=1.-0.54*EXP(-15.*F)
F65=F**1.65
F69=F**1.69
UOS=0.5*T/(1.0+0.046*T)
POS=0.5*T/(1.0+0.09*T)
WLT=3.95-0.0144*TEMPC
HST=4.2-0.015*TEMPC
HOS=T*(1.0-0.00609*WLT*F65)/(1.0+0.043*T)
RETURN
C
CCC
ENTRY DATCV
C
REPLACE THE LOCATIONS OF TIME TABLES:FTL
DO 20 N=1,NFS
NL=NFL(N)
IA=IFA(N)
N2=NL*2
CALL MEMOV(FTL(IA),DTV,N2)
NC=NL*NCP
DO 10 M=1,NC
I=IA+M-1
J=IA+N2+M-1
10 FTL(I)=FTL(J)
CALL MEMOV(DTV,FTL(NC+IA),N2)
20 CONTINUE
C
CONVERT TO NORMAL MOLARITY
DO 40 N=1,NFS
NL=NFL(N)
IA=IFA(N)
DO 40 J=1,NCP
I=IA+(J-1)*NL-1
C=CNV(J)
DO 30 M=1,NL

```

```

30 FTL(I+M)=FTL(I+M)*C
40 CONTINUE
C   CONVERT TO SOLUTE-FREE BASIS UNIT
   DO 70 N=1,NFS
     NL=NFL(N)
     IA=IFA(N)-1
     DO 70 K=1,NL
       H=FTL(IA+K)
       U=FTL(IA+NL+K)
       P=FTL(IA+NL*2+K)
       IF(IFS(N).LT.0)          GOTO 50
       DM=DENMA(X)
       GOTO 60
50  DM=DENMO(X)
60  FTL(IA+K)      =H/DM
     FTL(IA+NL+K) =U/DM
     FTL(IA+NL*2+K)=P/DM
     FTL(IA+NL*4+K)=FTL(IA+NL*4+K)*DM
70  CONTINUE
C   CONVERT INITIAL CONCS. TO SOLUTE-FREE CONCS.
   DO 80 M=1,2
     IA=(M-1)*IXS-1
     DO 80 I=1,NST
       N=IA+(I-1)*NCP
       H=XIN(N+1)
       U=XIN(N+2)
       P=XIN(N+3)
       DM=DENMA(X)
       XIN(N+1)=H/DM
       XIN(N+2)=U/DM
       XIN(N+3)=P/DM
80  CONTINUE
   DO 90 M=1,2
     IA=IYM+(M-1)*ISC-1
     DO 90 I=1,NST
       N=IA+(I-1)*NCP
       H=XIN(N+1)
       U=XIN(N+2)
       P=XIN(N+3)
       DM=DENMO(X)
       XIN(N+1)=H/DM
       XIN(N+2)=U/DM
       XIN(N+3)=P/DM
90  CONTINUE
C
   RETURN
   END

```



```

FUNCTION DENFC(X)
C
CCC    DENFC PROVIDES THE DENSITY FACTOR FROM MOLARITY TO SOLUTE-FREE
C      UNIT AND FROM SOLUTE-FREE TO MOLARITY.
C      X(1) = H, X(2) = U, X(3) = P
C
COMMON/EQUIL/IDR(8)  ,TBP      ,CBP      ,GUK      ,CPK
1,CHK      ,NCH(8)  ,F65      ,F69      ,UOS      ,POS
1,WLT      ,WST      ,HOS
DIMENSION X(8)
-----
C
ENTRY DENMA
DENFC=1.0-0.0724*X(2)-0.13*X(3)-0.0309*X(1)
RETURN
CCC
ENTRY DENSA
DENFC=1.0+0.0724*X(2)+0.13*X(3)+0.0309*X(1)
RETURN
CCC
ENTRY DENMO
HCO=WLT*(1.0-X(2)/UOS-X(3)/POS-0.65*X(1)/HOS)*F65
DENFC=1.0-0.097*X(2)-0.139*X(3)-0.043*X(1)-0.0174*HCO
RETURN
CCC
ENTRY DENSO
HCO=WST*(1.0-(2.0*(X(2)+X(3))+0.6*X(1))/CBP)*F69
DENFC=1.0+0.097*X(2)+0.139*X(3)+0.043*X(1)+0.0174*HCO
RETURN
C
END

```

```

SUBROUTINE INITL(XM,YM,XS,YS,NC,NS)
C
CCC   INITL PRINTS THE INITIAL CONCENTRATION PROFILE .
C
      DIMENSION XM(NC,1),YM(NC,1),XS(NC,1),YS(NC,1)
      COMMON X(3),Y(3)
      COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10) ,CNV(10)
      1,UNT(10)
      DATA IM,IS/8H MIXER ,8H SETTLER /
CCC
6000 FORMAT(34H      INITIAL CONCENTRATION PROFILE/5X,29(1H-))
6010 FORMAT(5X,8HAQUEOUS ,A8,T66,8HORGANIC ,A8)
6020 FORMAT(5X,5HSTAGE,2X,3(A8,4X),T66,5HSTAGE,2X,3(A8,4X) )
6030 FORMAT(I9,1X,1P3E12.4,T61,I9,1X,3E12.4)
6040 FORMAT(1H )
C
-----
C
      CALL HEADR
      CALL MEMST(0,X,5)
      WRITE(6,6040)
      WRITE(6,6000)
      WRITE(6,6010) IM,IM
      WRITE(6,6020) (CNM(J),J=1,3),(CNM(J),J=1,3)
      DO 30 I=1,NS
      DA=DENSA(XM(1,I))
      DO 10 J=1,NC
      10 X(J)=XM(J,I)/(DA*CNV(J))
      DO=DENSO(YM(1,I))
      DO 20 J=1,NC
      20 Y(J)=YM(J,I)/(DO*CNV(J))
      30 WRITE(6,6030) I,X,I,Y
      WRITE(6,6040)
      WRITE(6,6010) IS,IS
      WRITE(6,6020) (CNM(J),J=1,3),(CNM(J),J=1,3)
      DO 60 I=1,NS
      DA=DENSA(XS(1,I))
      DO 40 J=1,NC
      40 X(J)=XS(J,I)/(DA*CNV(J))
      DO=DENSO(YS(1,I))
      DO 50 J=1,NC
      50 Y(J)=YS(J,I)/(DO*CNV(J))
      60 WRITE(6,6030) I,X,I,Y
C
      RETURN
      END

```



```

SUBROUTINE SPLNE(X,Y,N,A,B)
C
CCC   SPLNE DETERMINES THE CUBIC SPLINE FUNCTION PARAMETERS .
C
C     X,Y : ARRAYS (X(N),Y(N)) SPECIFY THE POSITION OF POINTS
C     N   : NUMBER OF POINTS
C     A   : WORKING ARRAY A(N,3)
C     B   : ARRAY B(N), RETURNS THE CUBIC SPLINE FUNCTION PARAMETERS
C
DIMENSION X(N),Y(N),A(N,3),B(N)
C
C-----
H0=X(2)-X(1)
D0=(Y(2)-Y(1))/H0
A(1,1)=0.
A(1,2)=2.*H0
A(1,3)=H0
B(1)=3.*D0*H0
N1=N-1
DO 10 I=2,N1
H1=X(I+1)-X(I)
D1=(Y(I+1)-Y(I))/H1
A(I,1)=H1
A(I,2)=2.*(H0+H1)
A(I,3)=H0
B(I)=3.*(H0*D1+H1*D0)
H0=H1
D0=D1
10 CONTINUE
A(N,1)=H1
A(N,2)=2.*H1
A(N,3)=0.
B(N)=3.*H1*D1
C
CALL TRIBN(A(1,1),A(1,2),A(1,3),B,N)
C
RETURN
END

```

```
      SUBROUTINE TRIBN(AL,AC,AR,B,N)
C
CCC   TRIBN SOLVES THE SIMULTANEOUS EQUATION OF TRI-BAND MATRIX .
C
      DIMENSION AL(1),AC(1),AR(1),B(1)
-----
C
      N1=N-1
      T=AC(1)
      AR(1)=AR(1)/T
      B(1)=B(1)/T
      DO 10 I=2,N1
      AC(I)=AC(I)-AR(I-1)*AL(I)
      B(I)=B(I)-B(I-1)*AL(I)
      T=AC(I)
      AR(I)=AR(I)/T
      B(I)=B(I)/T
10   CONTINUE
      AC(N)=AC(N)-AR(N-1)*AL(N)
      B(N)=B(N)-B(N-1)*AL(N)
C
      B(N)=B(N)/AC(N)
      DO 20 J=1,N1
      I=N-J
      B(I)=B(I)-B(I+1)*AR(I)
20   CONTINUE
C
      RETURN
      END
```

```

FUNCTION VSPLN(X,Y,N,B,X0,JFX)
C
CCC   VSPLN GETS THE SPLINE FUNCTION VALUE AT THE POINT X0 .
C
      DIMENSION X(1),Y(1),B(1)
CCC
  10  MIN=1
      MAX=N
  20  IF(MAX-MIN-1) 70,70,30
  30  MID=(MAX+MIN)/2
      IF(X(-X(MID)) 40,60,50
  40  MAX=MID
      GOTO 20
  50  MIN=MID
      GOTO 20
  60  MIN=MID
      MAX=MIN+1
  70  CONTINUE
C
      H=X(MAX)-X(MIN)
      DY1=Y(MIN)
      DY2=Y(MAX)
      D=(DY2-DY1)/H
      T=(X0-X(MIN))/H
      TX=1.-T
C
      IF(JFX.EQ.1)          GOTO 80
      VSPLN=T*DY2+TX*DY1+H*T*TX*((B(MIN)-D)*TX-(B(MAX)-D)*T)
      RETURN
  80  VSPLN=D+(B(MIN)-D)*TX*(1.-3.*T)+(B(MAX)-D)*(3.*T-2.)*T
C
      RETURN
      END

```

```

FUNCTION FSLFC(T,I)
C
CCC   FSLFC GETS THE LEVEL HEIGHT OF STAGE I AT TIME=T .
C
COMMON/LVLDT/LNO      ,HLT(21)  ,HRG(8)  ,LVL(21)  ,LAD(21)
1,LTL(21)  ,LLV(200)  ,HTM(200)  ,LPA(21)  ,LPS(21)  ,HPT(100)
2,LHV(100)  ,HLV(100)  ,HPM(100)
C
-----
L=LVL(I)
IF(L.GT.0)                                GOTO 10
FSLFC=HLT(I)
GOTO 20
10 M=LPA(L)
N=LPS(L)
FSLFC=VSPLN(HPT(M),HLV(M),N,HPM(M),T,0)
20 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

FUNCTION DSLFC(T,I,S)
C
CCC   DSLFC CALCULATES THE CORRECTED FLOW CHANGE DUE TO LEVEL HEIGHT
C      FLUCTUATIONS WITH OPTIMIZATION PARAMETER .
C
COMMON/CORFL/CRF(21)
COMMON/LVLDT/LNO      ,HLT(21)  ,HRG(8)  ,LVL(21)  ,LAD(21)
1,LTL(21)  ,LLV(200)  ,HTM(200)  ,LPA(21)  ,LPS(21)  ,HPT(100)
2,LHV(100)  ,HLV(100)  ,HPM(100)
C
-----
L=LVL(I)
IF(L.GT.0)                                GOTO 10
DSLFC=0.
GOTO 20
10 M=LPA(L)
N=LPS(L)
DSLFC=VSPLN(HPT(M),HLV(M),N,HPM(M),T,1)*S+CRF(I)
20 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE FITPT(K)
C
CCC   FITPT GETS THE TIME POINTS FOR FITTING IN TIME RANGE:K .
C
C
-----
COMMON/CONF1/XEX(100) ,XCL(100) ,XCP(100)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR      ,TPR(10)  ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/EXPVL/MPX      ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,YRC(1000)
COMMON/FITDT/KST      ,KFT      ,TPF(40)  ,KNO(40)  ,KMX(200)
1,KEX(200)
COMMON/TIMES/SMO      ,SMT      ,TSC(20)  ,NSC      ,TFN
2,TAU      ,DPL      ,NPR(20)
-----
C
COMMON  MI(50),MX(50),NO(50),KM(50),KI(50)
DATA EPS/1.0E-3/
-----
C
MM=MPX+1
CALL MEMST(0,MI,250)
T1=SMO+EPS
T2=SMT+EPS
CALL MEMST(0,KST,182)
C
DO 10 M=1,MPX
I=MAD(M)
N=MNO(M)
CALL ITERP(TMS(I),N,T1,MIN,MAX,MBD)
L=MAX+I-1
IF(MBD.LT.0) L=MIN+I-1
MI(M)=L
CALL ITERP(TMS(I),N,T2,MIN,MAX,MBD)
L=MIN+I-1
IF(MBD.GT.0) L=MAX+I-1
MX(M)=L
NO(M)=MX(M)-MI(M)+1
10 CONTINUE
M=MM
MI(M)=1
MX(M)=NPR(K)
NO(M)=MX(M)-MI(M)+1
CCC
KFT=0
KST=0
KPR=0
DTP=TSC(K)/NPR(K)
20 IM=0
TMI=1.0E12
DO 80 M=1,MM
IF(NO(M).LE.0)          GOTO 80
I=MI(M)
IF(M.EQ.MM)            GOTO 30
X=TMS(I)
GOTO 40
30 X=SMO+MI(M)*DTP
40 IF(X-TMI) 50,60,80

```



```

50 IM=1
   GOTO 70
60 IM=IM+1
70 KM(IM)=M
   TMI=X
80 CONTINUE

C
   IF(IM.EQ.0)                GOTO 120
   KST=KST+1
   KNO(KST)=IM
   TPF(KST)=TMI
   DO 110 J=1,IM
   M=KM(J)
   IF(M.NE.MM)                GOTO 90
   KPR=KPR+1
   KNO(KST)=1-IM
   GOTO 100
90 KFT=KFT+1
   KMX(KFT)=M
   I=MI(M)
   XEX(KFT)=CMS(I)
   KEX(KFT)=I
100 MI(M)=MI(M)+1
   NO(M)=PX(M)-MI(M)+1
110 CONTINUE
   GOTO 20

C
120 RETURN
   END

```

```

SUBROUTINE SFVOL(KS)
C
CCC   SFVOL CALCULATES THE SOLUTE-FREE STAGE VOLUMES AND FEED FLOW
C     RATES FOR TIME SECTION K (SMD - SMT) .
C
C-----
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR           ,TPR(10) ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/FEEEDS/NFS           ,IFS(10) ,NFL(10) ,IFA(10) ,FTL(200)
COMMON/NDIMN/NCP           ,NST           ,ISC           ,IXM           ,IYM
1,IXS           ,IYS           ,JXY
COMMON/STAGE/VMX(21) ,VST(21) ,SMX(21) ,SST(21) ,SMA(21)
1,SMD(21) ,SSA(21) ,SSO(21) ,RCL(21) ,AFL(21) ,OFL(21)
2,AFM(21) ,OFM(21) ,AFD(21) ,OFD(21) ,XFD(100) ,YFD(100)
COMMON/TIMES/SMD           ,SMT           ,TSC(20) ,NSC           ,TFN
2,TAU           ,DPL           ,NPR(20)
C-----
COMMON X(3)
EQUIVALENCE (X(1),H), (X(2),U), (X(3),P)
C-----
C
T=(SMD+SMT)*0.5
CALL MEMST(0,AFD,NST)
CALL MEMST(0,OFD,NST)
CALL MEMST(0,XFD,ISC)
CALL MEMST(0,YFD,ISC)
DO 40 N=1,NFS
IA=IFA(N)
NL=NFL(N)
M=IA+NL*NCP
L=M+NL
F=TERPN(FTL(L),FTL(M),NL,T)
I=IABS(IFS(N))
K=(I-1)*NCP
IF(IFS(N).LT.0)          GOTO 20
AFD(I)=F
DO 10 J=1,NCP
L=IA+(J-1)*NL
10 XFD(K+J)=TERP1(FTL(L),FTL(M),NL,T)*F
GOTO 40
20 OFD(I)=F
DO 30 J=1,NCP
L=IA+(J-1)*NL
30 YFD(K+J)=TERP1(FTL(L),FTL(M),NL,T)*F
40 CONTINUE
CCC
CALL MEMOV(VMX,SMX,NST)
CALL MEMOV(VST,SST,NST)
CALL FLOWS(T)
DO 60 I=1,NST
N=IXM+(I-1)*NCP-1
H=XIN(N+1)
U=XIN(N+2)
P=XIN(N+3)
DMA=DENSA(X)
N=IYM+(I-1)*NCP-1
H=XIN(N+1)

```

```

U=XIN(N+2)
P=XIN(N+3)
DMO=DENSO(X)
SMA(I)=SMA(I)/DMA
SMO(I)=SMO(I)/DMO
SMX(I)=SMA(I)+SMO(I)
60 CONTINUE
C
DO 70 I=1,NST
N=IXS+(I-1)*NCP-1
H=XIN(N+1)
U=XIN(N+2)
P=XIN(N+3)
DMA=DENSA(X)
N=IYS+(I-1)*NCP-1
H=XIN(N+1)
U=XIN(N+2)
P=XIN(N+3)
DMO=DENSO(X)
SSA(I)=SSA(I)/DMA
SSO(I)=SSO(I)/DMO
SST(I)=SSA(I)+SSO(I)
70 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE FLOWS(T)
C
CCC   FLOWS CALCULATES THE INTER-STAGE FLOW RATES AND PHASE VOLUMES .
C
C-----
COMMON/LVLDT/LNO      ,HLT(21)  ,HRG(8)  ,LVL(21)  ,LAD(21)
1,LTL(21)  ,LLV(200)  ,HTM(200)  ,LPA(21)  ,LPS(21)  ,HPT(100)
2,LHV(100)  ,HLV(100)  ,HPM(100)
COMMON/NDIMN/NCP      ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
COMMON/STAGE/VMX(21)  ,VST(21)  ,SMX(21)  ,SST(21)  ,SMA(21)
1,SMO(21)  ,SSA(21)  ,SSO(21)  ,RCL(21)  ,AFL(21)  ,OFL(21)
2,AFM(21)  ,OFM(21)  ,AFD(21)  ,OFD(21)  ,XFD(100)  ,YFD(100)
COMMON DUM(4800),DTV(21)
C-----
C
DO 10 M=1,NST
I=NST-M+1
A=AFD(I)+RCL(I)
IF(M.GT.1) A=A+AFL(I+1)
AFM(I)=A
DTV(I)=DSLFC(T,I,SST(I))
10 AFL(I)=A-RCL(I)-DTV(I)
DO 20 I=1,NST
O=OFD(I)
IF(I.GT.1) O=O+OFL(I-1)
OFM(I)=O
20 OFL(I)=O+DTV(I)
C
DO 30 I=1,NST
SMA(I)=SMX(I)*AFM(I)/(AFM(I)+OFM(I))
30 SMO(I)=SMX(I)-SMA(I)
DO 40 I=1,NST
HLT(I)=FSLFC(T,I)
SSA(I)=SST(I)*HLT(I)
40 SSO(I)=SST(I)-SSA(I)
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE STPRM (K, SST)
C
CCC  STPRM DETERMINES THE CONSTRAIN CONDITIONS OF LEVEL PARAMETERS .
C
C -----
COMMON/LVLDT/LNO      ,HLT(21)  ,HRG(8)  ,LVL(21)  ,LAD(21)
1,LTL(21)  ,LLV(200)  ,HTM(200)  ,LPA(21)  ,LPS(21)  ,HPT(100)
2,LHV(100)  ,HLV(100)  ,HPM(100)
COMMON/PARMS/NOP      ,NSP(10)  ,NSL(10)  ,NSR(10)  ,PMU(10)
1,PML(10)  ,PMO(10)  ,PHD(10)  ,PMF(10)  ,PMC(10)  ,IPS(10)
COMMON/TIMES/SMO      ,SMT      ,TSC(20)  ,NSC      ,TFN
2,TAU      ,DPL      ,NPR(20)
DIMENSION SST(21)
C
C -----
DO 20 N=1,NOP
IF(NSP(N).NE.0)          GOTO 20
IF(NSR(N).EQ.0)          GOTO 20
I=NSL(N)
L=LVL(I)
NO=LTL(L)
M=LAD(L)
MM=M+NO-1
PU=1.0E12
PL=-PU
DO 10 J=M,MM
T=HTM(J)
IF(T.LE.SMO.OR.T.GT.SMT)  GOTO 10
H1=HRG(LLV(J)+1)
H2=HRG(LLV(J))
PL=AMAX1(PL,(H1-FSLFC(T,I))*SST(I)/TSC(K))
PU=AMIN1(PU,(H2-FSLFC(T,I))*SST(I)/TSC(K))
10 CONTINUE
PMU(N)=PU
PML(N)=PL
20 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE GAUSS (K,IT)
C
CCC      GAUSS : THE LEAST SQUARE ESTIMATION BY GAUSS-METHOD
C
C      *****
C
COMMON/CONF/XEX(100) ,XCL(100) ,XCP(100)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR          ,TPR(10) ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/FITDT/KST          ,KFT          ,TPF(40) ,KNO(40) ,KMX(200)
1,KE X(200)
COMMON/PARMS/NOP          ,NSP(10)   ,NSL(10)   ,NSR(10)   ,PMU(10)
1, PML(10)   ,PMO(10)   ,PMD(10)   ,PMF(10)   ,PMC(10)   ,IPS(10)
COMMON/PLTDT/MPL          ,MP1          ,MPS(26)   ,MPC(26)   ,MPF(26)
1,MPU(26)   ,MCN(26)   ,MPA(26)   ,PLC(106,26),PLT(106,14)
COMMON/NDIMN/NCP          ,NST          ,ISC          ,IXM          ,IYM
1,IXS          ,IYS          ,JXY
C
COMMON A(100),Z(500),ZAP(3900),W(300),P(10),B(10),IPV(10),IDX(10)
6000 FORMAT(10H   *** IT=,I2,14H IN GAUSS, SS=,1PE10.4,4H, P=,8E12.4)
6010 FORMAT(10H   V(P) =,1P10E12.4/(10X,10E12.4))
6030 FORMAT(38H0   STEPSWISE RESULTS OF GAUSS ROUTINE/5X,33(1H-))
C
C
DO 10 N=1,NOP
PMF(N)=PMO(N)
PMC(N)=PMD(N)
P (N)=PMO(N)
10 IPS(N)=0
NNP=NOP*NOP
IT=0
CALL HEADR
PRINT 6030
C
20 IT=IT+1
CALL MEMOV(XIN,XWK,ISC*4)
CALL MEMOV(MPA,MCN,MPL)
CALL AJPRM(PMF)
KPR=0
CALL TRNCL(XCL,1)
SIG=0.
DO 22 I=1,KFT
22 SIG=SIG+(XEX(I)-XCL(I))*2*W(I)
SIG=SIG/(KFT-NOP)
PRINT 6000,IT,SIG,(PMF(I),I=1,NOP)
CALL GSCHK(K,IT,ICK,2)
IF(ICK.NE.0) GOTO 100
CALL MEMOV(PMF,PMC,NOP)
L=0
DO 50 N=1,NOP
IF(IPS(N).NE.0) GOTO 50
L=L+1
NP=0
DO 30 J=1,NOP
IF(IPS(J).NE.0) GOTO 30
NP=NP+1
P(NP)=PMF(J)
IF(J.EQ.N) P(NP)=P(NP)+PMD(N)

```

```

30 CONTINUE
  CALL MEMOV(XIN,XWK,ISC*4)
  CALL MEMOV(MPA,MCN,MPL)
  CALL AJPRM(P)
  CALL TRNCL(XCP,2)
  DO 40 I=1,KFT
    J=KFT*(L-1)+I
  40 Z(J)=(XCP(I)-XCL(I))/PMD(N)
    II=KPR*JXY
    DO 42 I=1,II
      J=II*(L-1)+I
  42 ZAP(J)=(XCF(I)-XPR(I))/PMD(N)
50 CONTINUE
  IF(L.EQ.0) GOTO 110
C
  IF(IT.EQ.1) CALL CALWT(W,KEX,KFT)
  CALL AZTHZ(Z,W,A,KFT,NP)
  CALL BZTHX(Z,W,XCL,XX,B,KFT,NP)
  CALL MATIN(A,NOP,B,1,DET,IPV,ICX,NOP,IS)
  DO 52 I=1,NNP
  52 A(I)=A(I)*SIG
  PRINT 6010,(A(I),I=1,NNP)
C
  J=0
  DO 80 N=1,NOP
    PMF(N)=PMC(N)
    IF(IPS(N).NE.0) GOTO 60
    J=J+1
    PMF(N)=PMF(N)+B(J)
  60 IF(PMF(N).GE.PML(N)) GOTO 70
    PMF(N)=PML(N)
    IPS(N)=-1
    GOTO 80
  70 IF(PMF(N).LE.PMU(N)) GOTO 80
    PMF(N)=PMU(N)
    IPS(N)=1
  80 CONTINUE
C
  CALL GSGHK(K,IT,ICK,1)
  IF(ICK.NE.0) GOTO 100
  CALL MEMOV(XCL,XCP,KFT)
  CALL MEMST(0,IPS,NOP)
  GOTO 20
C
100 CONTINUE
110 CONTINUE
120 CONTINUE
C
150 RETURN
  END

```

```

SUBROUTINE AJPRM(P)
C
CCC  AJPRM ADJUSTS THE SUBSTANTIAL PARAMETERS VALUE .
C
C-----
COMMON/CORFL/CRF(21)
COMMON/EFFIC/IEF(8) ,EFC(100)
COMMON/NDIMN/NCP ,NST ,ISC ,IXM ,IYM
1,IXS ,IYS ,JXY
COMMON/LVLOT/LNO ,HLT(21) ,HRG(8) ,LVL(21) ,LAD(21)
1,LTL(21) ,LLV(200) ,HTM(200) ,LPA(21) ,LPS(21) ,HPT(100)
2,LHV(100) ,HLV(100) ,HPM(100)
COMMON/PARMS/NOP ,NSP(10) ,NSL(10) ,NSR(10) ,PMU(10)
1,PML(10) ,PMO(10) ,PMQ(10) ,PMF(10) ,PMC(10) ,IPS(10)
DIMENSION P(1)
COMMON DUM(4810),A(190)
C-----
C
C
DO 30 N=1,NOP
IF(NSP(N).EQ.0) GOTO 20
J=IABS(NSP(N))
IEF(J)=NSP(N)
I1=NSL(N)
I2=NSR(N)
DO 10 I=I1,I2
L=(I-1)*NCP+J
10 EFC(L)=P(N)
GOTO 30
20 I=NSL(N)
IF(NSR(N).EQ.0) GOTO 22
CRF(I)=P(N)
GOTO 30
22 L=LVL(I)
NO=LPS(L)
DO 24 J=2,NO
LA=LPA(L)+J-1
LV=LHV(LA)
24 HLV(J)=HRG(LV)-(HRG(LV)-HRG(LV+1))*P(N)
J=LPA(L)
CALL SPLNE(HPT(J),HLV(J),NO,A,HPM(J))
30 CONTINUE
C
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE CALWT(W,KEX,KFT)
C
CCC   CALWT CALCULATES THE WEIGHTS OF LEAST-SQUARE FITTING .
C
C
-----
COMMON/EXPVL/MPX      ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
DIMENSION W(1),KEX(1)
C
C
DO 10 I=1,KFT
N=KEX(I)
10 W(I)=1./VRC(N)
C   VRC(N) IS VARIANCE OF N-TH EXPERIMENTAL DATA IN CMS ARRAY.
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE AZTHZ(Z,W,A,KFT,NP)
C
CCC   AZTHZ MULTIPLIES THREE MATRICES ,      A = ZT*W*Z .
C
C   Z(KFT,NP) = FIRST ORDER DERIVATIVES OF FITTING CONC.
C   ZT(NP,KFT) = TRANSPOSE OF Z
C   W(KFT)    = DIAGONAL ELEMENTS OF WEIGHT MARIX
C   A(NP,NP)  = RESULTANT MATRIX
C
DIMENSION Z(KFT,1),W(1),A(NP,1)
C
C
DO 30 J=1,NP
DO 20 I=1,NP
T=0.
DO 10 M=1,KFT
10 T=T+Z(M,I)*Z(M,J)*W(M)
A(I,J)=T
20 CONTINUE
30 CONTINUE
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE BZTWX(Z,W,X,Y,B,KFT,NP)
C
CCG  BZTWX MULTIPLIES MATRICES AND VECTOR ,   B = ZT*W*(Y-X) .
C
C      Z (KFT,NP)=
C      ZT(NP,KFT)= TRANSPOSE OF Z
C      W(KFT)   =
C      X(KFT)   =
C      Y(KFT)   =
C      B(NP)    = RESULTANT VECTOR
C
C      DIMENSION Z(KFT,1),W(1),X(1),Y(1),B(1)
C      -----
C
      DO 20 I=1,NP
      T=0.
      DO 10 J=1,KFT
10  T=T+Z(J,I)*W(J)*(Y(J)-X(J))
      B(I)=T
20  CONTINUE
      RETURN
      END

```

```

SUBROUTINE TRNCL(X,IP)
C
CCC   TRNCL CALCULATES THE TRANSIENT CONC.PROFILES OF TIME-SECTION
C     (FROM SMO TO SMT) FOR FITTING .
C
C-----
COMMON/COMPS/JT4      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10) ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR      ,TPR(10) ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/CNTRL/LSM      ,IFL      ,ILV
COMMON/EFFIC/IEF(8)  ,EFC(100)
COMMON/EXPVL/MPX     ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/FITDT/KST    ,KFT      ,TPF(40)  ,KNO(40)  ,KMX(200)
1,KEX(200)
COMMON/NDIMN/NCP     ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
COMMON/STAGE/VMX(21) ,VST(21)  ,SMX(21)  ,SST(21)  ,SMA(21)
1,SMO(21)  ,SSA(21)  ,SSO(21)  ,RCL(21)  ,AFL(21)  ,OFL(21)
2,AFM(21)  ,OFM(21)  ,AFD(21)  ,OFD(21)  ,XFD(100) ,YFD(100)
COMMON/TIMES/SMO     ,SMT      ,TSC(20)  ,NSC      ,TFN
2,TAU     ,DPL      ,NPR(20)
DIMENSION X(1)
COMMON DUM(4550),XAV(250)
C
C
T0=SMO
IK=0
IPR=0
DO 60 N=1,KST
TP=TPF(N)
DT=TAU
NED=0
10 T=T0+DT
IF(TP-T.GT.1.0E-3) GOTO 20
T=TP
DT=T-T0
NED=1
20 CONTINUE
C
TM=(T+T0)*0.5
CALL MEMOV(XWK,XAV,ISC*2)
IF(ILV.EQ.1) GOTO 30
CALL FLOWS(TM)
30 CALL MIXCL(DT,NST,NCP,XWK(IXM),XWK(IYM),XWK(IXS),XWK(IYS),XFD,YFD
1 ,EFC,IEF)
DO 32 I=1,ISC
J=IXM+I-1
XAV(J)=(XAV(J)+XWK(J))*0.5
K=IYM+I-1
32 XAV(K)=(XAV(K)+XWK(K))*0.5
CALL SETCL(DT,NST,NCP,XAV(IXM),XAV(IYM),XWK(IXS),XWK(IYS))
T0=T
IF(DPL.GT.0.) CALL PLOT2(T,XWK)
IF(NED.EQ.0) GOTO 10
C

```

```

NO=IABS(KNO(N))
IF(NO.EQ.0) GOTO 50
DO 40 I=1,NO
IK=IK+1
M=KMX(IK)
MJ=MSG(M)/100
IS=MSG(M)-MJ*100
JC=MCP(M)
IA=MJ*ISC+(IS-1)*NCP+1
IF(MJ.EQ.0.OR.MJ.EQ.2) DEN=DENSA(XWK(IA))
IF(MJ.EQ.1.OR.MJ.EQ.3) DEN=DENSO(XWK(IA))
IA=IA+JC-1
X(IK)=XWK(IA)/(DEN*CNV(JC))
40 CONTINUE
IF(KNO(N).GT.0) GOTO 60
50 IF(IP.NE.1) GOTO 54
I=KPR+JXY+1
CALL MEMOV(XWK,XPR(I),JXY)
KPR=KPR+1
TPR(KPR)=TP
GOTO 60
54 I=IPR+JXY+1
CALL MEMOV(XWK,XCF(I),JXY)
IPR=IPR+1
60 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE MIXCL (DT,NS,NC,XM,YM,XS,YS,XF,YF,EF,IEF)
C
CCC   MIXCL CALCULATES THE TRANSIENT CONC.PROFILE OF MIXER .
C
C-----
COMMON/STAGE/VMX(21) ,VST(21) ,SMX(21) ,SST(21) ,SMA(21)
1,SMO(21) ,SSA(21) ,SSO(21) ,RCL(21) ,AFL(21) ,OFL(21)
2,AFM(21) ,OFM(21) ,AFD(21) ,OFD(21) ,XFD(100) ,YFD(100)
COMMON/TOLRC/IMR ,EMR ,MIT ,ECN ,EPM
1,MFC ,EBP
C-----
C
DIMENSION XM(NC,1),YH(NC,1),XS(NC,1),YS(NC,1),XF(NC,1),YF(NC,1)
1 ,EF(NC,1),IEF(1)
COMMON DUM(4800)
COMMON XI(8),YI(8),XR(8),YR(8),XN(8),YN(8),D(8),FI(8)
DATA CLW,ACC/1.0E-10,1.0/
C-----
C
DT2=DT*0.5
DO 200 I=1,NS
C
DO 10 J=1,NC
XN(J)=XM(J,I)
10 YN(J)=YM(J,I)
FX=AFM(I)*DT2
FY=OFM(I)*DT2
DO 20 J=1,NC
F=XF(J,I)+YF(J,I)+RCL(I)*XS(J,I)
IF(I.LT.NS) F=F+XS(J,I+1)*AFL(I+1)
IF(I.GT. 1) F=F+YS(J,I-1)*OFL(I-1)
20 FI(J)=F*DT
DO 30 J=1,NC
30 FI(J)=FI(J)+(SMA(I)-FX)*XN(J)+(SMO(I)-FY)*YN(J)
HX=FX+SMA(I)
HY=FY+SMO(I)
DO 40 J=1,NC
XI(J)=XF(J,I)/AFD(I)
YI(J)=YF(J,I)/OFD(I)
IF(I.LT.NS) XI(J)=(AFL(I+1)*XS(J,I+1)+XF(J,I))/(AFL(I+1)+AFD(I))
IF(I.GT. 1) YI(J)=(OFL(I-1)*YS(J,I-1)+YF(J,I))/(OFL(I-1)+OFD(I))
IF(EF(J,I).EQ.1..OR. IEF(J).GE.0) GOTO 40
FI(J)=FI(J)+HY*(1.0-EF(J,I))*YI(J)
40 CONTINUE
CCC
DO 50 J=1,NC
XR(J)=XN(J)
50 YR(J)=YN(J)
IT=0
60 IT=IT+1
CALL DBCFX(I,1,XN,YN,D)
DO 100 J=1,NC
IF(IEF(J)) 70,80,90
70 IF(EF(J,I).EQ.1.0) GOTO 80
XN(J)=FI(J)/(HX+HY*EF(J,I)*D(J))
GOTO 100
80 XN(J)=FI(J)/(HX+HY*D(J))
GOTO 100

```

```

90 IF(EF(J,I).EQ.1.0) GOTO 80
   XN(J)=(FI(J)+HY*D(J)+XI(J)*(1.-EF(J,I))/EF(J,I))
   1 / (HX+HY*D(J)/EF(J,I))
100 CONTINUE
C
   EM=0.
   DO 110 J=1,NC
   E=0.
   IF(XN(J).GT.CLW) E=ABS(XN(J)-XR(J))/XN(J)
110 EM=AMAX1(E,EM)
   IF(EM.LT.EMR.OR.IT.GT.IMR) GOTO 140
   DO 120 J=1,NC
   E=XN(J)
   XN(J)=XR(J)+(E-XR(J))*ACC
120 XR(J)=E
   GOTO 60
C
140 DO 190 J=1,NC
   IF(IEF(J)) 150,160,170
150 IF(EF(J,I).EQ.1.0) GOTO 160
   YN(J)=EF(J,I)*D(J)*XN(J)-(1.-EF(J,I))*YI(J)
   GOTO 180
160 YN(J)=XN(J)*D(J)
   GOTO 180
170 IF(EF(J,I).EQ.1.0) GOTO 160
   YN(J)=D(J)*XN(J)/EF(J,I)-(1.-EF(J,I))*D(J)*XI(J)/EF(J,I)
180 XH(J,I)=XN(J)
190 YH(J,I)=YN(J)
C
200 CONTINUE
CCC
   RETURN
   END

```

```

SUBROUTINE DBCFX(I,J,X,Y,D)
C
CCC   DBCFX PROVIDES THE DISTRIBUTION COEFFICIENTS FOR GIVEN VALUES OF
C     AQUEOUS CONCENTRATIONS .
C
C     -----
COMMON/EQUIL/IDR(8)  ,TBP      ,CBP      ,CUK      ,CPK
1,CHK      ,NCH(8)  ,F65      ,F69      ,UOS      ,POS
1,WLT      ,WST      ,HOS
COMMON/NDIMN/NC?    ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
DIMENSION X(8),Y(8),D(8)
C
CCC
HAM=X(1)
UAM=X(2)
PAM=X(3)
TNM=HAM+UAM*2.+PAM*2.
UK=(3.7*TNM**1.57+1.4*TNM**3.9+0.011*TNM**7.3)*CUK
PK=UK*(CPK+0.0074*TNM**2)
HK1=(0.135*TNM**0.82+0.0052*TNM**3.44)*CHK
HK2=HK1
A=2.*(UK*UAM+PK*PAM+HK2*HAM)
B=HK1*HAM+1.
C=CBP
IF(A) 10,10,20
10 TF=C/B
GOTO 30
20 TF=(SQRT(B*B+4.*A*C)-B)/(A+A)
30 TF2=TF*TF
D(1) = HK1*TF+HK2*TF2
D(2) = UK*TF2
D(3) = PK*TF2
CCC
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE SETCL(DT,NS,NC,XM,YM,XS,YS)
C
CCC  SETCL CALCULATES THE TRANSIENT CONC.PROFILE OF SETTLER .
C
C
COMMON/STAGE/VMX(21) ,VST(21) ,SMX(21) ,SST(21) ,SMA(21)
1,SMO(21) ,SSA(21) ,SSO(21) ,RCL(21) ,AFL(21) ,OFL(21)
2,AFM(21) ,OFM(21) ,AFD(21) ,OFD(21) ,XFD(100) ,YFD(100)
C
DIMENSION XM(NC,1),YM(NC,1),XS(NC,1),YS(NC,1)
DATA FRC,FR1/0.5,0.5/
C
C
DO 10 I=1,NS
FOT=DT*(AFL(I)+RCL(I))
C1=DT*AFM(I)
C2=SSA(I)-FOT*FR1
C3=SSA(I)+FOT*FRC
DO 10 J=1,NC
10 XS(J,I)=(C1*XM(J,I)+C2*XS(J,I))/C3
20 CONTINUE
C
DO 40 I=1,NS
C1=DT*OFM(I)
C2=SSO(I)-DT*OFL(I)*FR1
C3=SSO(I)+DT*OFL(I)*FRC
DO 30 J=1,NC
30 YS(J,I)=(C1*YM(J,I)+C2*YS(J,I))/C3
40 CONTINUE
C
RETURN
END

```



```

SUBROUTINE GSCHK(K,IT,ICV,IOP)
C
CCC   GSCHK CHECKS IF THE CONVERGENCE IS ATTAINED IN GAUSS ROUTINE
C     RESPECT TO PARAMETERS OR CONCENTRATIONS .
C
C     -----
COMMON/CONF/XEX(100) ,XCL(100) ,XCP(100)
COMMON/FIDI/KST      ,KFT      ,IPF(40)  ,KNO(40)  ,KMX(200)
1,KEX(200)
COMMON/PARMS/NOP      ,NSP(10)  ,NSL(10)  ,NSR(10)  ,PMU(10)
1,PHL(10) ,PMO(10) ,PMD(10) ,PMF(10) ,PMC(10) ,IPS(10)
COMMON/TOLRC/IMR      ,EMR      ,MIT      ,ECN      ,EPM
1,MFC      ,EBP
C
C     -----
ICV=0
IF(IT.GE.MIT) ICV=-1
IF(IOP.EQ.2)          GOTO 20
EMX=0.
DO 10 N=1,NOP
E=0.
IF(PMF(N).NE.0.) E=ABS((PMF(N)-PMC(N))/PMF(N))
EMX=AMAX1(E,EMX)
10 CONTINUE
IF(EMX.LE.EPM) ICV=1
GOTO 40
C
20 EMX=0.
DO 30 N=1,KFT
E=0.
IF(XEX(N).GT.0.) E=ABS((XEX(N)-XCL(N))/XEX(N))
EMX=AMAX1(E,EMX)
30 CONTINUE
IF(EMX.LE.ECN) ICV=1
C
40 RETURN
END

```



```

SUBROUTINE PRINT(K,IT)
C
CCC PRINT OUT RESULT OF CALCULATIONS
C
C
COMMON/TIMES/SMD ,SMT ,TSC(20) ,NSC ,TFN
2,TAU ,DPL ,NPR(20)
COMMON/PARMS/NOP ,NSP(10) ,NSL(10) ,NSR(10) ,PMU(10)
1,PML(10) ,PMO(10) ,PMD(10) ,PMF(10) ,PMG(10) ,IPS(10)
COMMON/COMPS/JTM ,JFL ,JVL ,CNM(10) ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/CONF/XEX(100) ,XCL(100) ,XCP(100)
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR ,TPR(10) ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/FITDI/KST ,KFT ,TPF(40) ,KNO(40) ,KMX(200)
1,KEX(200)
COMMON/EXPVL/MPX ,MCP(50) ,MSG(50) ,MNO(50) ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/NDIMN/NCP ,NST ,ISC ,IXM ,IYM
1,IXS ,IYS ,JXY
COMMON AINV(100),Z(500),ZAP(3900),ZV(10)
DIMENSION TDF(34),TD3(34)
DATA TDF/ 1., 2., 3., 4., 5., 6., 7., 8., 9., 10., 11.
1 , 12., 13., 14., 15., 16., 17., 18., 19., 20., 21., 22.
2 , 23., 24., 25., 26., 27., 28., 29., 30., 40., 60., 120.
3 , 1000. /
DATA TDB/2.71,4.303,3.182,2.776,2.571,2.447,2.365,2.306,2.262
1 , 2.228,2.201,2.179,2.160,2.145,2.131,2.120,2.110,2.101,2.093
2 , 2.086,2.080,2.074,2.069,2.064,2.060,2.056,2.052,2.048,2.045
3 , 2.042,2.021,2.000,1.980,1.960/
C
6000 FORMAT(59H0 RESULTS OF THE LEAST SQUARE ESTIMATION, TIME SECTIO
1N =,I3,3X,4HFROM,F6.2,3H TO,F6.2 )
6010 FORMAT(5X,38(1H*))
6020 FORMAT(10X,21HITERATIONS REQUIRED =,I3 )
6030 FORMAT(1H0,6X,38HLEAST SQUARE ESTIMATIONS OF PARAMETERS /
1 7X,38(1H-))
6040 FORMAT(9X,21HNO. PARAMETER ERROR,I4,26HVARIANCE-COVARIANCE MATR
1IX )
6050 FORMAT(11,1PE12.4,E10.2,5X,9E10.2)
6060 FORMAT(1H0,6X,64HCONCENTRATIONS AT THE SAMPLING POINT (CALCULATED
1VS. OBSERVED ) / 7X,36(1H-))
6070 FORMAT(10X,32HSAMPLE DATA COMPONENT STAGE TIME,I54,15HCONCENTRATIO
1NS,I83,24H90.% CONFIDENCE INTERVAL )
6080 FORMAT(12X,16HNO. NO. NAME,I39,4H(HR),5X,70HOBSERVED CALCUL
1ATED %RESIDUAL LOWER UPPER %WIDTH )
6090 FORMAT(1H1)
6100 FORMAT(10X,I5,I5,2X,A8,I5,F8.3,1X,1P2E12.4,0PF8.2,2X,1P2E12.4
1,0PF8.2 )
C
C
CALL HEADR
WRITE(6,6000) K,SMD,SMT
WRITE(6,6010)
WRITE(6,6020) IT
WRITE(6,6030)
WRITE(6,6040)

```

```

DO 10 N=1,NOP
I1=(N-1)*NOP+1
I2=I1+NOP-1
DIV=0.
IF(PMF(N).NE.0.) DIV=ABS((PMF(N)-PMC(N))/PMF(N))
10 WRITE(6,6050) N,PMF(N),DIV,(AINV(I),I=I1,I2)
C
WRITE(6,6060)
WRITE(6,6070)
WRITE(6,6080)
SUM=0.
SDF=KFT-NOP
SIG=1.
T=TERPN(TDB,TDF,34,SDF)
C
DO 60 N=1,KFT
DO 30 J=1,NOP
I=(J-1)*KFT+N
30 ZV(J)=Z(I)
SS=0.
DO 50 I=1,NOP
S=0.
DO 40 J=1,NOP
L=(J-1)*NOP+I
40 S=S+AINV(L)*ZV(J)
50 SS=SS+S*ZV(I)

CWD=SQRT(SS)*SIG*T
XLW=XCL(N)-CWD
XUP=XCL(N)+CWD
I=KEX(N)
M=KMX(N)
J=MCP(M)
DIV=100.*(XEX(N)-XCL(N))/XCL(N)
PWD=200.*CWD/XCL(N)
WRITE(6,6100) M,I,CNM(J),MSG(M),TMS(I),XEX(N),XCL(N),DIV,XLW,XUP
1,PWD
60 CONTINUE
KJ=KPR*JXY
DO 70 N=1,KPR
IA=(N-1)*JXY
CALL PRCON(XPR(IA+IXS),XPR(IA+IYS),ZAP,AINV,NCP,NST,KJ,NOP,IA
1,IXS,IYS,JXY,T,TPR(N))
70 CONTINUE
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE PRCON(XS,YS,ZC,A,NC,NS,KJ,NP,IA,IX,IY,JX,ST,TM)
C
CCC  PRCON PRINTS THE CONCENTRATION PROFILES OF MIXER-SETTLER .
C
C -----
COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10)  ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/DBCOF/DBC(100) ,FTC(100)
COMMON/EFFIC/IEF(8)   ,EFC(100)
DIMENSION XS(NC,1),YS(NC,1),ZC(KJ,1),A(NP,1)
COMMON DUM(4800),X(4),Y(4),ZA(10),ZO(10)
CCC
6000 FORMAT(34H0  CONCENTRATION PROFILES AT T =,F6.2,1X,A8 /
1,5X,40(1H-))
6010 FORMAT(6X,36H90.% CONFIDENCE INTERVAL OF AQUEOUS ,A8,1X,A8
1,T67,36H90.% CONFIDENCE INTERVAL OF ORGANIC ,A8,1X,A8 )
6020 FORMAT(5X,2(12H$STAGE LOWER,7X,4HMEAN,8X,5HUPPER,7X,7H% WIDTH,10X)
1)
6030 FORMAT(2(I9,1X,1P3E12.4,8PF9.2,5X))
6040 FORMAT(1H )
6050 FORMAT(5X,2(50(1H-),10X) )
C
C -----
CALL HEADR
WRITE(6,6000) TM,UNT(JTM)
DO 70 JJ=1,NC
WRITE(6,6040)
WRITE(6,6010) CNM(JJ),UNT(JJ),CNM(JJ),UNT(JJ)
WRITE(6,6020)
DO 60 II=1,NS
I=IA+IX+(II-1)*NC+JJ-1
J=IA+IY+(II-1)*NC+JJ-1
DO 10 N=1,NP
ZA(N)=ZC(I,N)
10 ZO(N)=ZC(J,N)
SA=0.
DO 30 I=1,NP
S=0.
DO 20 J=1,NP
20 S=S+A(I,J)*ZA(J)
30 SA=SA+S*ZA(I)
SO=0.
DO 50 I=1,NP
S=0.
DO 40 J=1,NP
40 S=S+A(I,J)*ZO(J)
50 SO=SO+S*ZO(I)
XWD=SQRT(SA)*ST
YWD=SQRT(SO)*ST.
DA=DENSA(XS(1,II))*CNV(JJ)
DO=DENSO(YS(1,II))*CNV(JJ)
X(1)=(XS(JJ,II)-XWD)/DA
X(3)=(XS(JJ,II)+XWD)/DA
X(2)=XS(JJ,II)/JA
X(4)=200.*XWD/XS(JJ,II)
Y(1)=(YS(JJ,II)-YWD)/DO
Y(3)=(YS(JJ,II)+YWD)/DO

```

```
Y(2)=YS(JJ,II)/D0  
Y(4)=200.*YWD/YS(JJ,II)  
X(1)=AMAX1(0.,X(1))  
Y(1)=AMAX1(0.,Y(1))  
60 WRITE(6,6030) II,X,II,Y  
   IF(JJ.EQ.2) CALL HEADR  
70 CONTINUE  
   RETURN  
   END
```

```

SUBROUTINE PLOT1(BUF)
C
CCC   PLOT1 INITIALIZES THE PLOT ARRAYS AND TRANSFERS THE EXPERIMENTAL
C     DATA BEFORE TIME LOOP BEGINS .
C
COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10)  ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/EXPVL/MPX     ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/PLTDT/MPL     ,MP1      ,MPS(26)  ,MPC(26)  ,MPF(26)
1,MPU(26)   ,MCN(26)  ,MPA(26)  ,PLC(106,26),PLT(106,14)
COMMON/CONPR/XIN(250),XWK(250) ,KPR      ,TPR(10)  ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/NOIMN/NCP     ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
C
C
MPL=MPX*2
MP1=MPX+1
DO 10 M=1,MPX
J=MCP(M)
MJ=MSG(M)/100
IS=MSG(M)-MJ*100
N=MJ*ISC+(IS-1)*NCP+J
L=M+MPX
IF(MJ.EQ.1.OR.MJ.EQ.3) IS=-IS
PLC(1,M)=XIN(N)
PLC(1,L)=XIN(N)
MPS(M)=IS
MPS(L)=IS
MPC(M)=J
MPC(L)=J
MPF(M)=M
MPF(L)=M
MPU(M)=J
MPU(L)=J
MCN(L)=1
10 MPA(L)=1
C
DO 30 M=1,MPX
NO=MNO(M)+1
J=MCP(M)
MCN(M)=NO
MPA(M)=NO
DO 20 I=2,NO
N=MAD(M)+I-2
PLC(I,M)=CMS(N)*CNV(J)
20 PLT(I,M)=TMS(N)
30 CONTINUE
C
CALL MEMST(0,BUF,1024)
CALL PLOTS(BUF,1024,7)
CALL P1136H
CALL PLOT(0.,30.,-3)
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE PLOT2(T,XPR)
C
CCC  PLOT2 GETS THE TRANSIENT PLOT DATA AT EVERY DPL TIMES ,
C    PLOT2 IS CALLED FROM SUBROUTINE:TRNCL .
C
COMMON/PLTDT/MPL      ,MP1      ,MPS(26)  ,MPC(26)  ,MPF(26)
1,MPU(26)  ,MCN(26)  ,MPA(26)  ,PLC(106,26),PLT(106,14)
COMMON/TIMES/SMO      ,SMT      ,TSC(20)  ,NSC      ,TFN
2,TAU      ,DPL      ,NPR(20)
COMMON/EXPVL/MPX      ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/NDIMN/NCP      ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYM
1,IXS      ,IYS      ,JXY
DIMENSION XPR(1)
-----
C
C
TP=(MCN(MP1)-MPA(MP1)+1)*DPL+SMO
IF(TP-T.GT.1.0E-3)      GOTO 30
DO 10 M=MP1,MPL
10 MCN(M)=MCN(M)+1
DO 20 MM=MP1,MPL
M=MM-MPX
J=MCP(M)
MJ=MSG(M)/100
I=MSG(M)-MJ*100
N=MJ*ISC+(I-1)*NCP+J
L=MCN(MM)
20 PLC(L,MM)=XPR(N)
PLT(L,MP1)=T
C
30 RETURN
END

```



```

SUBROUTINE TPLOT
C
CCC  TPLOT PLOTS THE TRANSIENT CONC.PROFILES OF EXPERIMENTS AND
C    ESTIMATIONS .
C
C
COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10)  ,CNV(10)
1,UNT(10)
COMMON/NDIMN/NCP      ,NST      ,ISC      ,IXM      ,IYH
1,IXS      ,IYS      ,JXY
COMMON/PLTDT/MPL      ,MP1      ,MPS(26)  ,MPC(26)  ,MPF(26)
1,MPU(26) ,MCN(26) ,MPA(26) ,PLC(106,26),PLT(106,14)
COMMON/TIMES/SMD      ,SMT      ,TSC(20)  ,NSC      ,TFN
2,TAU      ,DPL      ,NPR(20)
COMMON/EXPVL/MPX      ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
C
DIMENSION  MPSTG(20) ,MPFIG(20) ,MPCOM(20) ,MPSCL(20) ,MPCNT(20)
1 ,CNAME(8) ,UNIT (10) ,CNVSN(10) ,PLBUF(106,1)
COMMON     LINID(8) ,MFIGS(4) ,MFIG1(4) ,MFIG2(4)
COMMON/TITLE/TIT(6) ,DAY,THM,NPG
EQUIVALENCE (MPSTG,MPS) ,(MPFIG,MPF) ,(MPCOM,MPC) ,(MPSCL,MPU)
1,(MPCNT,MCN) ,(CNAME,CNM) ,(UNIT ,UNT) ,(CNVSN,CNV) ,(PLBUF,PLC)
2,(TFINL,TFN) ,(MPLOT,MPL)
-----
C
C
C    INITIAL SET FOR PLOTTING
C
CALL MEHST(0,LINID,20)
SN=2.75
SS=3.0
YLEN=150.0
XLEN=200.0
C
C    CONVERT UNIT OF CONC. AND FLOW RATE INTO OUTPUT ONE
C
DO 20 I=1,MPLOT
  J=MPCOM(I)
  R=CNVSN(J)
  IF(R.LE.0.0.OR.R.EQ.1.0)      GOTO 20
  M=MPCNT(I)
  DO 10 N=1,M
    PLBUF(N,I)=PLBUF(N,I)/R
  10 CONTINUE
  20 CONTINUE
C
C    SCALE TIME AXIS DATA
C
T=-TFN
DO 25 I=1,MP1
  25 CALL SCALE(T,PLT(1,I),MCN(I),XLEN)
C
C    FIND OUT PLOT NO. OF SAME FIGURE ID. NO.
C
IFIGN=0
NPLOT=0
  30 CONTINUE

```

```

IFIGN=IFIGN+1
NFIGS=0
NFIG1=0
NFIG2=0
CALL MEMST(0,MFIGS,12)
DO 70 I=1,MPL0T
    IF(IFIGN.NE.MPFIG(I))          GOTO 70
    NFIGS=NFIGS+1
    MFIGS(NFIGS)=I
    IF(NFIG1.GT.0)                 GOTO 40
    JC1=MPSCL(I)
    GOTO 50
40  CONTINUE
    IF(JC1.NE.MPSCL(I))           GOTO 60
50  NFIG1=NFIG1+1
    MFIG1(NFIG1)=I
    GOTO 70
60  CONTINUE
    NFIG2=NFIG2+1
    MFIG2(NFIG2)=I
70  CONTINUE
    IF(NFIGS.LE.0)                .GOTO 300
C
C  SEARCH MAX. VALUE AND SCALE PLOT VALUES
C
    YMAX1=0.0
    DO 80 N=1,NFIG1
        I=MFIG1(N)
        KK=MPCNT(I)
        DO 75 K=1,KK
            YMAX1=AMAX1(YMAX1,PLBUF(K,I))
75  CONTINUE
80  CONTINUE
    DO 90 N=1,NFIG1
        I=MFIG1(N)
        CALL SCALE1(YMAX1,PLBUF(1,I),MPCNT(I),YLEN)
90  CONTINUE
    IF(NFIG2.LE.0)                GOTO 120
    YMAX2=0.0
    DO 100 N=1,NFIG2
        I=MFIG2(N)
        KK=MPCNT(I)
        DO 105 K=1,KK
            YMAX2=AMAX1(YMAX2,PLBUF(K,I))
105 CONTINUE
100 CONTINUE
    DO 110 N=1,NFIG2
        I=MFIG2(N)
        CALL SCALE1(YMAX2,PLBUF(1,I),MPCNT(I),YLEN)
110 CONTINUE
120 CONTINUE
C
C  PLOT ABSCISSA (TIME AXIS)
C  DRAW FRAME LINES
    CALL PLOT(-60.,-30.,3)
    CALL PLOT(238.,-30.,2)
    CALL PLOT(238.,180.,2)

```

```

CALL PLOT(-60.,180.,2)
CALL PLOT(-60.,-30.,2)
X=0.0
Y=0.0
CALL PLOT(X,Y,3)
CALL PLOT(XLEN+3.0,Y,2)
CALL PLOT(X,Y,3)
M=MCN(1)
DU=PLT(M+3,1)
DW=PLT(M+4,1)
NN=PLT(M+5,1)
Y1=-1.0
YN=-4.0
K=-1
IF(DU.LT.1.0) K=1
FPN=0.0
DO 135 N=1,NN
  CALL PLOT(X,Y,3)
  CALL PLOT(X,Y1,2)
  CALL NUMBER(X,YN,SN,FPN,0.0,K)
  X=X+DW
  FPN=FPN+DU
135 CONTINUE
X=XLEN
CALL PLOT(X,Y,3)
CALL PLOT(X,Y1,2)
FPN=YFINL
CALL NUMBER(X,YN,SN,FPN,0.0,K)
X=60.0
Y=-10.0
CALL SYMBOL(X,Y,SS,4,HTIME,0.0,4)
X=X+4.0*SS*6.0/7.0+1.0
CALL SYMBOL(X,Y,SS,UNT(JTM),0,10)
C
C PLOT ORDINATE (CONC. OR FLOW RATE AXIS)
C
NORDT=0
140 CONTINUE
NORDT=NORDT+1
X=0.0
Y=0.0
I=MFIG1(1)
IF(NORDT.EQ.1) GOTO 150
IF(NFIG2.LE.0) GOTO 170
I=MFIG2(1)
X=X-15.0
150 CONTINUE
M=MPCNT(I)
DU=PLBUF(M+3,I)
DW=PLBUF(M+4,I)
NN=PLBUF(M+5,I)
K=-1
IF(DU.LT.1.0) K=1
IF(DU.LT.0.1) K=2
IF(DU.LT.0.01) K=3
DXN=SN*3.*6./7.
IF(K.GT.1) DXN=SN*(K+2)*6./7.

```

```

X1=-1.0+X
J=MPSC(L)
XN=X-DXN
FPN=0.0
NN=NN+1
CALL PLOT(X,Y,3)
CALL PLOT(X,YLEN,2)
DO 160 N=1,NN
    CALL PLOT(X,Y,3)
    CALL PLOT(X1,Y,2)
    CALL NUMBER(XN,Y,SN,FPN,0.0,K)
    Y=Y+DH
    FPN=FPN+DU
160 CONTINUE
Y=60.0
X=XN-2.0
CALL SYMBOL(X,Y,SS,UNIT(J),90.0,10)
C
IF(NORGT.LT.2) GOTO 140
C
170 CONTINUE
C
C
C PLOT CONCENTRATION CHAGE VS. TIME
C PLOT FLOW RATE CHAGE VS. TIME
C
DO 240 N=1,NFIGS
    I=MFIGS(N)
    NSS=MPSTG(I)
    J =MPCOM(I)
    MM =MPCNT(I)
C FIND OUT NB AND NS
    NS=IABS(NSS)
    X=PLT(MM,MP1)
    IF(I.LE.MPX) X=PLT(MM,I)
    Y=PLBUF(MM,I)
    FPN=N
    CALL NUMBER(X,Y,2.0,FPN,0.0,-1)
C
IF(I.LE.MPX) CALL LINE (PLT(I,I),PLC(I,I),MM,1,0.0)
IF(I.GT.MPX) CALL DASHLN(PLT(I,MP1),PLC(I,I),MM,1)
C
C PRINT LINE ID.
X=10.0
Y=YLEN+(2-N)*5.0+1.0
IF(NSS.LT.0) NPHAS=7HORGANIC
IF(NSS.GT.0) NPHAS=7HAQUEOUS
IF(I-MPX) 210,210,220
210 LTYP=1
ENCODE(50,3000,LINID) N,CNM(J),NPHAS,UNT(J)
GOTO 230
220 LTYP=3
ENCODE(50,3010,LINID) N,CNM(J),NPHAS,UNT(J)
230 CONTINUE
CALL LINTYP(X,Y+1.5,X+9.0,Y+1.5,LTYP,2.5)
X=X+10.0
CALL SYMBOL(X,Y,SN,LINID,0.0,50)

```

```

C
240 CONTINUE
C
C PRINT HEAD TITLE
X=0.
Y=YLEN+12.
ENCODE(40,3020,LINID) NS,TIT(6)
CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0,40)
X=-5.0
Y=-17.0
CALL MEMOV(TIT,LINID,5)
CALL MEMST(1H,LINID(6),2)
CALL MEMOV(DAY,LINID(8),1)
CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,80)
X=0.0
Y=YLEN
CALL PLOT(X,Y,3)
X=XLEN+3.0
CALL PLOT(X,Y,2)
Y=0.0
CALL PLOT(X,Y,2)
C
NPLOT=NPLOT+NFIGS
CALL PLOT(298.,0.,-3)
300 CONTINUE
C
IF(IFIGN.GE.20) GOTO 400
IF(NPLOT.LT.MPLOT) GOTO 30
400 CONTINUE
C
CALL PLOT(0,0,999)
PRINT 6000
6000 FORMAT(20H0 PLOT TAPE IS MADE )
3000 FORMAT(I1,1X,A8,4H IN ,A8, 7H PHASE ,A8,9H OBSERVED )
3010 FORMAT(I1,1X,A8,4H IN ,A8, 7H PHASE ,A8,11H CALCULATED )
3020 FORMAT(22HCONCENTRATION IN STAGE,I3,4H OF ,A8 )
C
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE SGPLT
C
CCC  SGPLT GETS THE CONCENTRATION DATA OF SPECIFIED TIME FOR STAGE
C    PROFILE PLOTTING .
C
COMMON/CONPR/XIN(250) ,XWK(250) ,KPR          ,TPR(10)  ,XPR(1000)
1,XCF(1000)
COMMON/EXPVL/MPX          ,MCP(50)  ,MSG(50)  ,MNO(50)  ,MAD(50)
1,CMS(1000) ,TMS(1000) ,VRC(1000)
COMMON/PLTSG/LPN          ,TPL(10)  ,LPL(10)  ,LSC(10)  ,LCP(20)
1,LCN          ,JCN
COMMON/NDIMN/NCP          ,NST          ,ISC          ,IXM          ,IYM
1,IXS          ,IYS          ,JXY
DIMENSION  NEP(10) ,NSG(10) ,XEV(10)
C
C
10  IF(LCN.GT.LPN)          GOTO 100
    TP=TPL(LCN)
    DO 20 K=1,KPR
      IF(ABS(TP-TPR(K)).LT.1.0E-3)  GOTO 30
20  CONTINUE
    GOTO 100
30  IA=(K-1)*JXY
    IX=IA+IXS
    IY=IA+IYS
C    GET CORRESPONDING EXPERIMENTAL DATA
    NEX=0
    L1=JCN+1
    L2=L1+LPL(LCN)-1
    DO 70 L=L1,L2
      JP=IABS(LCP(L))
      DO 60 M=1,MPX
        IF(MCP(M).NE.JP)          GOTO 60
        IJ=MSG(M)/100
        MJ=MOD(IJ,2)
        IF(MJ.EQ.0.AND.LCP(L).LT.0)  GOTO 60
        IF(MJ.NE.0.AND.LCP(L).GT.0)  GOTO 60
        I1=MAD(M)
        I2=I1+MNO(M)-1
        DO 40 I=I1,I2
          IF(ABS(TP-TMS(I)).LT.1.0E-3)  GOTO 50
40  CONTINUE
        GOTO 60
50  NEX=NEX+1
        NEP(NEX)=LCP(L)
        NSG(NEX)=MSG(M)-IJ*100
        XEV(NEX)=CMS(I)
60  CONTINUE
70  CONTINUE
C
    CALL SPLOT(TP,XPR(IX),XPR(IY),NCP,NST,NEX,NEP,NSG,XEV)
C
    LCN=LCN+1
    CALL PLOT(210.,0.,-3)
    IF(LCN.LE.LPN)          GOTO 10
C
C    NOW SPLOT PROCEDURE IS COMPLETED .
    CALL PLOT(60.,0.,-3)
    CALL PLOT(0,0,999)
100 RETURN
    END

```

```

SUBROUTINE SPLOT(TP,XM,YM,NCOMP,NS,NEX,NEP,NSG,XEV)
C
CCC   SPLOT PLOTS THE STAGE CONCENTRATION PROFILES WITH EXPERIMENTAL
C     POINTS .
C
      DIMENSION XM(NCOMP,1),YM(NCOMP,1),NEP(1)  ,NSG(1)  ,XEV(1)
      COMMON/COMPS/JTM      ,JFL      ,JVL      ,CNM(10) ,CNV(10)
      1,UNT(10)
      COMMON/PLTSG/LPN      ,TPL(10)  ,LPL(10)  ,LSC(10) ,LCP(20)
      1,LCN      ,JCN
      COMMON      XA(25)  ,YA(25,4)  ,JP(4)  ,LINID(6)
      COMMON/TITLE/TIT(6),DAY,THM,NPG
      DIMENSION LPNUM(10) ,LPLOT(10) ,LPSCL(10) ,LPCMP(20) ,CNAME(8)
      1      ,CNVSN(8) ,UNIT(8)
      DIMENSION NSYMB(4)
      EQUIVALENCE (LPNUM,LPN),(LPLLOT,LPL),(LPSCL,LSC),(LPCMP,LCP)
      1,(LPCNT,LCN),(JPCNT,JCN),(CNAME,CNM),(CNVSN,CNV),(UNIT ,UNT)
C
      DATA NSYMB/1,2,5,11/
C
-----
C
      IF(LPCNT.GT.1)          GOTO 10
      SN=2.75
      SS=3.0
      SNH=2.0
      XLEN=150.0
      YLEN=200.0
      XLEN1=140.0
C
10  CONTINUE
C
      *** MOVE CONC. DATA INTO PLOTTING STORAGE : YA ***
      LP=LPLLOT(LPCNT)
      JU=LPSCL(LPCNT)
      DO 30 L=1,LP
          JPCNT=JPCNT+1
          JJ=LPCMP(JPCNT)
          JP(L)=JJ
          J=IABS(JJ)
          R=CNVSN(J)
          DO 20 I=1,NS
              K=I
              IF(JJ.LT.0) YA(I,L)=YM(J,K)
              IF(JJ.GT.0) YA(I,L)=XM(J,K)
              IF(R.LE.0.0.OR.R.EQ.1.0) GOTO 20
              YA(I,L)=YA(I,L)/R
          20  CONTINUE
      30  CONTINUE
      LLP=LP
      IF(NEX.EQ.0)          GOTO 50
      J=0
      DO 40 I=1,NEX
          IF(J.EQ.NEP(I))    GOTO 40
          LLP=LLP+1
          J=NEP(I)
          JP(LLP)=J
  
```

```

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

```



```

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

```

```

X=XA(I)
Y=YA(I;L)
IF(J.LT.0) CALL DASHPT(X,Y,1.0)
IF(J.GT.0) CALL PLOT (X,Y,2 )
CALL SYMBOL(X,Y,2.0,NSYMB(L),0.0,-1)
230 CONTINUE
C
C      --- PRINT LINE IDENTIFICATION
JJ=IABS(J)
IF(J.LT.0) PHASE=7HORGANIC
IF(J.GT.0) PHASE=7HAQUEOUS
ENCODE(50,3000,LINID) CNM(J),PHASE,UNT(J)
X=10.0
Y=YLEN+(LLP-L)*5.0+1.0
CALL SYMBOL(X,Y+1.0,2.0,NSYMB(L),0.0,-1)
CALL SYMBOL(X+3.0,Y,SN,LINID,0.0,50)
240 CONTINUE
C
C      *** PLOT EXPERIMENTAL POINTS ***
C
IF(NEX.EQ.0) GOTO 300
DO 250 N=1,NEX
Y=ALOG10(XEV(N))-NEMIN
IF(Y.LT.0.) Y=0.
250 XEV(N)=Y*DWY
L1=LP+1
DO 280 N=1,NEX
I=NSG(N)
X=XA(I)
Y=XEV(N)
DO 260 L=L1,LLP
IF(NEP(N).EQ.JP(L)) GOTO 270
260 CONTINUE
GOTO 280
270 CALL SYMBOL(X,Y,2.0,NSYMB(L),0,-1)
280 CONTINUE
DO 290 L=L1,LLP
JJ=JP(L)
J=IABS(JJ)
IF(JJ.LT.0) PHASE=7HORGANIC
IF(JJ.GT.0) PHASE=7HAQUEOUS
ENCODE(50,3010,LINID) CNM(J),PHASE,UNT(J)
X=10.0
Y=YLEN+(LLP-L)*5.0+1.0
CALL SYMBOL(X,Y+1.0,2.0,NSYMB(L),0,-1)
290 CALL SYMBOL(X+3.0,Y,SN,LINID,0,50)
C
C      *** PRINT HEAD AND JOB TITLE ***
C
300 CONTINUE
X=0.0
Y=YLEN+LLP*5.0+2.0
ENCODE(60,3020,LINID) TIT(6),TP,UNT(JTM)
CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,60)
X=-5.0
Y=-17.0
CALL MEMOV(TIT,LINID,5)

```

```
CALL MEMOV(DAY,LINID(6),1)
CALL SYMBOL(X,Y,SS,LINID,0.0,60)
C
C      *** END OF ONE FIGURE PLOTTING ***
C
C
3000 FORMAT(A8,4H IN ,A7,7H PHASE ,A8,11H CALCULATED,5X)
3010 FORMAT(A8,4H IN ,A7,7H PHASE ,A8,11H OBSERVED ,5X)
3020 FORMAT(25HCONCENTRATION PROFILE OF ,A8,9H, TIME =,F6.2,1X,A8)
C
      RETURN
      END
```

```
      SUBROUTINE HEADR
C
CCC   HEADR PRINTS JOB TITLE ON THE HEAD OF LINE PRINTER .
C
      COMMON/TITLE/TIT(6),DAY,THM,NPG
6000  FORMAT(1H1,9X,5A10,20X,2A10,7H  PAGE,I5)
CCC
      NPG=NPG+1
      PRINT 6000,(TIT(I),I=1,5),DAY,THM,NPG
      RETURN
CCC
      ENTRY HEADS
      NPG=0
      CALL DATE(DAY)
      CALL TIME(THM)
      RETURN
      END
```

```

SUBROUTINE SCALE(VMAX,PLBUF,NCNT,VLEN)
C
C PURPOSE
C   TO SCALE PLBUF DATA FOR PLOTTING
C
C PARAMETER
C   PLBUF   DATA ARRAY TO BE SCALED
C   VMAX    MAXIMUM VALUE IN PLBUF ARRAY
C   NCNT    NUMBER OF DATA
C   VLEN    LENGTH OF PLOT AXIS (MM )
C
C   DIMENSION PLBUF(NCNT)
C   -----
C
C   ENTRY SCALE1
C   AMAX=ABS(VMAX)
C   Z=AMAX/10.0
C   T=0.0001
C   DO 10 N=1,6
C     T=T*10.0
C     IF(T.GE.Z)          GOTO 15
C 10 CONTINUE
C 15 CONTINUE
C
C   N=AMAX/T+0.5
C   IF(N.GT.2)          GOTO 20
C   N=N*2
C   T=T*0.5
C 20 CONTINUE
C   TT=N*T+1.0E-10
C   IF(TT.LE.AMAX) N=N+1
C
C   DU=T
C   IF(VMAX.GT.0.0)    GOTO 24
C   DM=-VMAX
C   DW=DU*VLEN/DM
C   GOTO 26
C 24 CONTINUE
C   DM=N*T
C   DW=VLEN/N
C 26 CONTINUE
C   DV=VLEN/DM
C   DO 30 I=1,NCNT
C     PLBUF(I)=PL3JF(I)*DV
C 30 CONTINUE
C   PLBUF(NCNT+1)=0.0
C   PLBUF(NCNT+2)=1.0
C   PLBUF(NCNT+3)=DU
C   PLBUF(NCNT+4)=DW
C   PLBUF(NCNT+5)=N
C
C   -----
C   RETURN
C   END

```

```
FUNCTION TERPN(A,T,N,IM)
C
CCC  TERPN INTERPOLATES THE TABULATED DATA LINEARLY .
C
      DIMENSION A(1),T(1)
CCC
      IF(N.GT.1)          GOTO 10
      5  TERPN=A(1)
      GOTO 80
C
      10  MIN=1
          MAX=N
      20  IF(MAX-MIN-1) 70,70,30
      30  MID=(MAX+MIN)/2
          IF(TM-T(MID)) 40,60,50
      40  MAX=MID
          GOTO 20
      50  MIN=MID
          GOTO 20
      60  MIN=MID
          MAX=MIN+1
      70  FRC=(TM-T(MIN))/(T(MAX)-T(MIN))
C
      ENTRY TERP1
      IF(N.EQ.1)          GOTO 5
      TERPN=A(MIN)+(A(MAX)-A(MIN))*FRC
C
      80  RETURN
      END
```

```

SUBROUTINE ITERP(A,N,T,MIN,MAX,MBD)
C
DIMENSION A(N)
CCC
MBD=0
IF(N.GT.1) GOTO 10
MIN=1
MAX=1
GOTO 80
C
10 MIN=1
MAX=N
20 IF(MAX-MIN-1) 70,70,30
30 MID=(MIN+MAX)/2
IF(T-A(MID)) 40,60,50
40 MAX=MID
GOTO 20
50 MIN=MID
GOTO 20
60 MIN=MID
MAX=MIN+1
70 IF(T.GE.A(MAX)) MBD= 1
IF(T.LE.A(MIN)) MBD=-1
C
80 RETURN
END

```

```
-----  
SUBROUTINE MEMOV(A,B,N)  
DIMENSION A(N),B(N)  
DO 10 I=1,N  
10 B(I)=A(I)  
RETURN  
END  
-----  
-----  
-----
```

```
-----  
SUBROUTINE MEMST(A,B,N)  
DIMENSION B(N)  
DO 10 I=1,N  
10 B(I)=A  
RETURN  
END  
-----  
-----  
-----
```


付録3 計算例

付録3 計算例

運転管理計算の代表的な例として、第1抽出器のスタートアップおよび第1抽出器に界面移動がみられる場合の計算例を示す。

仮想的な運転データとしてMIXSETの計算値を使用し、MIXSETの濃度計算値に変動係数として5%の誤差を同伴させたものを運転データの濃度測定値とした。

計算例1. 第1抽出器のスタートアップ(1)

1. 計算目的

段効率をフィティング計算のパラメータとし、段効率は抽出器の全段で共通とする。

下記の2つのケースについて計算し、濃度計算値の信頼区間を比較する。

計算例1.1 第1抽出器の17段のうち、第7、12段におけるセトラ部水相の酸、ウラン、プルトニウム濃度を測定する。

計算例1.2 濃度を測定する段数が、計算例1.1よりも多く、第1段の酸濃度と、第7、9、12、17段の酸、ウラン、プルトニウム濃度を測定する。

2. 計算条件

下記の運転データをもとに運転管理計算を行う。

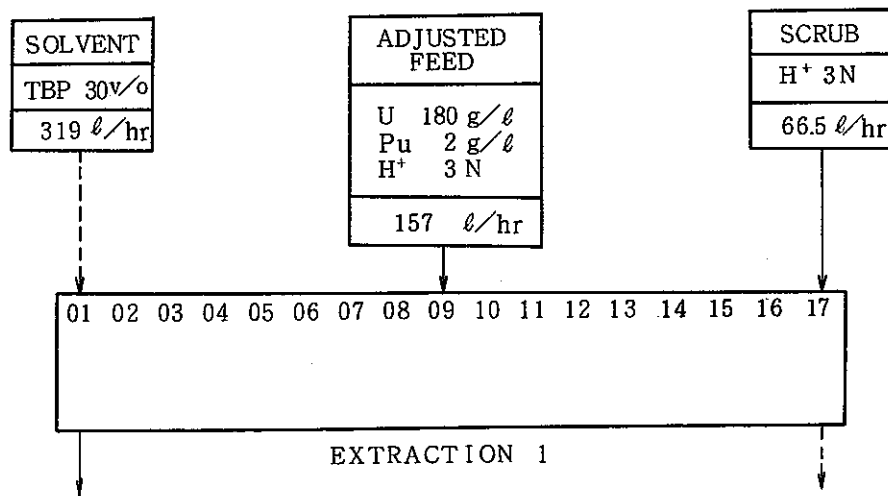
2.1 供給液条件

付図3.1にフローシートを示す。

時刻T=0より、酸平衡からアクティブフィードを開始する。

2.2 界面位置

抽出器の全ての段で、界面指示灯は、常に3個点灯し、界面位置の変動はないものとする。



付図3.1 計算例1のフローシート

2.3 濃度測定値

濃度測定点となる段のセトラ部水相中の成分濃度を12分間隔で測定する。計算例1.1の濃度測定値を付図3.2～3.7に実線で示す。計算例1.2の濃度測定図を付図3.10～3.22に実線で示す。

3. 計算結果

3.1 計算例 1.1

付図 3.2～3.7 に第 7, 12 段の酸, ウラン, プラトニウム濃度測定値を実線で示し, これに対する濃度計算値を点線で示す。

付図 3.8, 3.9 に $T=4\text{ Hr}$ における水相のウランおよびプラトニウムの濃度分布を示す。

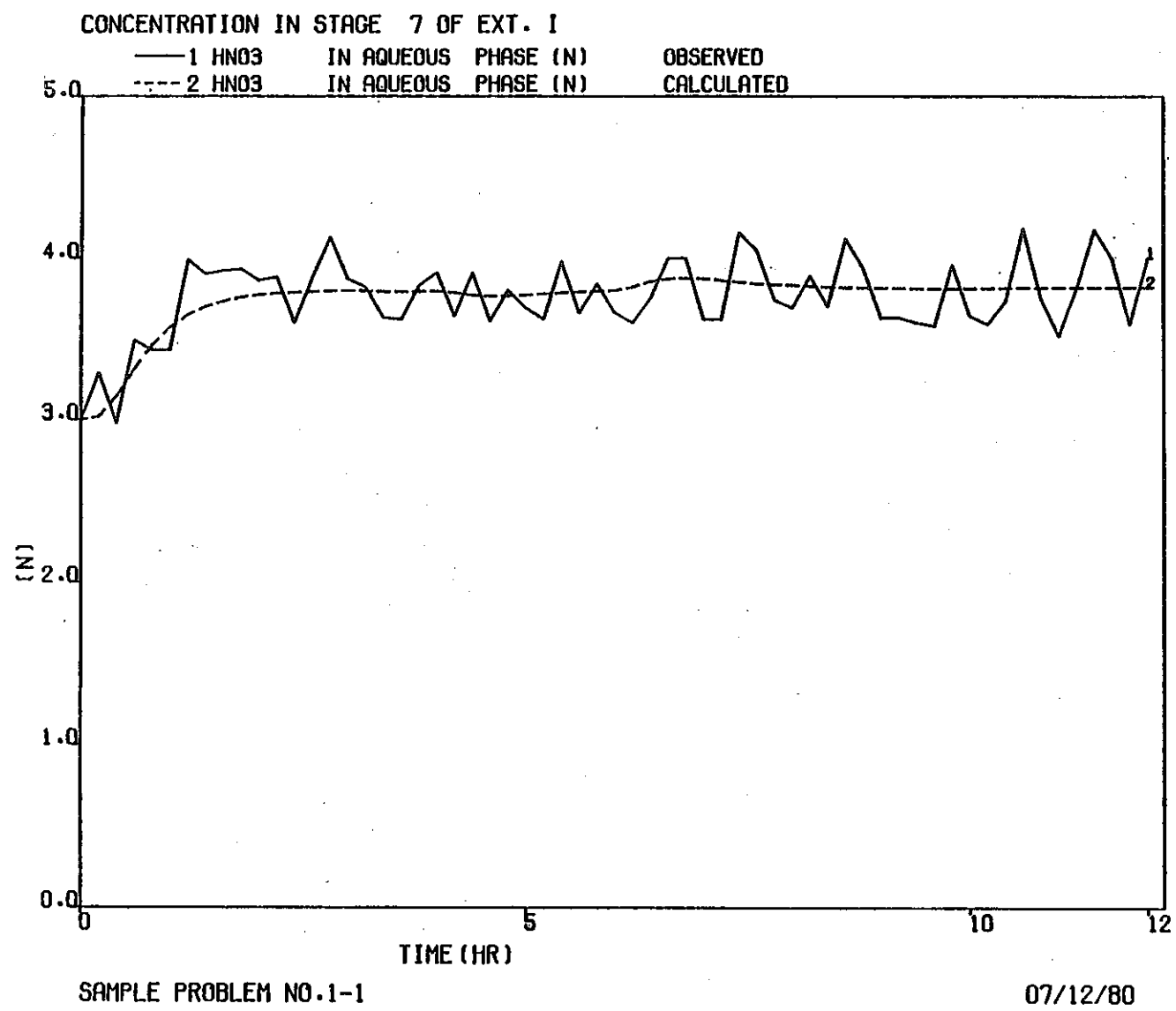
付表 3.1 に $T=8\text{ Hr}$ における各成分の信頼区間および濃度計算値を示す。

3.2 計算例 1.2

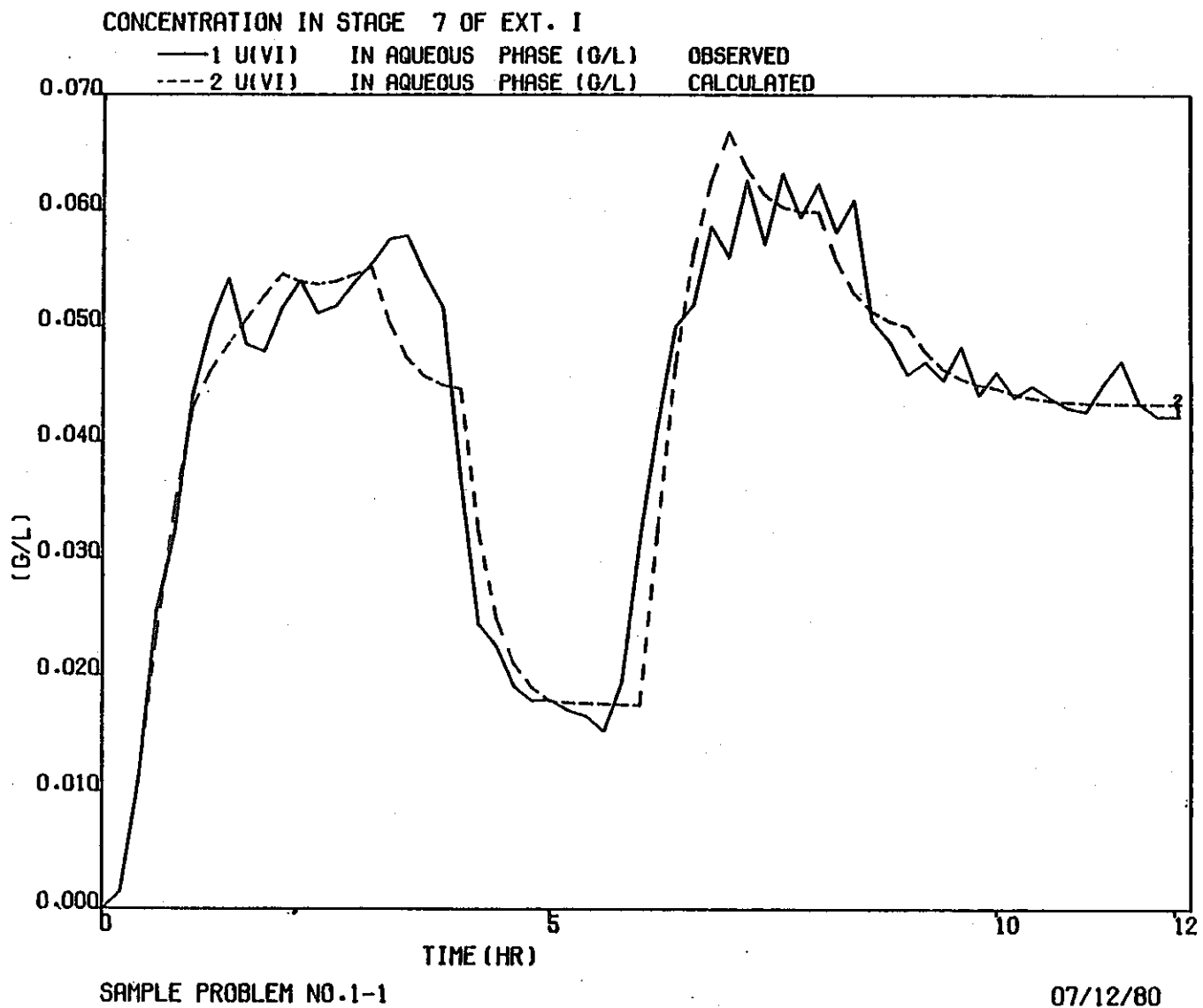
付図 3.10～3.22 に第 1 段の酸および第 7, 9, 12, 17 段の酸, ウラン, プルトニウム濃度測定値を実線で示し, これに対する濃度計算値を点線で示す。

付図 3.23, 3.24 に, $T=8\text{ Hr}$ における水相のウランおよびプルトニウムの濃度分布を示す。

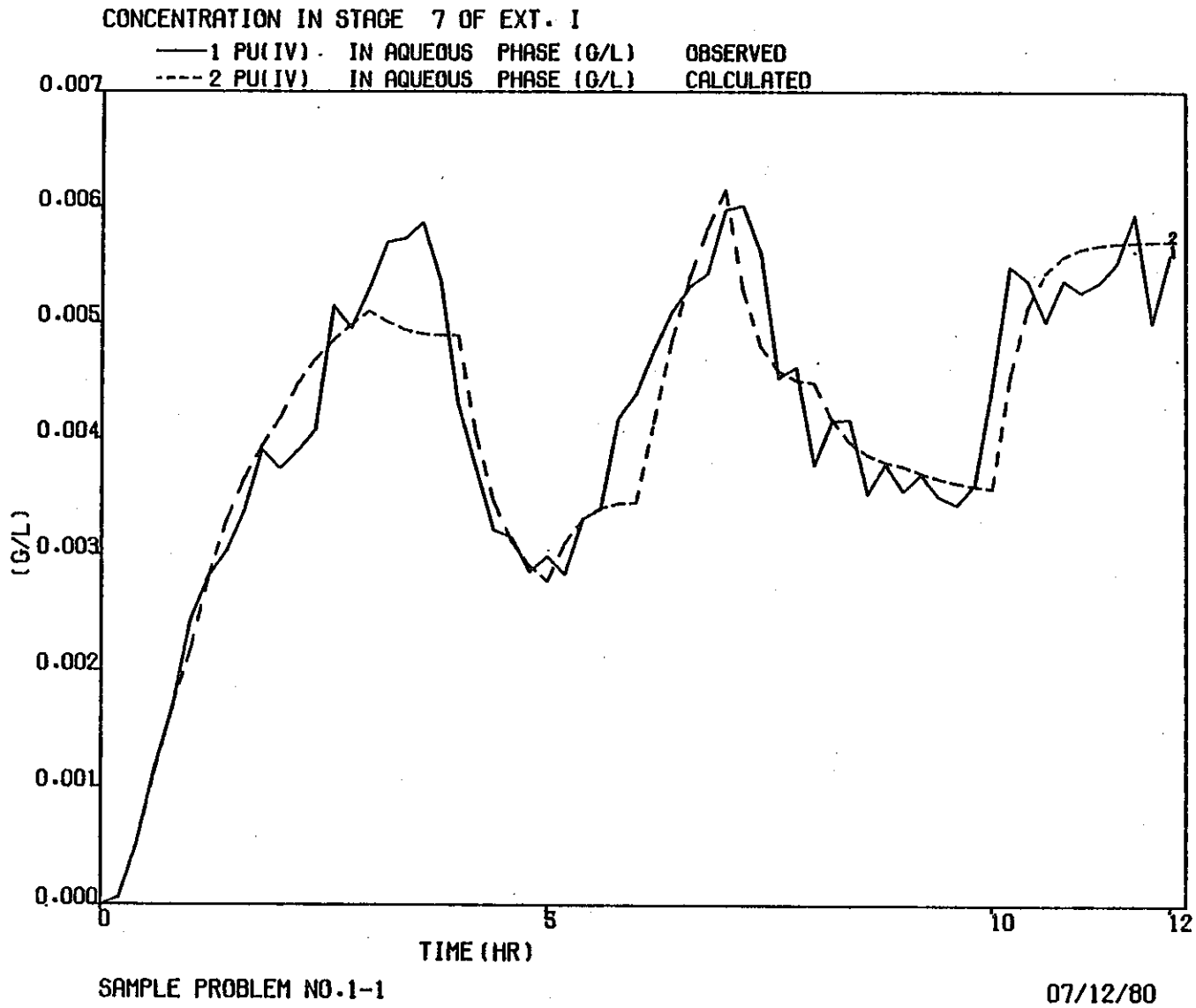
付表 3.2 に $T=8\text{ Hr}$ における各成分の信頼区間および濃度計算値を示す。



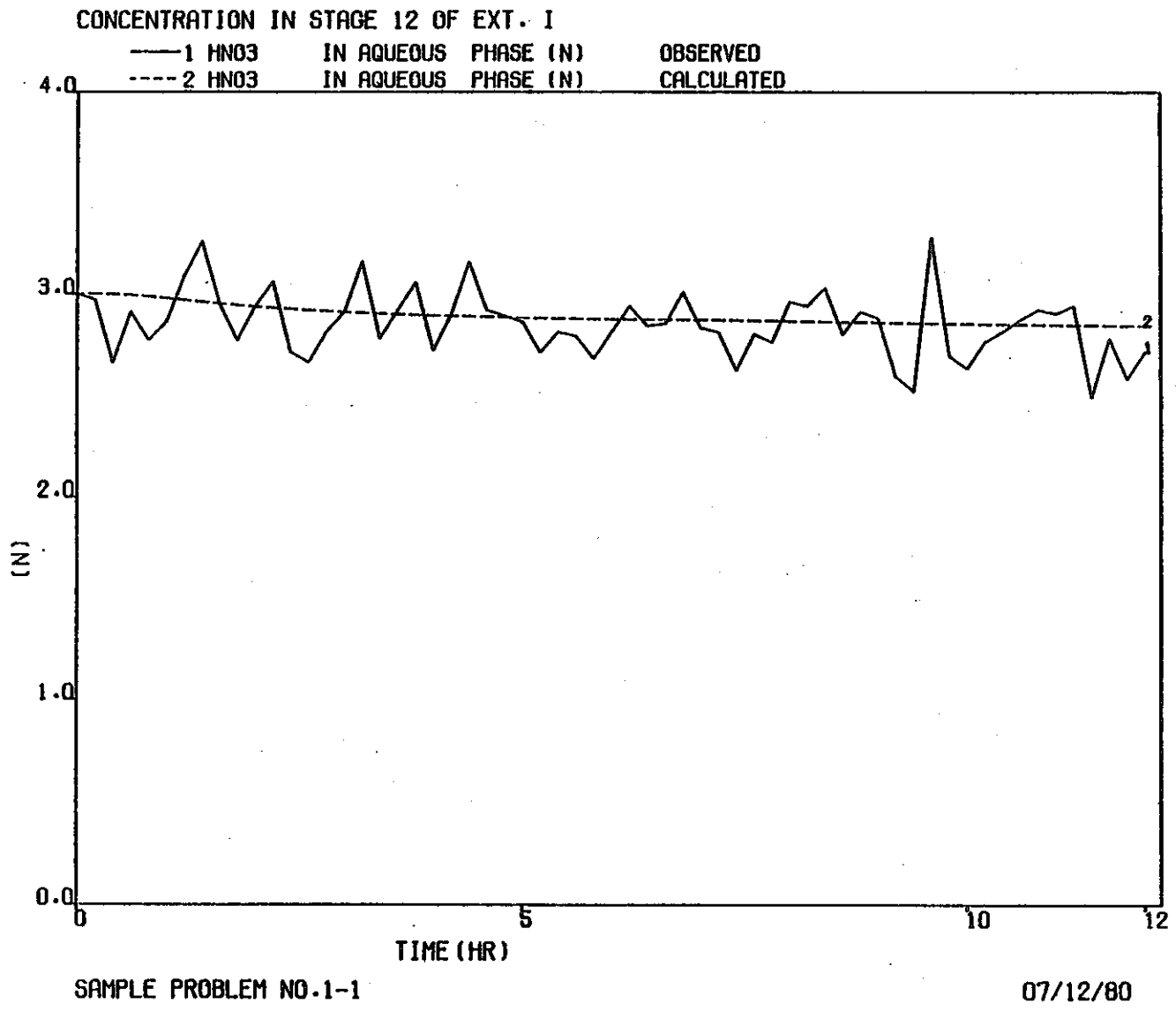
付図 3.2 EXT. I, 第 7 段水相の酸の濃度変化



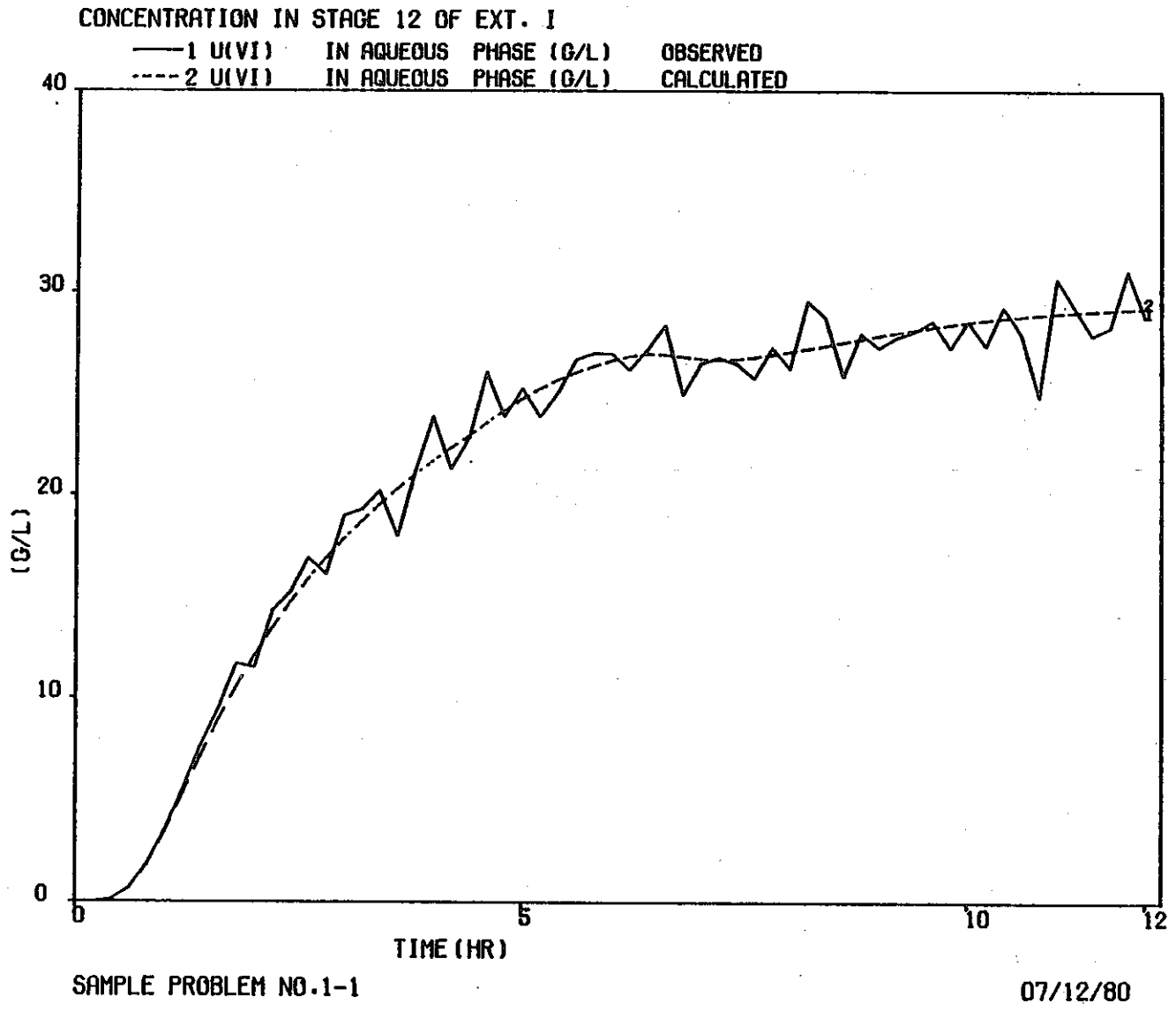
付図 3.3 EXT. I, 第7段水間のUの濃度変化



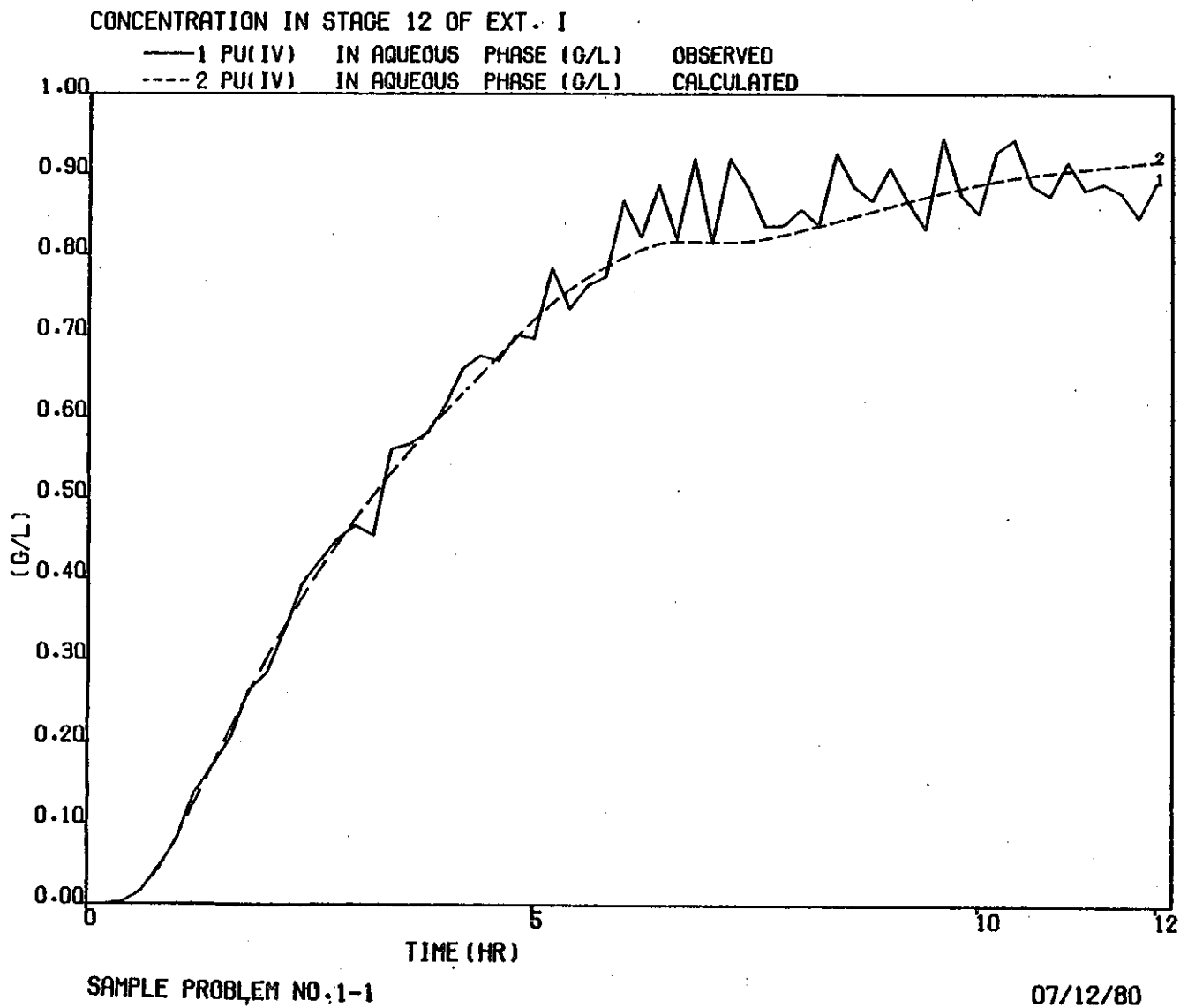
付図 3.4 EXT. I, 第7段水相のPuの濃度変化



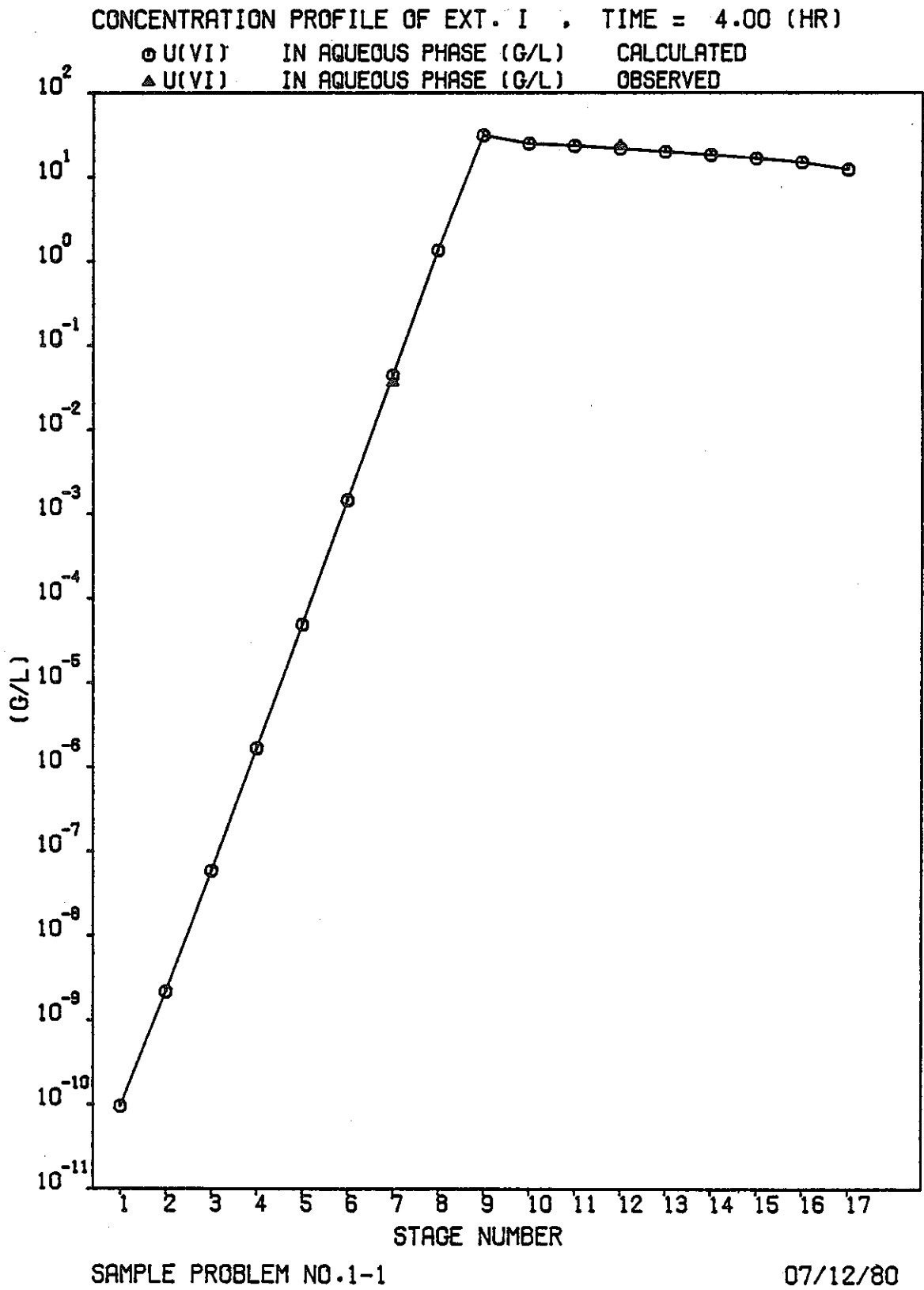
付図 3.5 EXT. I, 第12段水相の酸の濃度変化



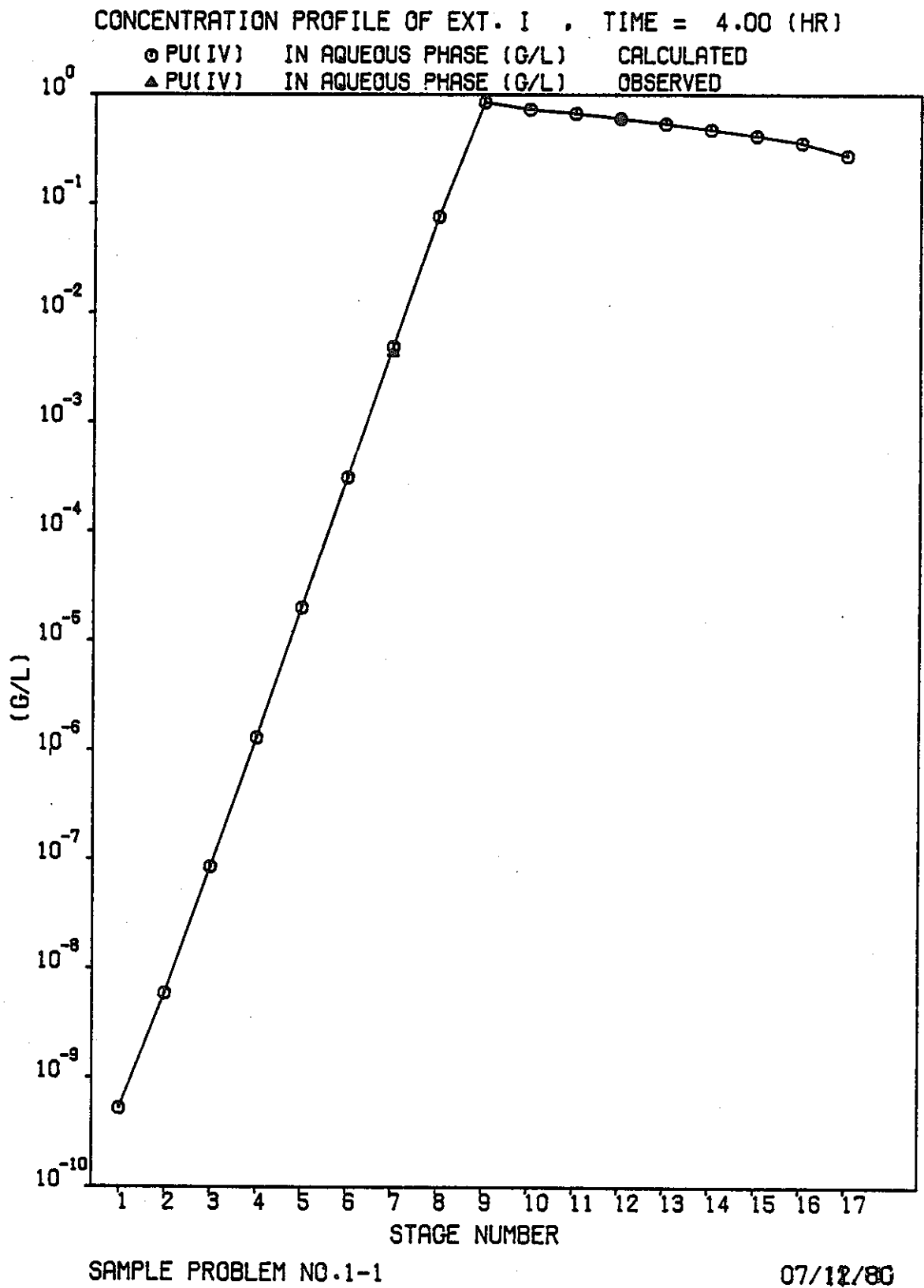
付図 3.6 EXT. I, 第12段水相のUの濃度変化



付図 3.7 EXT. I, 第12段水相のPuの濃度変化



付図3.8 EXT. I 水相におけるUの濃度分布



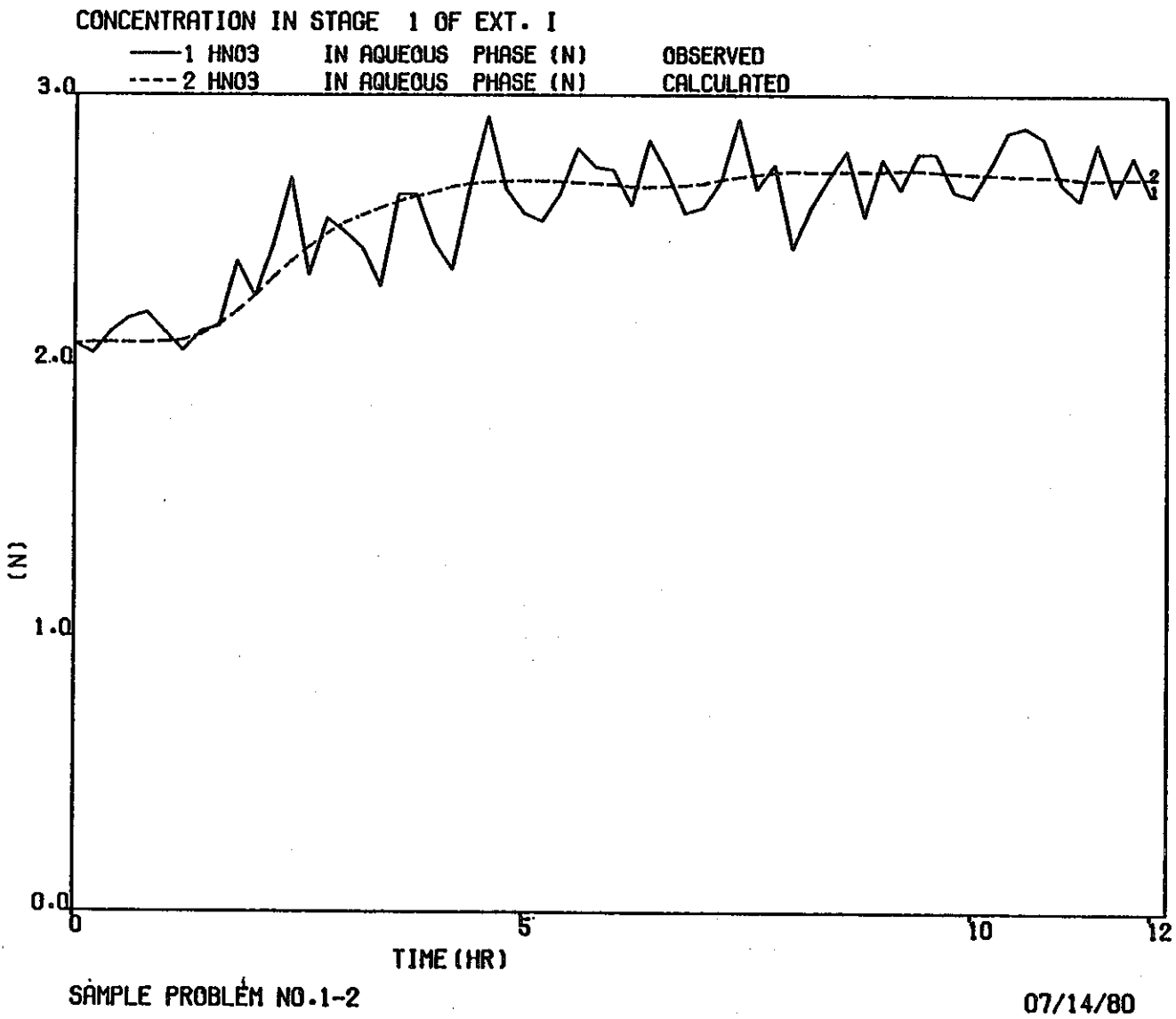
付図3.9 EXT. I水相におけるPuの濃度分布

付表 3.1 計算例 1.1 の T=8Hr における信頼区間および濃度計算値

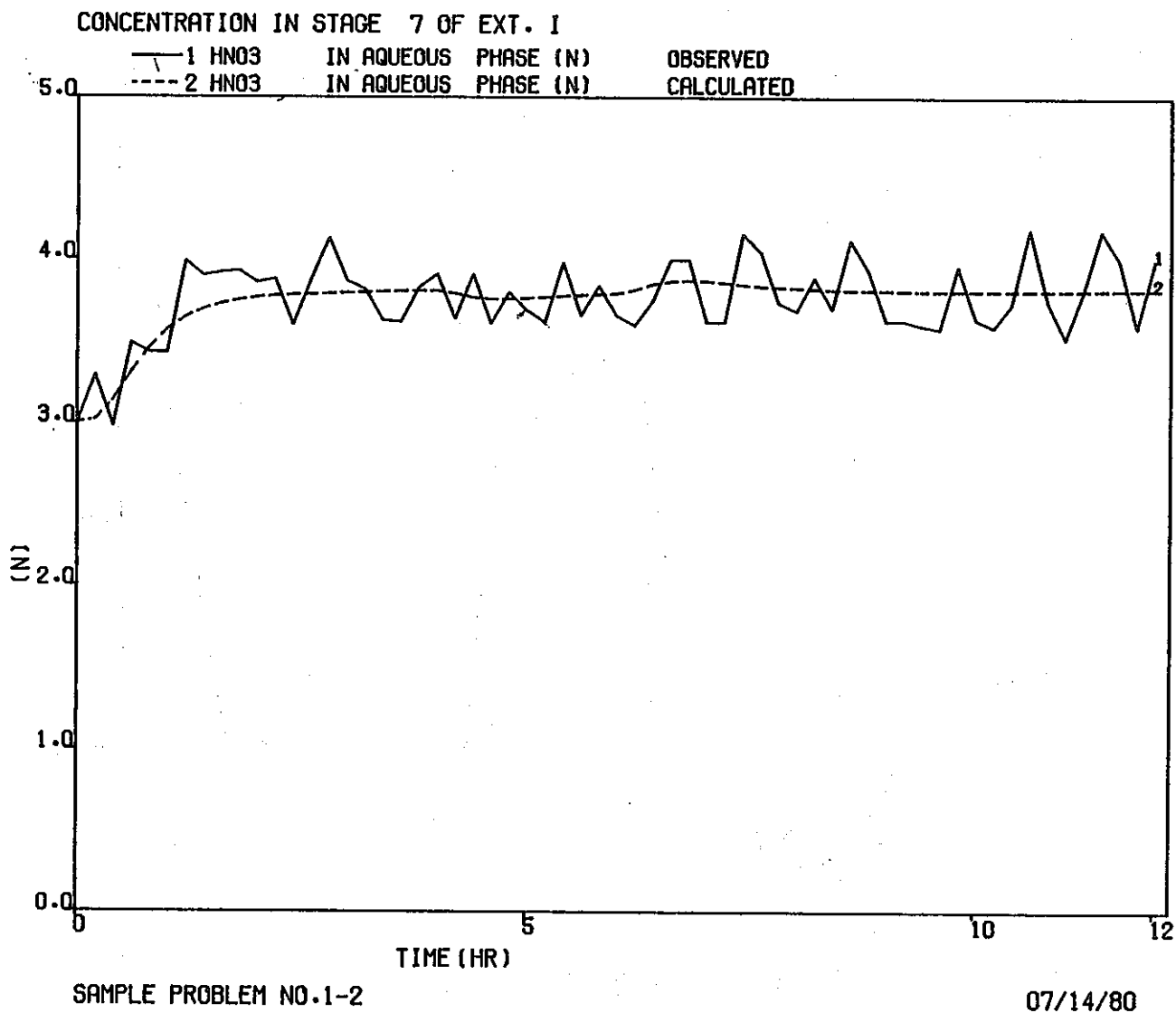
段	90% 信頼区間巾 [%]			濃 度 計 算 値		
	H ⁺	U	Pu	H ⁺ [N]	U[g/l]	Pu[g/l]
1	28.5	32.4	36.6	2.71	1.56 × 10 ⁻¹⁰	3.21 × 10 ⁻¹⁰
2	67.9	44.4	65.6	3.57	3.74 × 10 ⁻⁹	3.62 × 10 ⁻⁹
3	33.4	32.0	36.3	3.79	1.01 × 10 ⁻⁷	5.32 × 10 ⁻⁸
4	16.3	29.1	34.5	3.84	2.78 × 10 ⁻⁶	8.19 × 10 ⁻⁷
5	13.3	26.0	29.5	3.84	7.68 × 10 ⁻⁵	1.42 × 10 ⁻⁵
6	14.1	21.7	22.8	3.84	2.14 × 10 ⁻³	2.49 × 10 ⁻⁴
7	14.3	16.3	15.1	3.83	5.98 × 10 ⁻²	4.48 × 10 ⁻³
8	11.6	10.9	9.8	3.81	1.66	7.98 × 10 ⁻²
9	8.6	4.9	8.4	3.53	3.39 × 10	9.26 × 10 ⁻¹
10	32.2	13.1	21.4	2.95	2.76 × 10	8.49 × 10 ⁻¹
11	7.7	0.9	1.0	2.88	2.75 × 10	8.45 × 10 ⁻¹
12	1.9	1.2	2.0	2.86	2.71 × 10	8.30 × 10 ⁻¹
13	0.8	0.8	1.3	2.86	2.66 × 10	8.09 × 10 ⁻¹
14	1.0	0.1	0.2	2.86	2.60 × 10	7.82 × 10 ⁻¹
15	2.4	1.0	1.5	2.86	2.51 × 10	7.44 × 10 ⁻¹
16	5.5	2.8	4.2	2.86	2.33 × 10	6.71 × 10 ⁻¹
17	8.8	4.7	6.3	2.89	1.83 × 10	4.95 × 10 ⁻¹

$$90\% \text{ 信頼区間の巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間の下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100$$

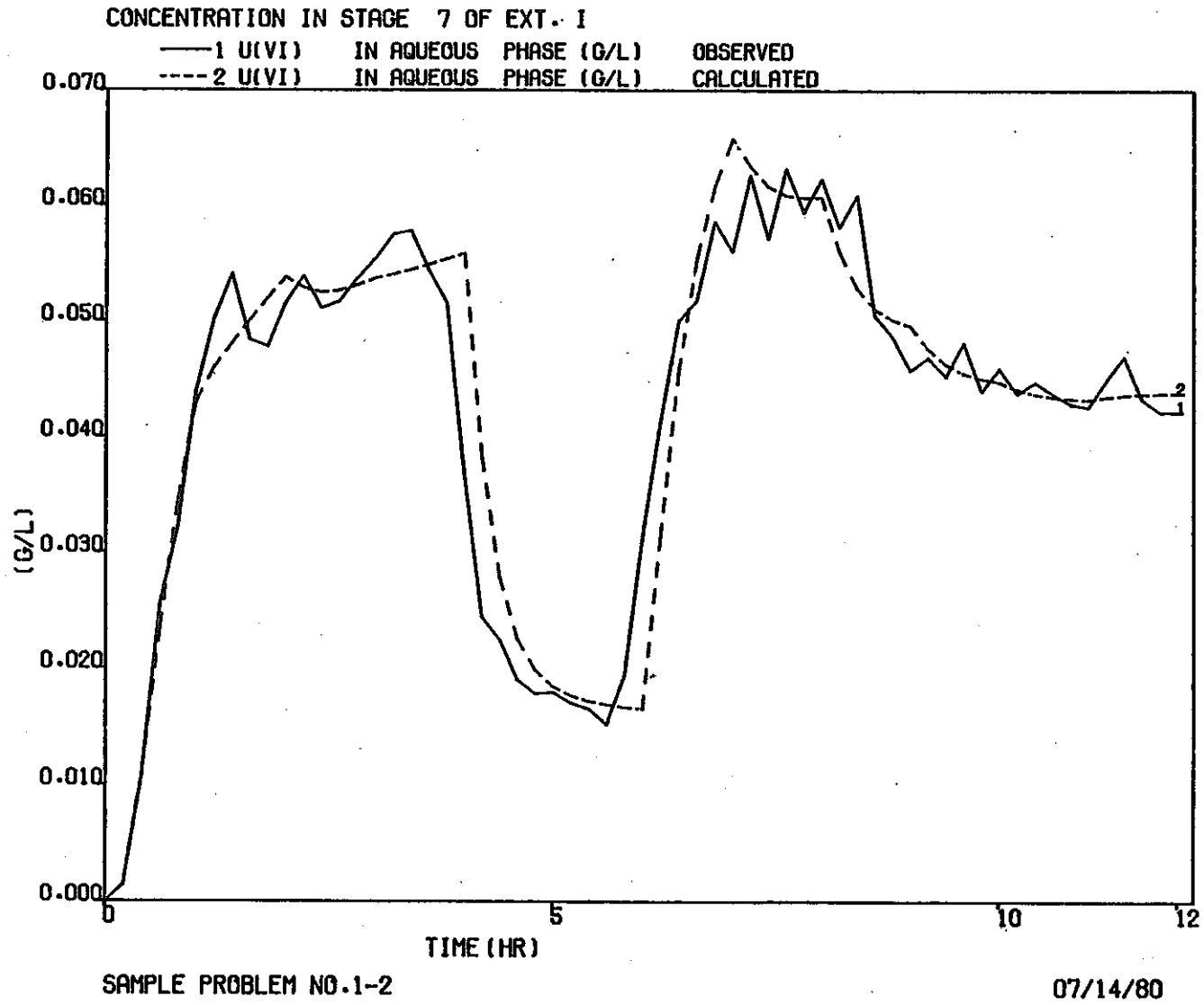
濃度はセトラ-水相の成分濃度である



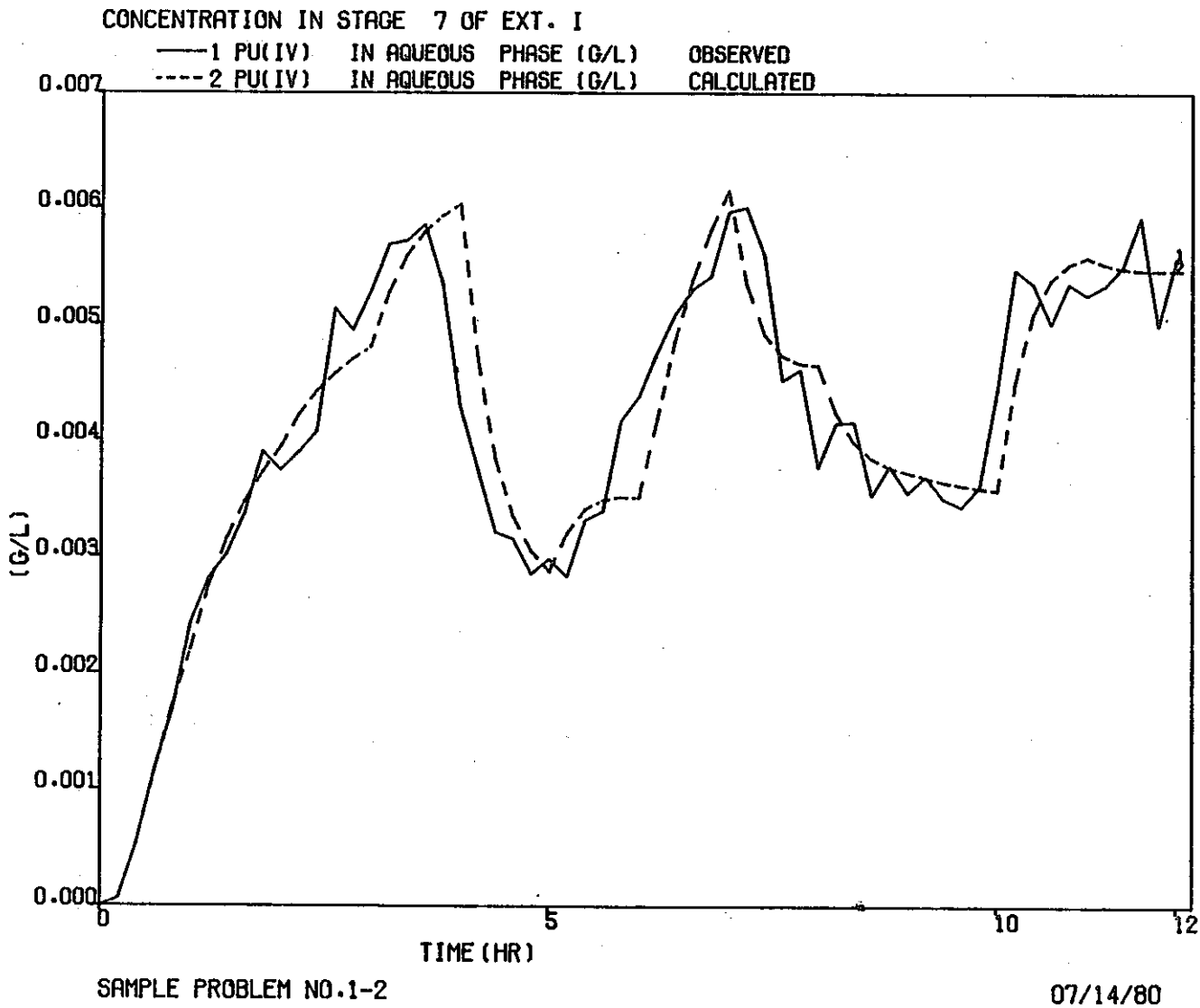
付図 3.10 EXT. I, 第 1 段水相の酸の濃度変化



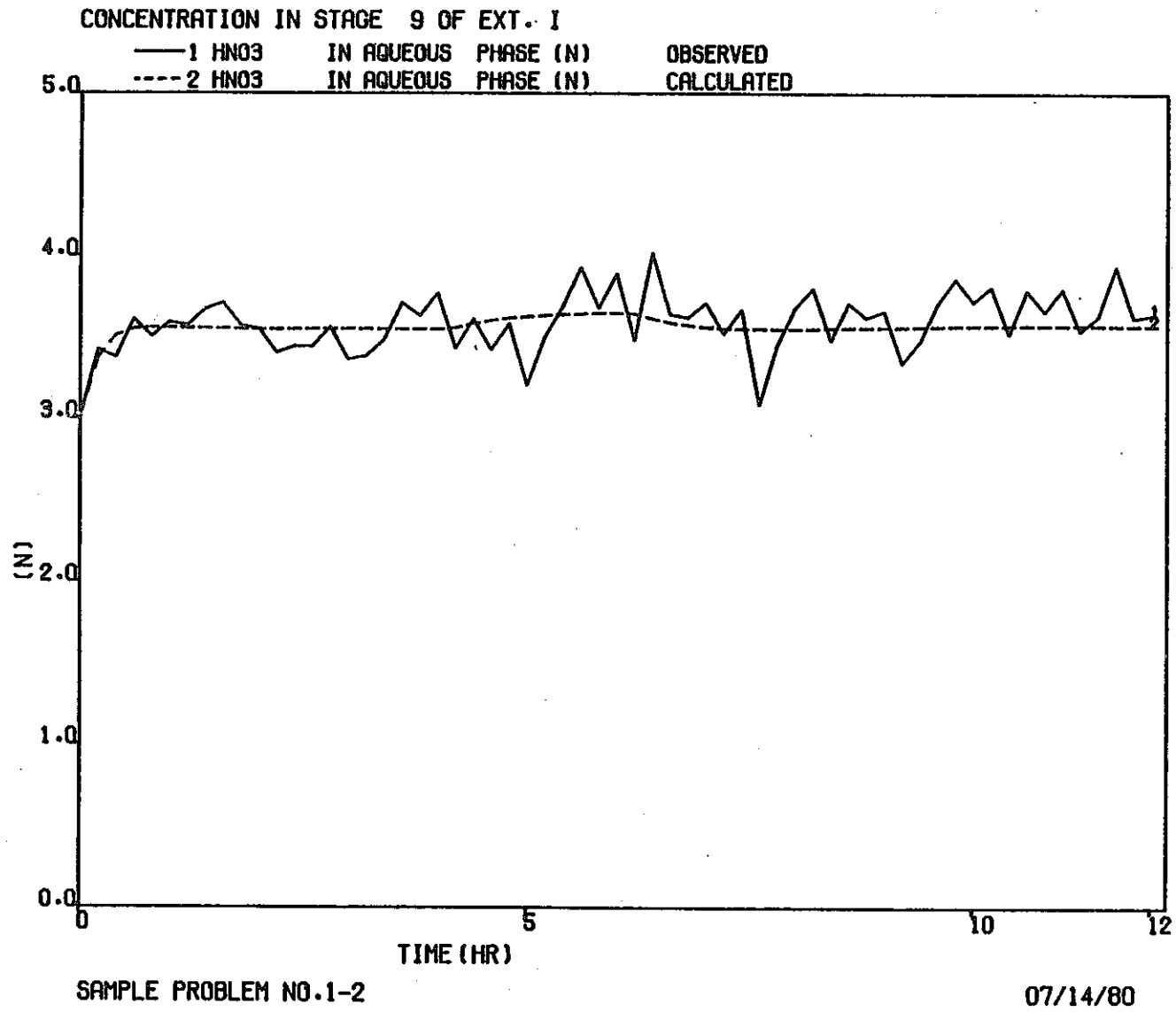
付図 3.11 EXT. I, 第 7 段水相の酸の濃度変化



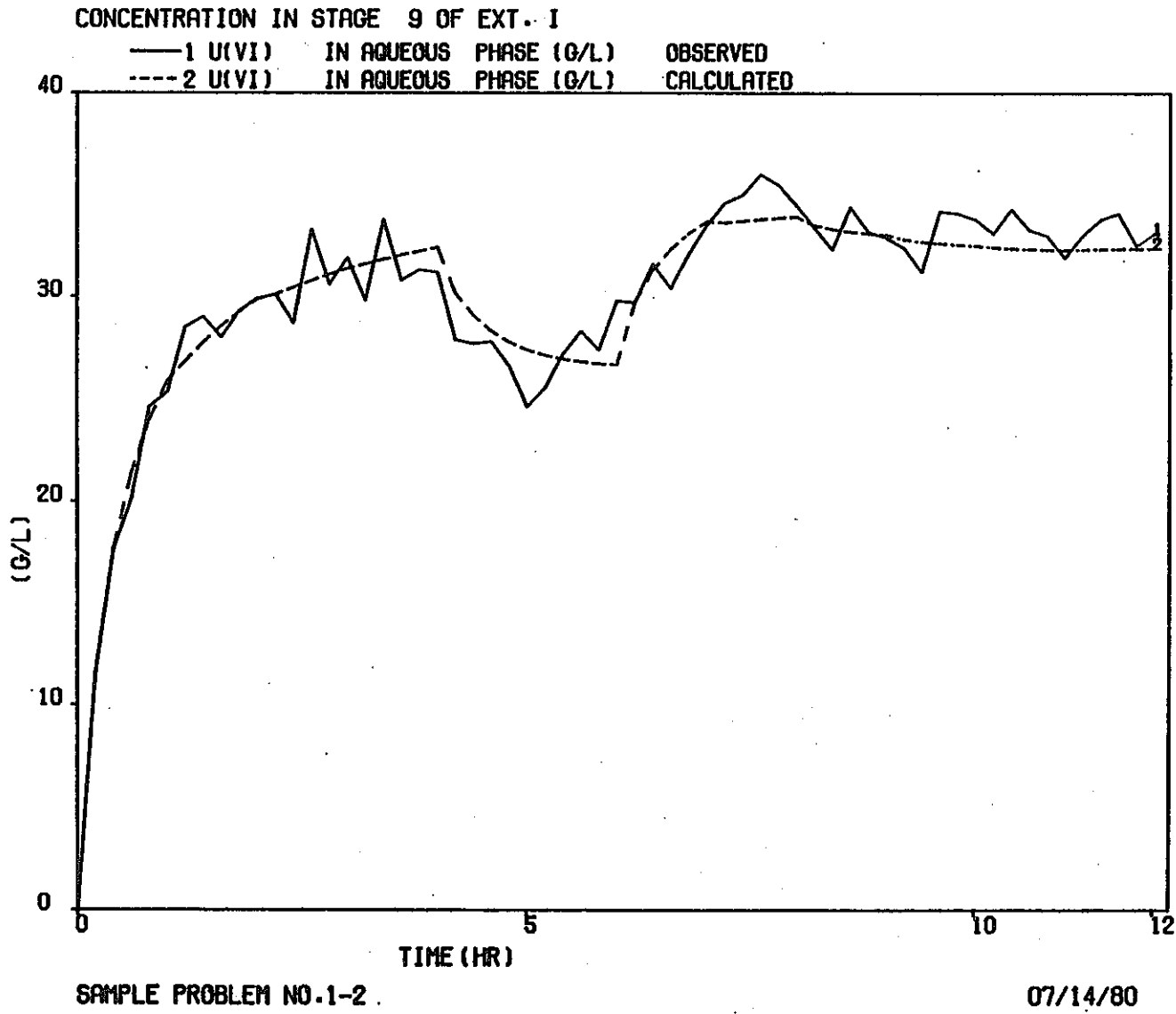
付図 3.12 EXT. I, 第 7 段水相の U の濃度変化



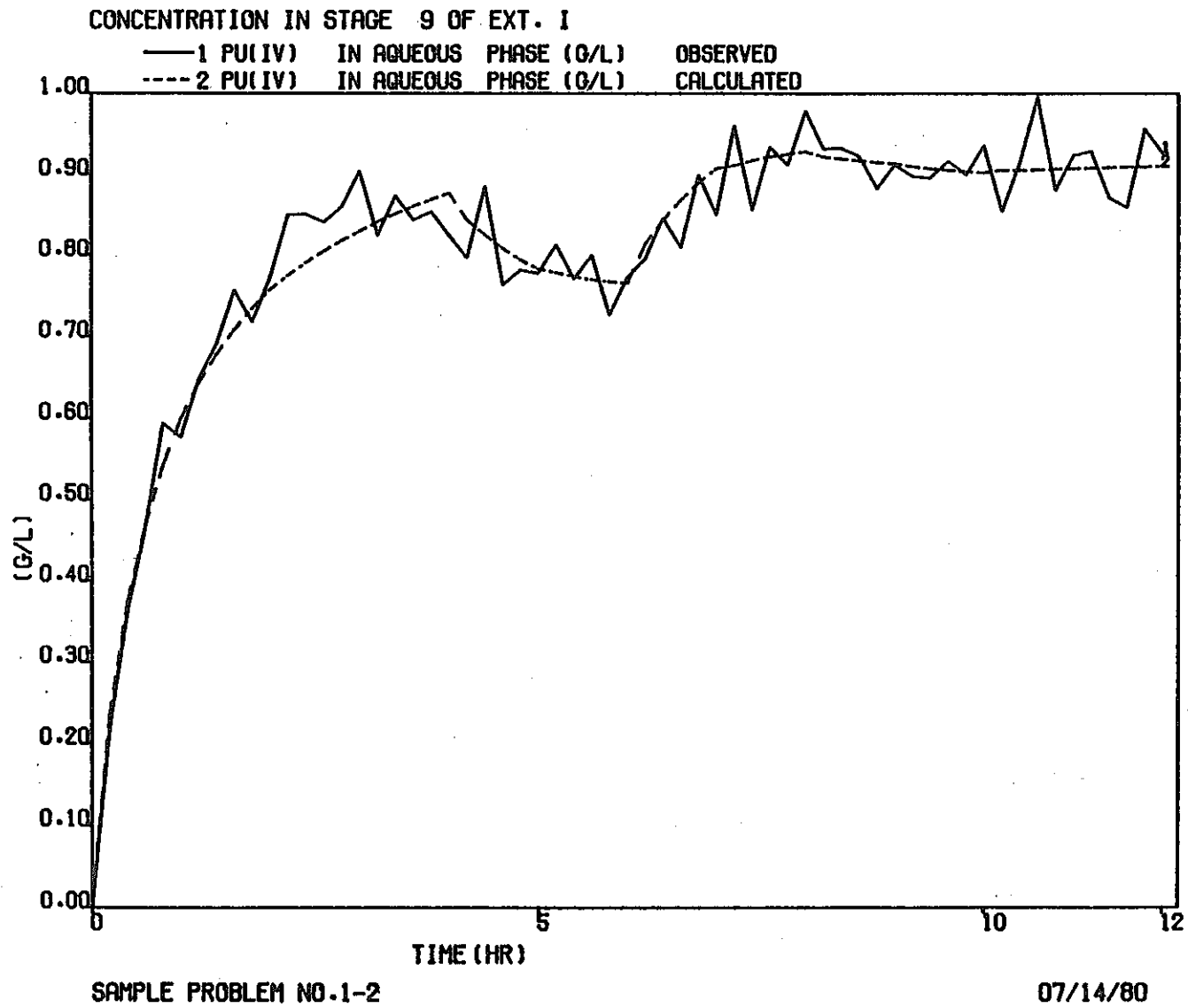
付図 3.13 EXT. I, 第 7 段水相の Pu の濃度変化



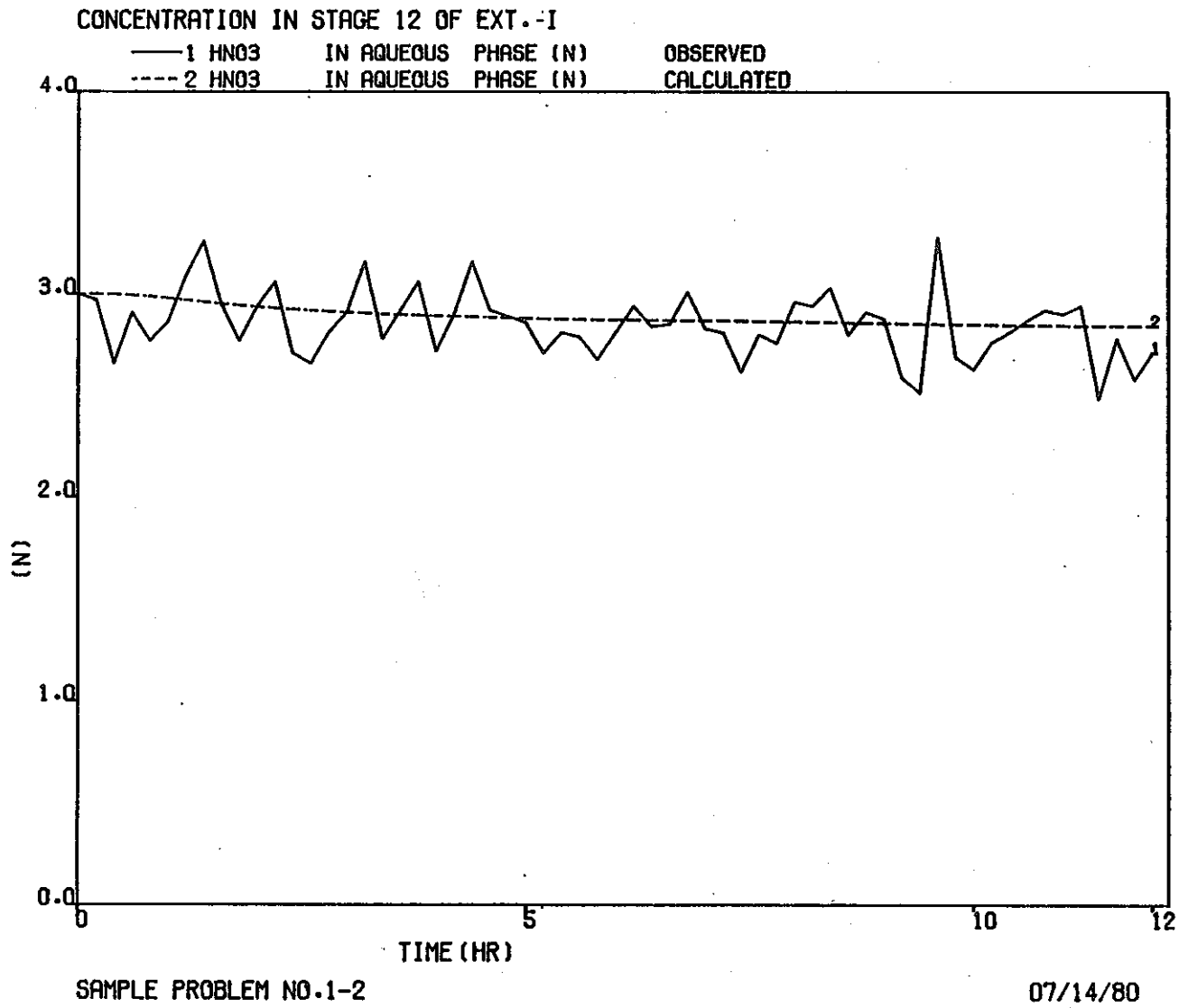
付図 3.14 EXT. I, 第 9 段水相の酸の濃度変化



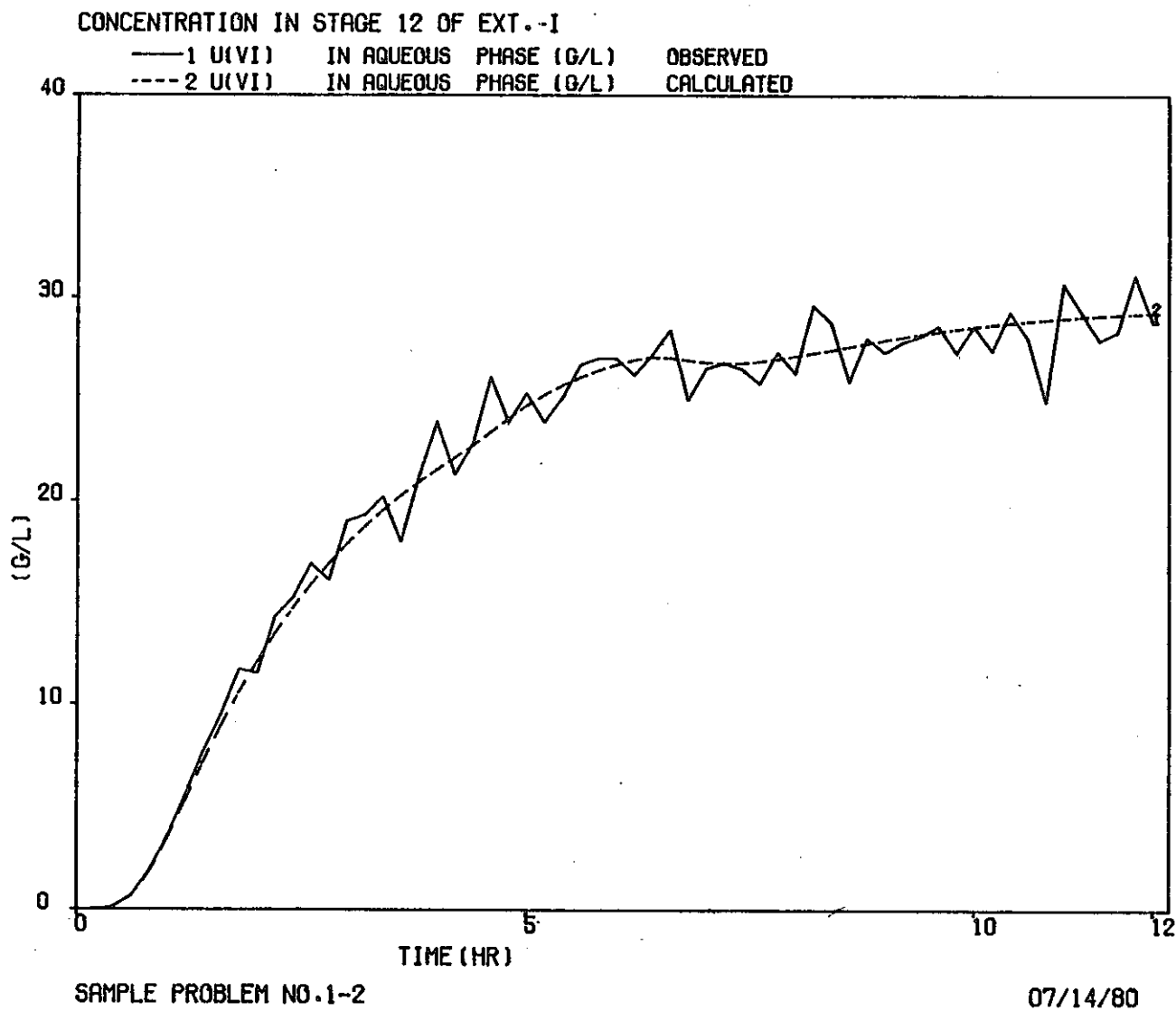
付図 3.15 EXT. I, 第 9 段水相の U の濃度変化



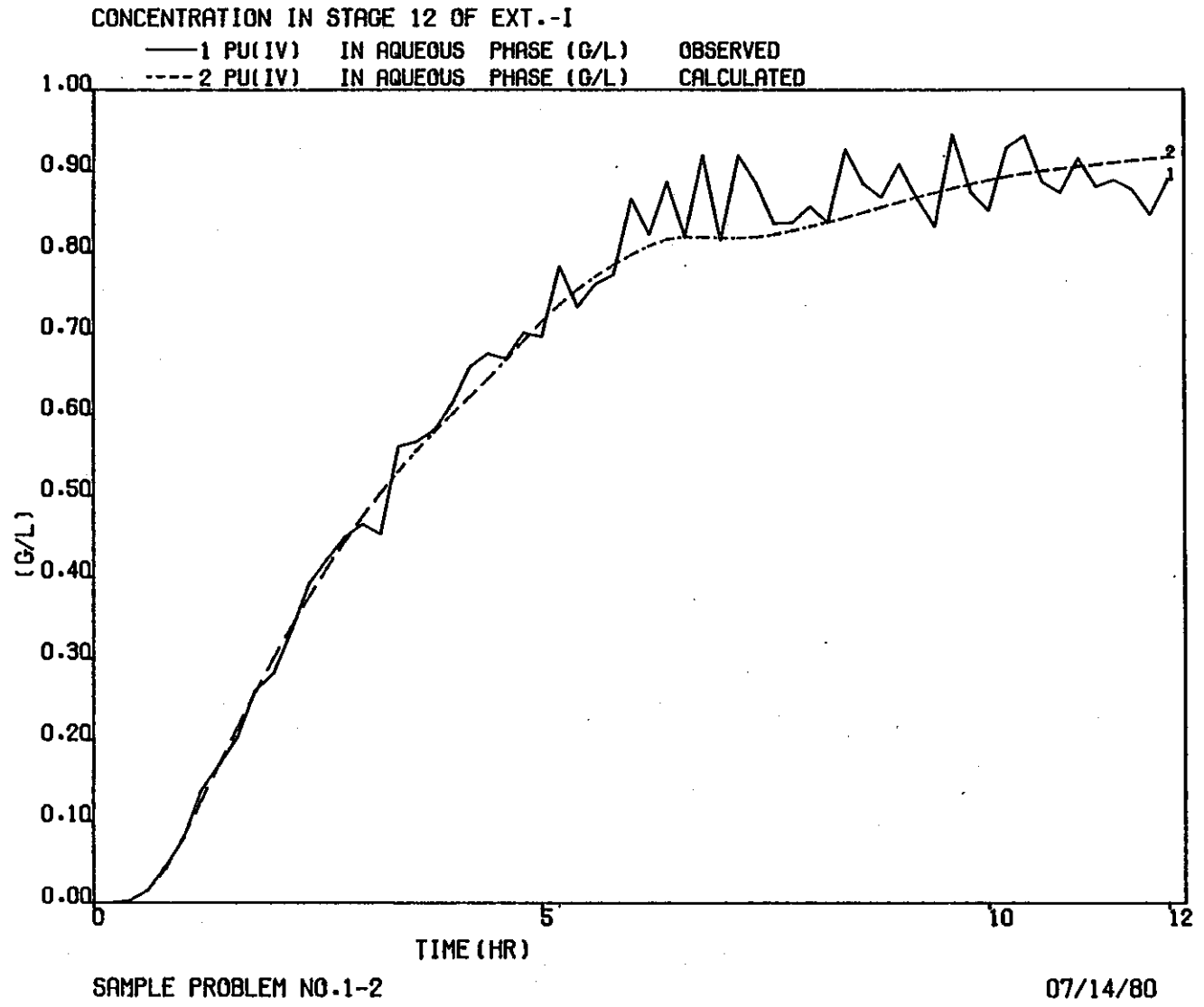
付図 3.16 EXT. I, 第 9 段水相の Pu の濃度変化



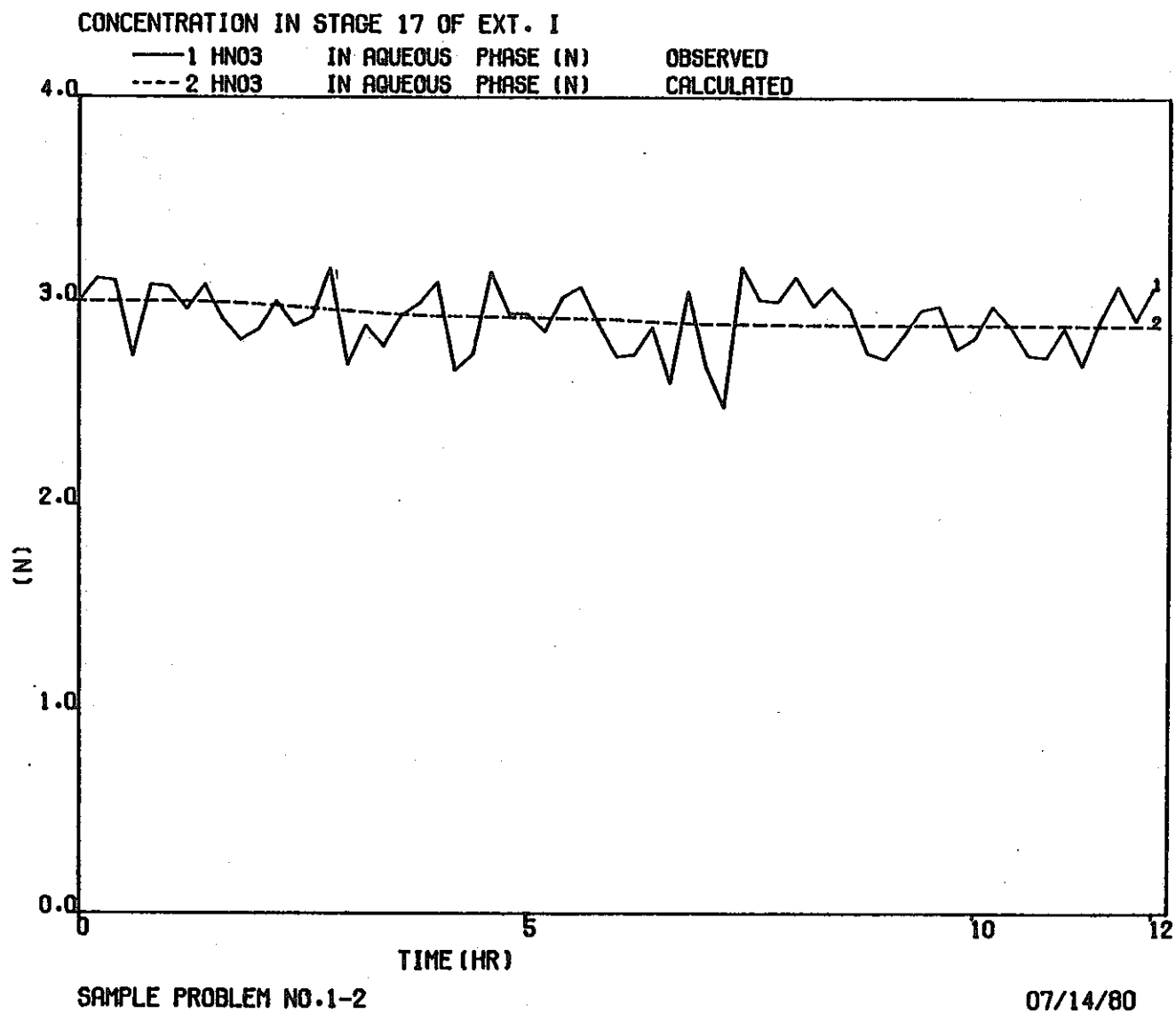
付図 3.17 EXT. I, 第12段水相の酸の濃度変化



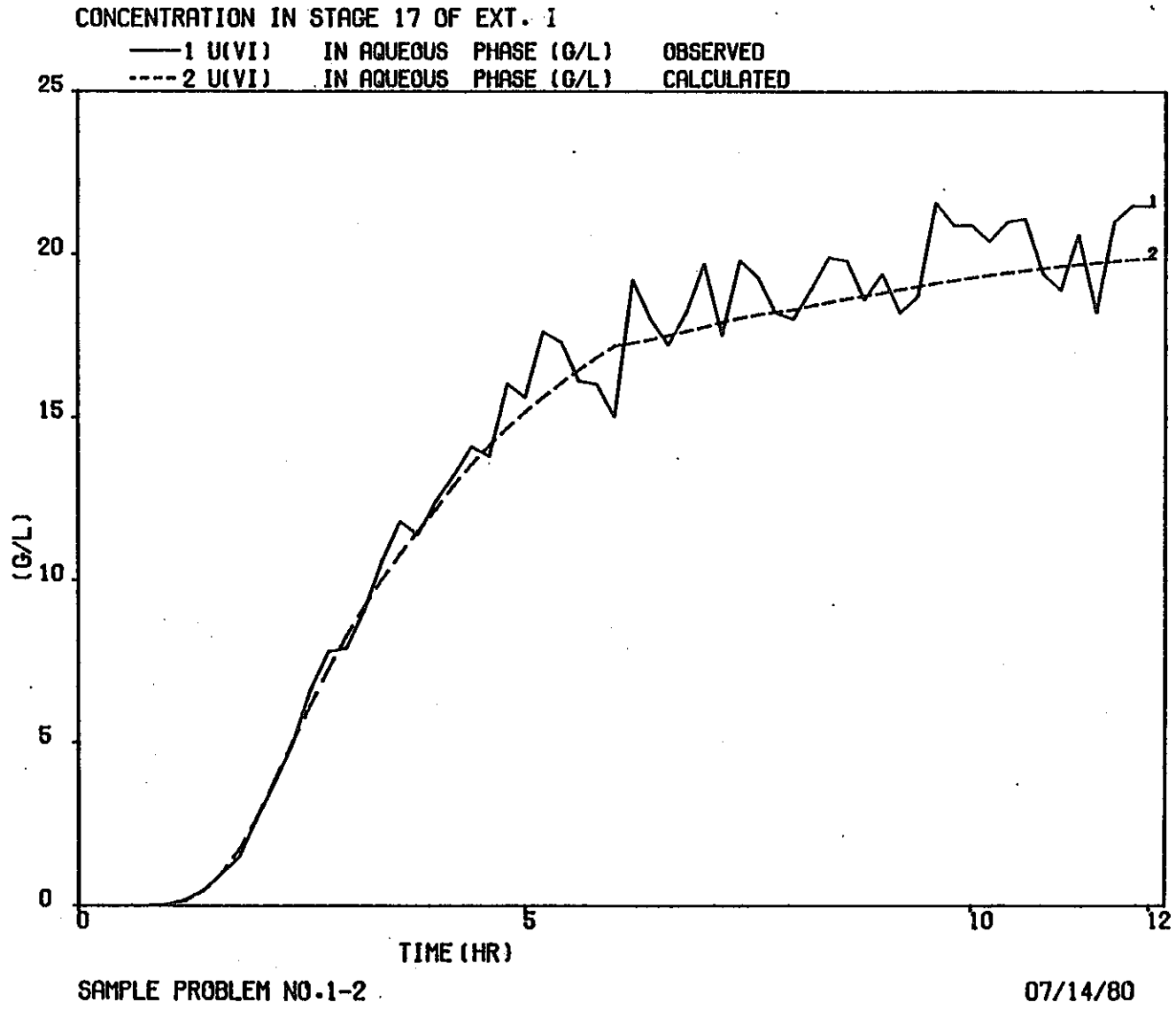
付図 3.18 EXT. I, 第12段水相のUの濃度変化



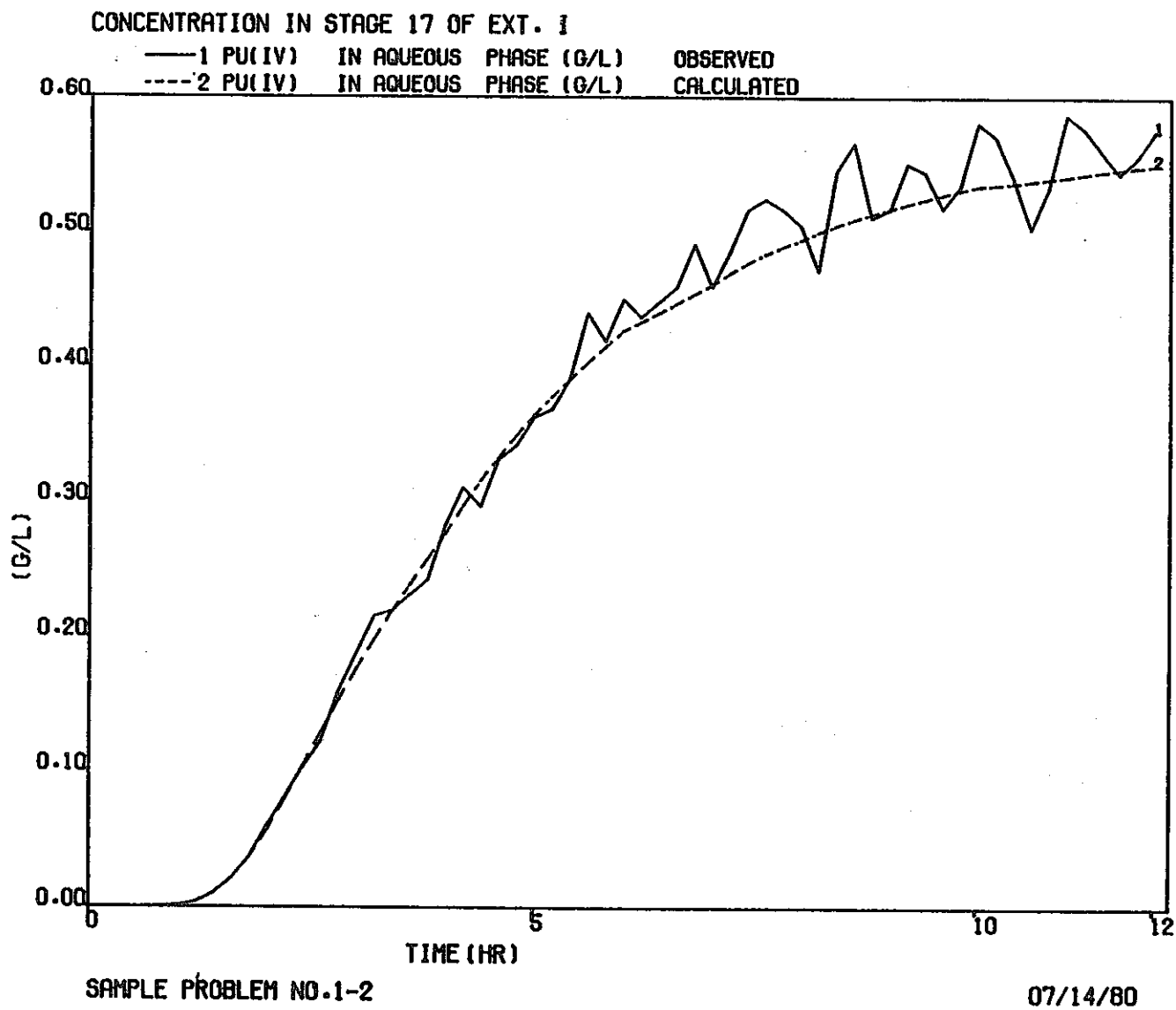
付図 3.19 EXT. I, 第12段水相のPuの濃度変化



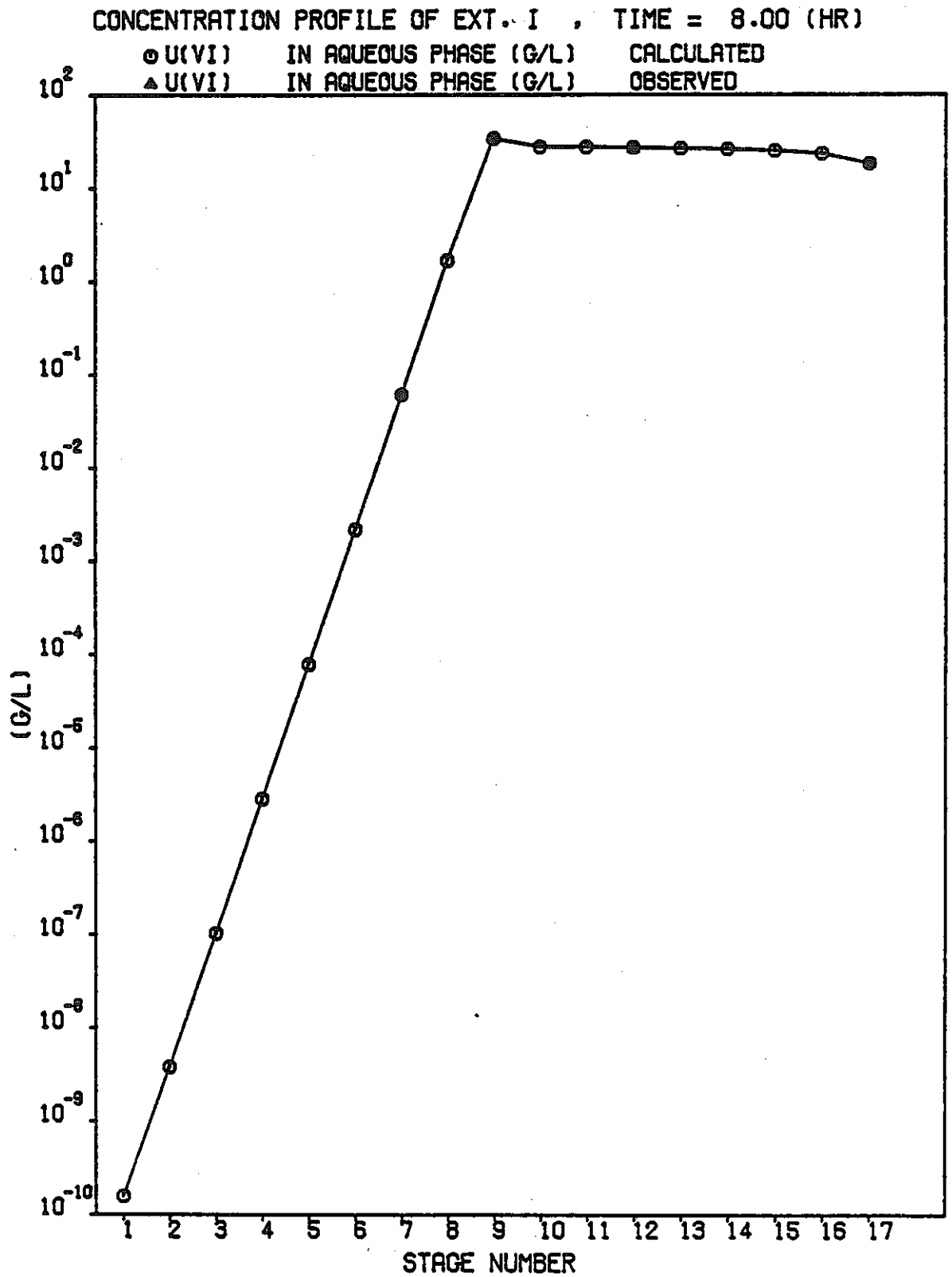
付図 3.20 EXT. I, 第17段水相の酸の濃度変化



付図 3.21 EXT. I, 第17段水相のUの濃度変化



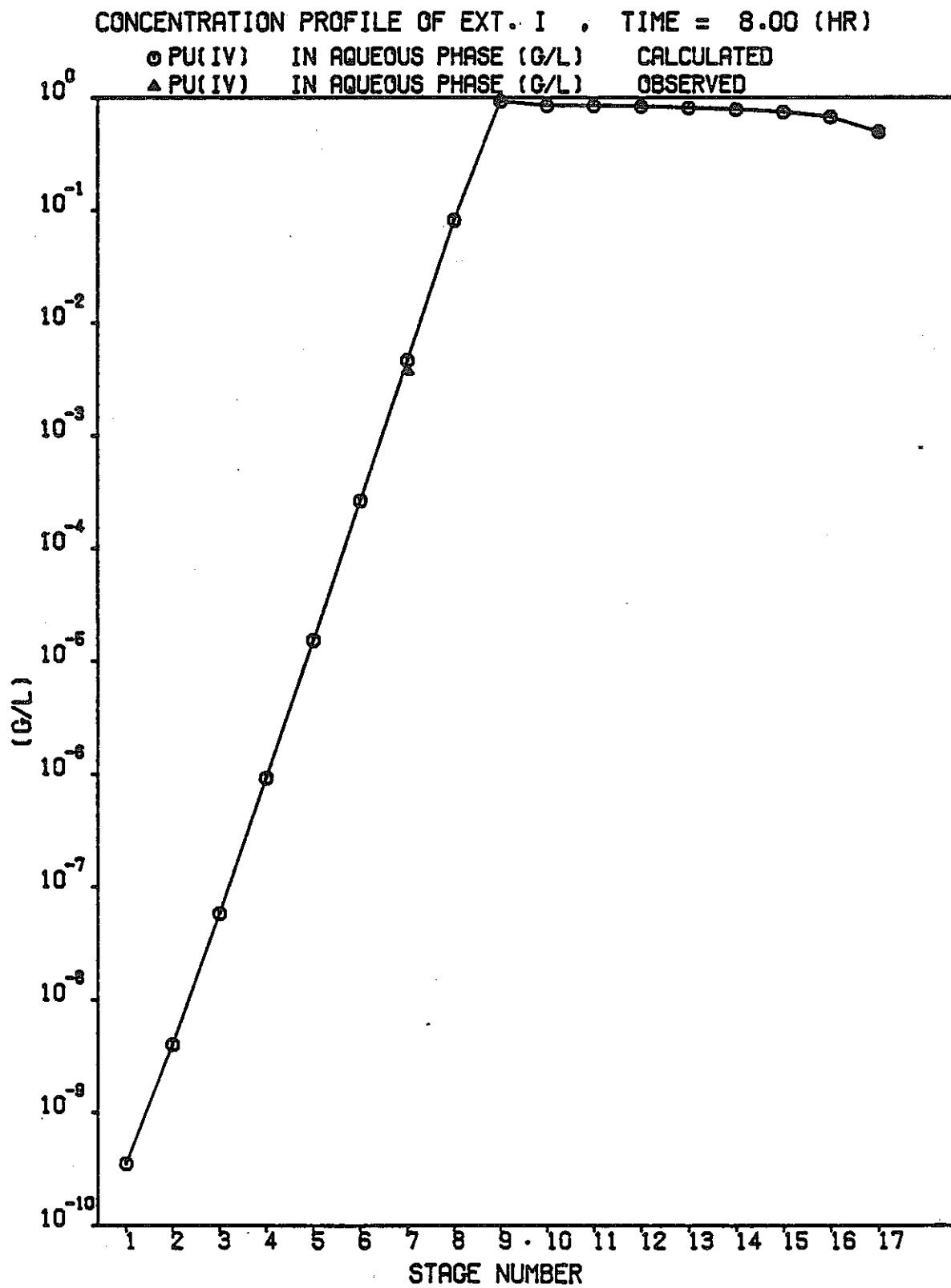
付図 3.22 EXT. I, 第17段水相のPuの濃度変化



SAMPLE PROBLEM NO.1-2

07/14/80

付図 3.23 EXT. I 水相における U の濃度分布



SAMPLE PROBLEM NO.1-2

07/14/80

付図 3.24 EXT. I,水相における Pu の濃度分布

付表 3.2 計算例 1.2 の T=8Hr における信頼区間および濃度計算値

段	90% 信頼区間巾 [%]			濃 度 計 算 値		
	H ⁺	U	Pu	H ⁺ [N]	U [g/L]	Pu [g/L]
1	5.4	29.0	31.8	2.72	1.58 × 10 ⁻¹⁰	3.53 × 10 ⁻¹⁰
2	12.3	29.4	34.3	3.56	3.81 × 10 ⁻⁹	4.00 × 10 ⁻⁹
3	6.4	27.8	32.6	3.78	1.03 × 10 ⁻⁷	5.82 × 10 ⁻⁸
4	3.2	25.9	30.6	3.84	2.84 × 10 ⁻⁶	9.21 × 10 ⁻⁷
5	2.6	23.1	26.6	3.84	7.84 × 10 ⁻⁵	1.53 × 10 ⁻⁵
6	2.7	19.3	20.6	3.84	2.18 × 10 ⁻³	2.63 × 10 ⁻⁴
7	2.7	14.5	13.4	3.83	6.07 × 10 ⁻²	4.65 × 10 ⁻³
8	2.2	9.0	6.5	3.81	1.67	8.12 × 10 ⁻²
9	1.6	2.6	2.2	3.55	3.39 × 10	9.28 × 10 ⁻¹
10	6.0	2.5	4.0	2.93	2.76 × 10	8.48 × 10 ⁻¹
11	1.5	0.6	0.6	2.88	2.75 × 10	8.46 × 10 ⁻¹
12	0.4	0.4	0.5	2.86	2.71 × 10	8.31 × 10 ⁻¹
13	0.2	0.3	0.3	2.86	2.66 × 10	8.10 × 10 ⁻¹
14	0.2	0.1	0.1	2.86	2.60 × 10	7.83 × 10 ⁻¹
15	0.5	0.2	0.3	2.86	2.51 × 10	7.44 × 10 ⁻¹
16	1.0	0.6	0.8	2.86	2.33 × 10	6.71 × 10 ⁻¹
17	1.6	1.0	1.2	2.89	1.83 × 10	4.94 × 10 ⁻¹

$$90\% \text{ 信頼区間巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100$$

濃度はセトラ-水相の成分濃度である

計算例2 第1抽出器のスタートアップ(2)

1. 計算目的

段効率をフィティング計算のパラメータとし、段効率は抽出段の段効率と洗浄段の段効率の2つに分けて設定する。

下記の2つのケースについて計算し、濃度計算値の信頼区間を比較する。

計算例2.1 第7, 12段のセトラ部水相の酸, ウランおよびプルトニウム濃度を測定する。

計算例2.2 第1段のセトラ部水相の酸濃度および第7, 9, 12, 17段のセトラ部水相の酸, ウラン, プルトニウム濃度を測定する。

2. 計算条件

2.1 供給液条件

計算例1と同じである。

2.2 界面位置

計算例1と同じである。

2.3 濃度測定値

濃度測定点となるセトラ部水相の成分濃度を12分間隔で測定する。計算例2.1の第7, 12段の成分濃度測定値のうち、ウランおよびプルトニウム濃度を付図3.25～3.28に示す。また、計算例2.2の成分濃度測定値のうちのウランおよびプルトニウム濃度を付図3.29～3.36に示す。

3. 計算結果

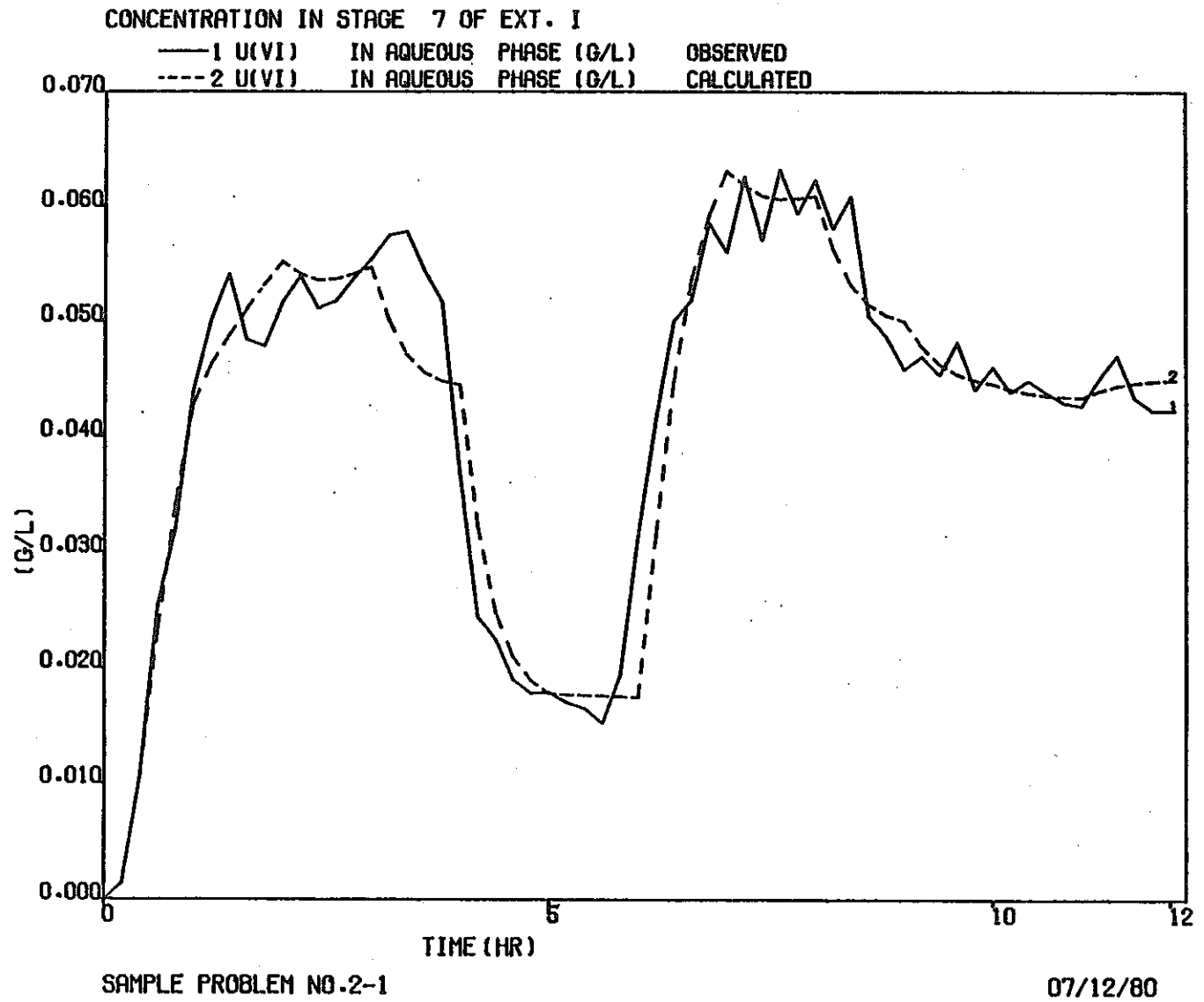
3.1 計算例2.1

付図3.25～3.28に第7, 12段の成分濃度のうちウランおよびプルトニウム濃度測定値を実線で示し、これに対する計算値を点線で示す。

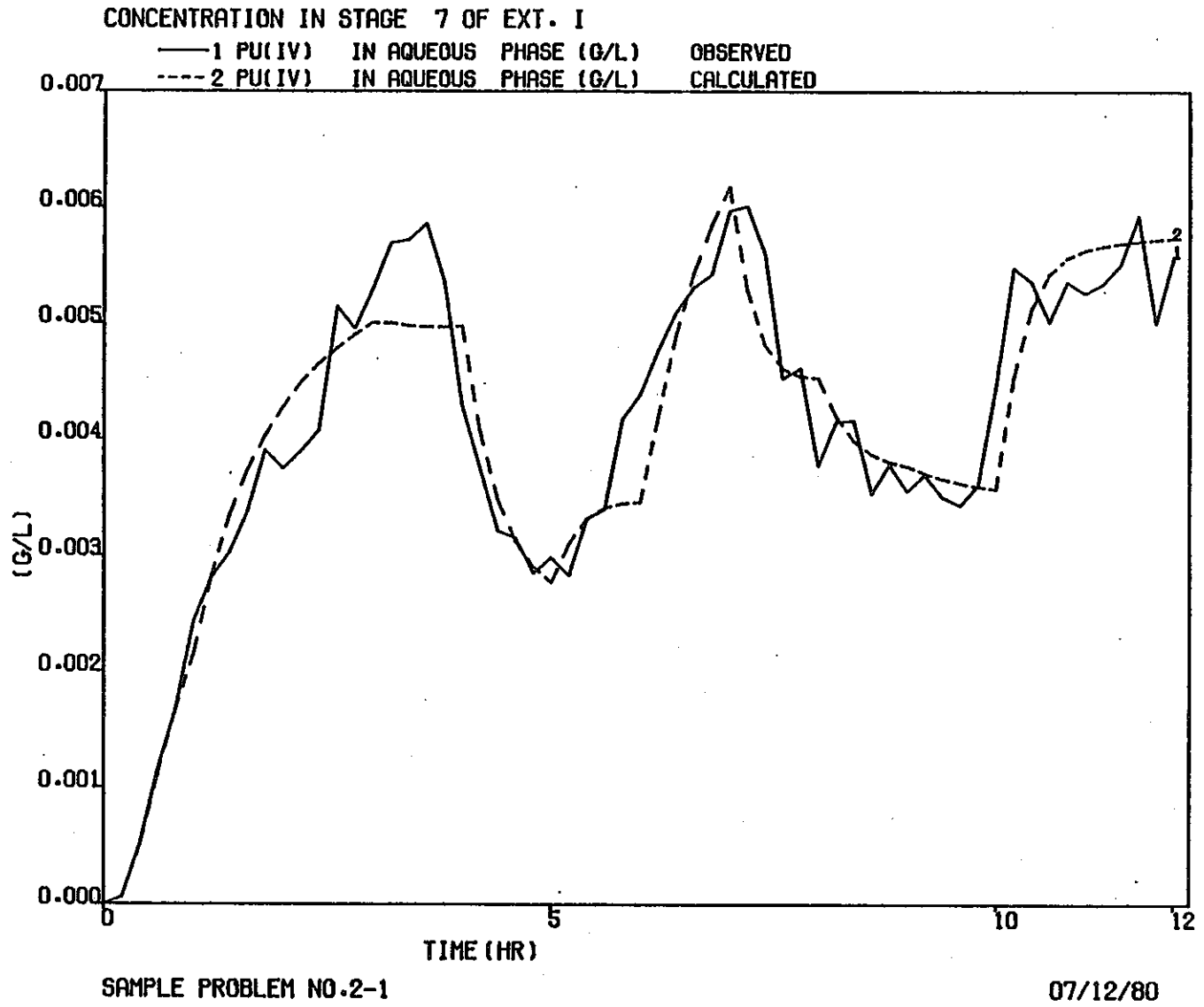
付表3.3に、 $T=8\text{Hr}$ における水相のウランおよびプルトニウム濃度の90%信頼区間中を示す。

3.2 計算例2.2

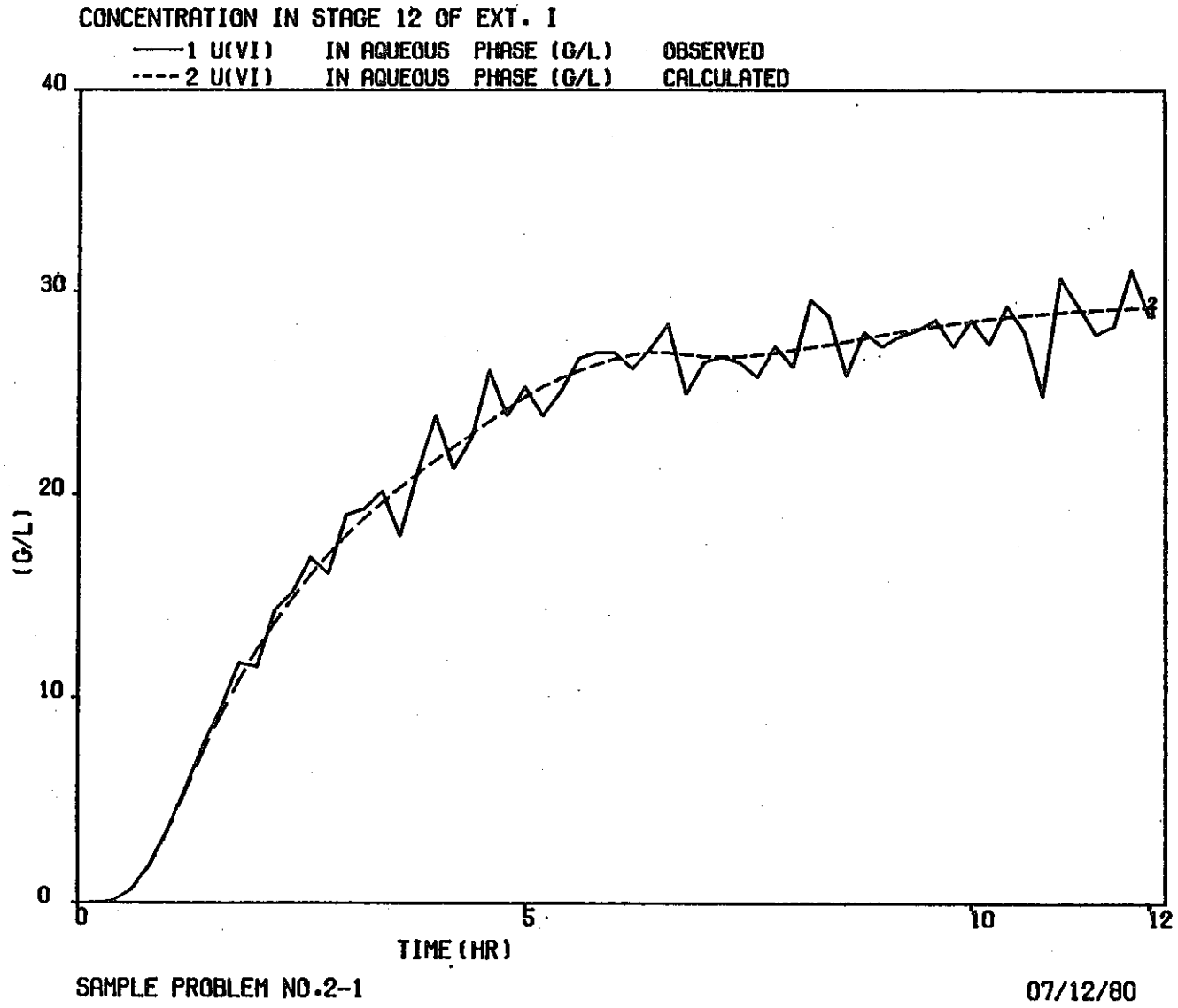
付図3.29～3.36に第1, 7, 9, 12, 17段の成分濃度のうちウランおよびプルトニウム濃度測定値を実線で示し、これに対する計算値を点線で示す。付図3.36, 3.37に $T=8\text{Hr}$ におけるセトラ部水相のウランおよびプルトニウムの濃度分布を示す。付表3.3に、 $T=8\text{Hr}$ における水相のウランおよびプルトニウム濃度の90%信頼区間中を示す。



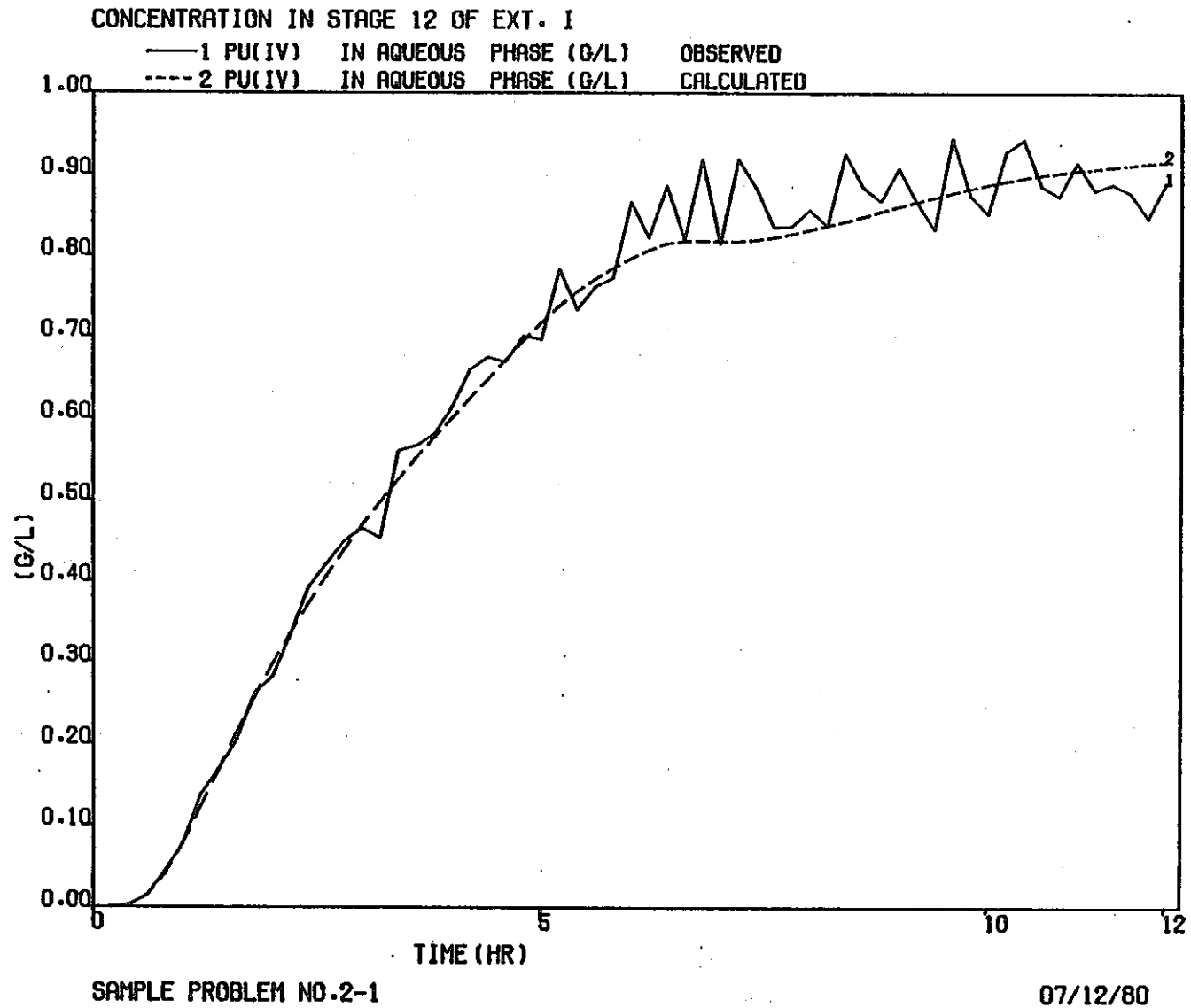
付図 3.25 EXT. I, 第 7 段水相の U の濃度変化



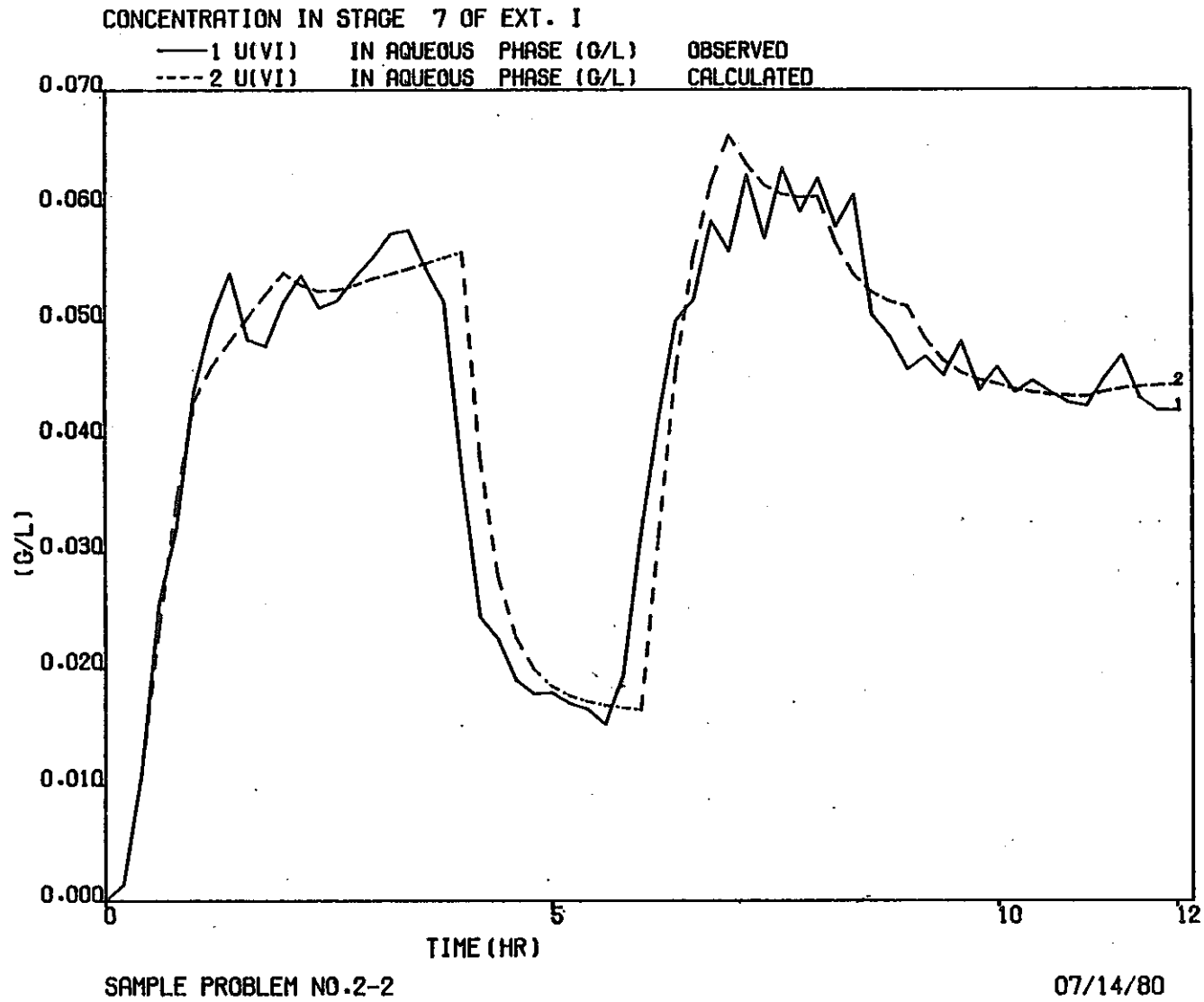
付図 3.26 EXT. I, 第 7 段水相の Pu の濃度変化



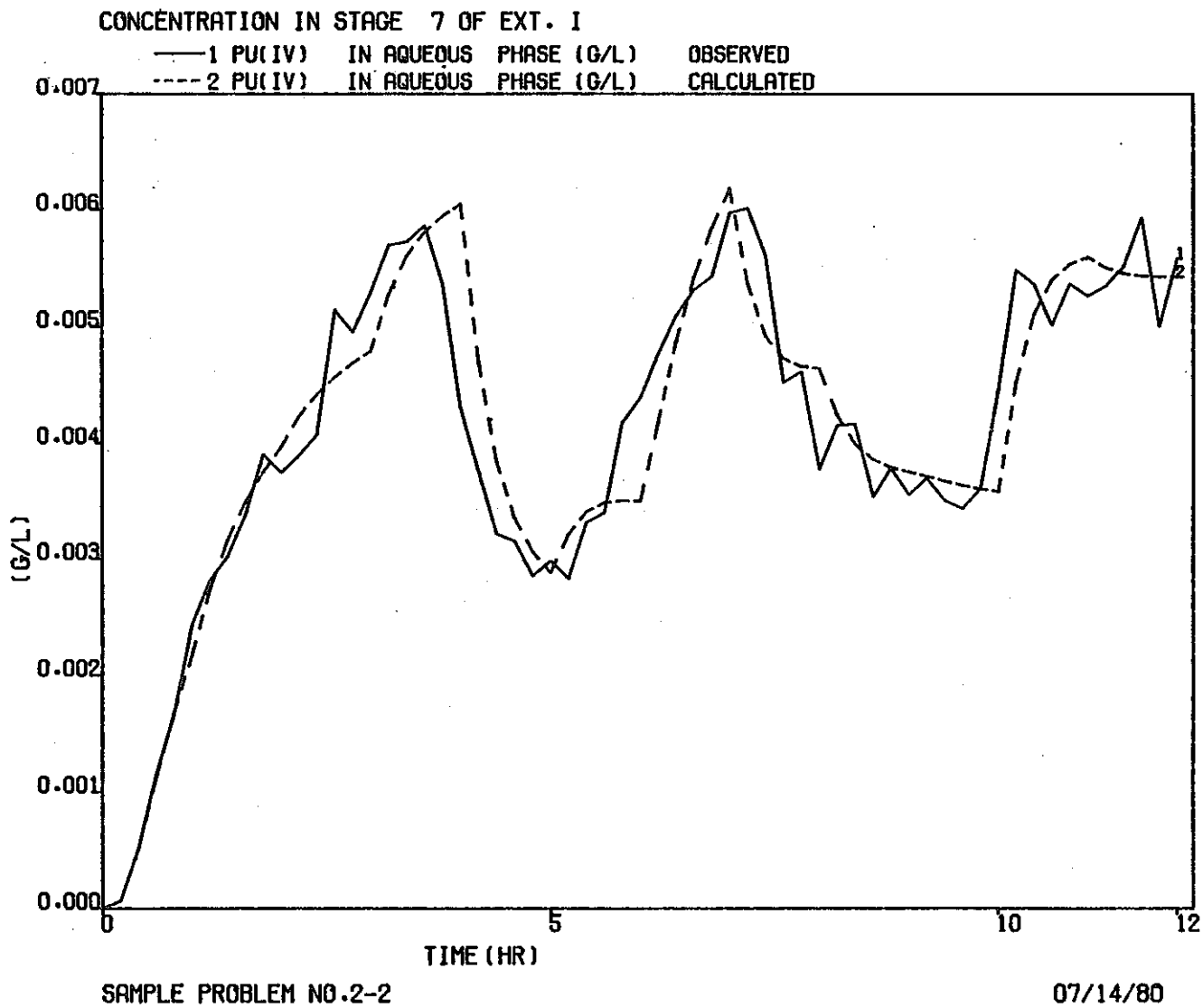
付図 3.27 EXT. I, 第12段水相のUの濃度変化



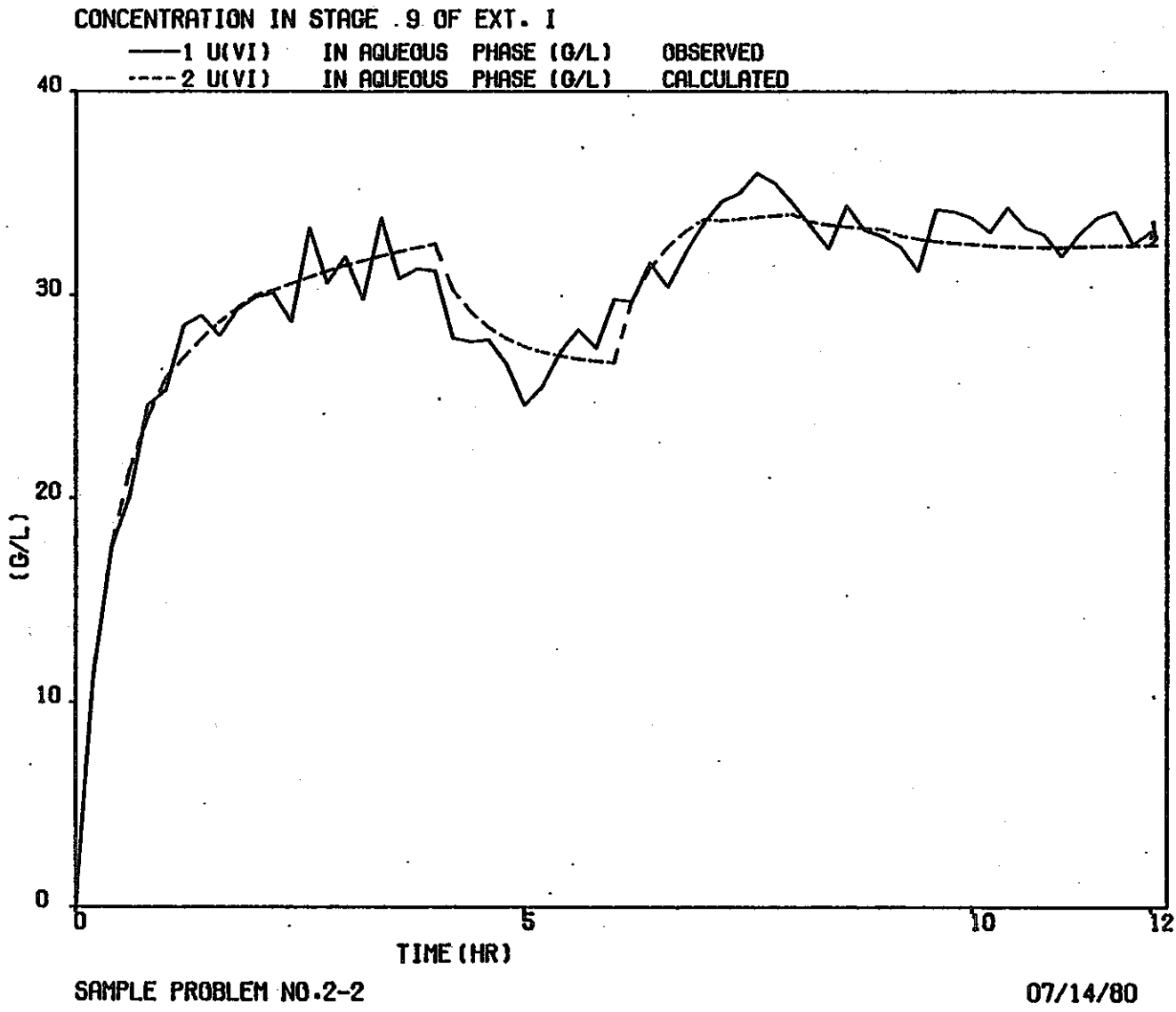
付図 3.28 EXT. I, 第12段水相のPuの濃度変化



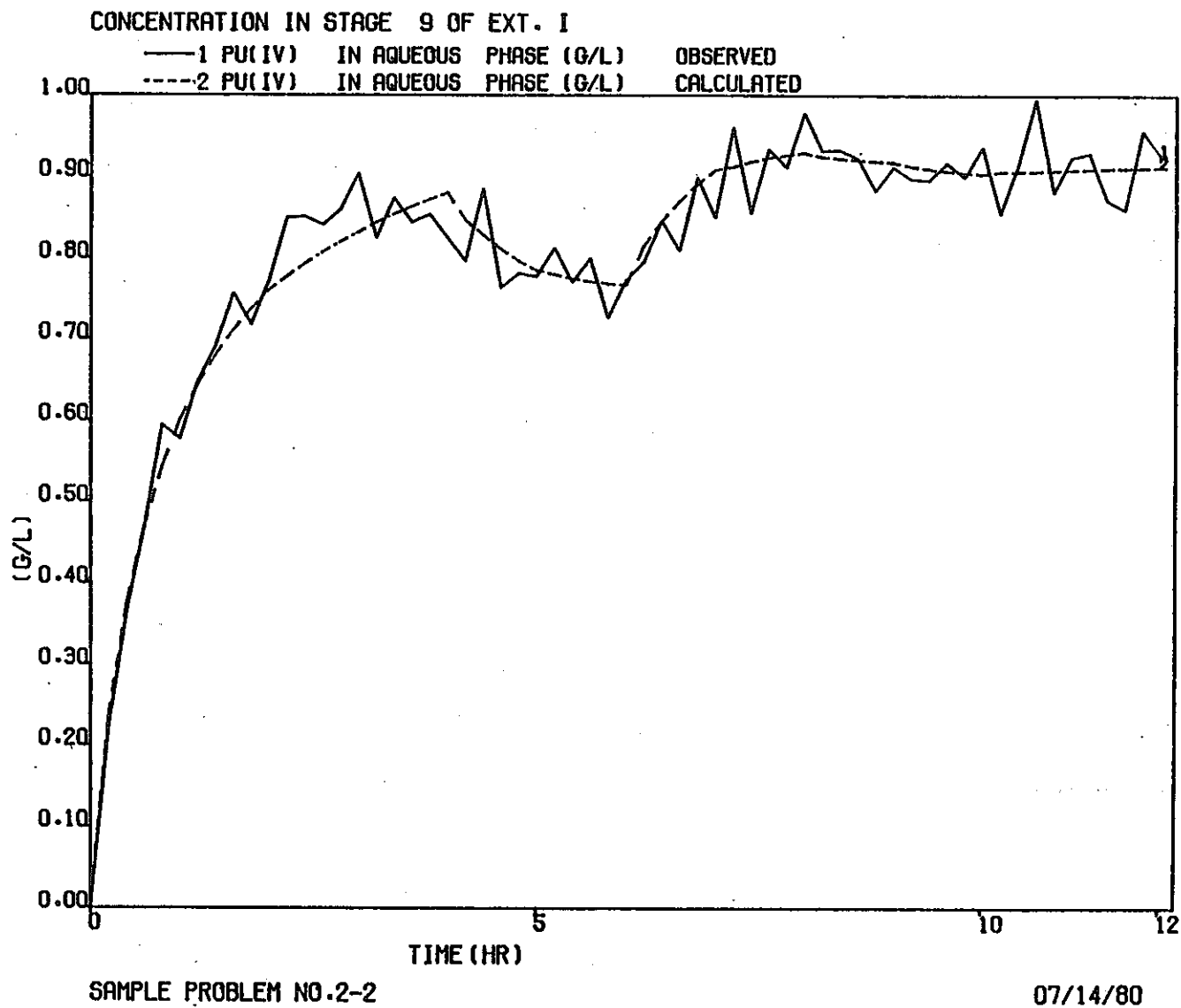
付図 3.29 EXT. I, 第 7 段水相の U の濃度変化



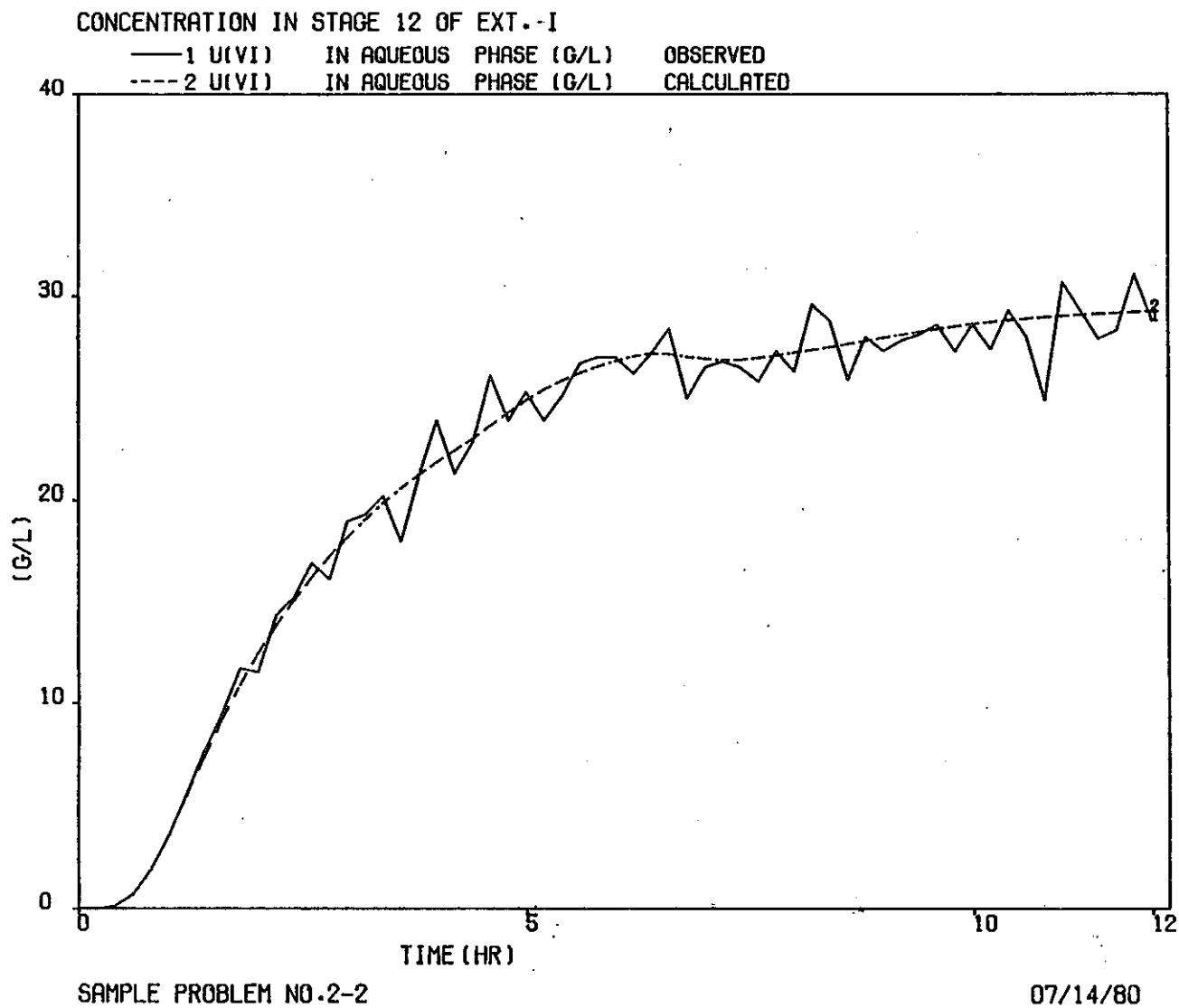
付図 3.30 EXT. I, 第 7 段水相の Pu の濃度変化



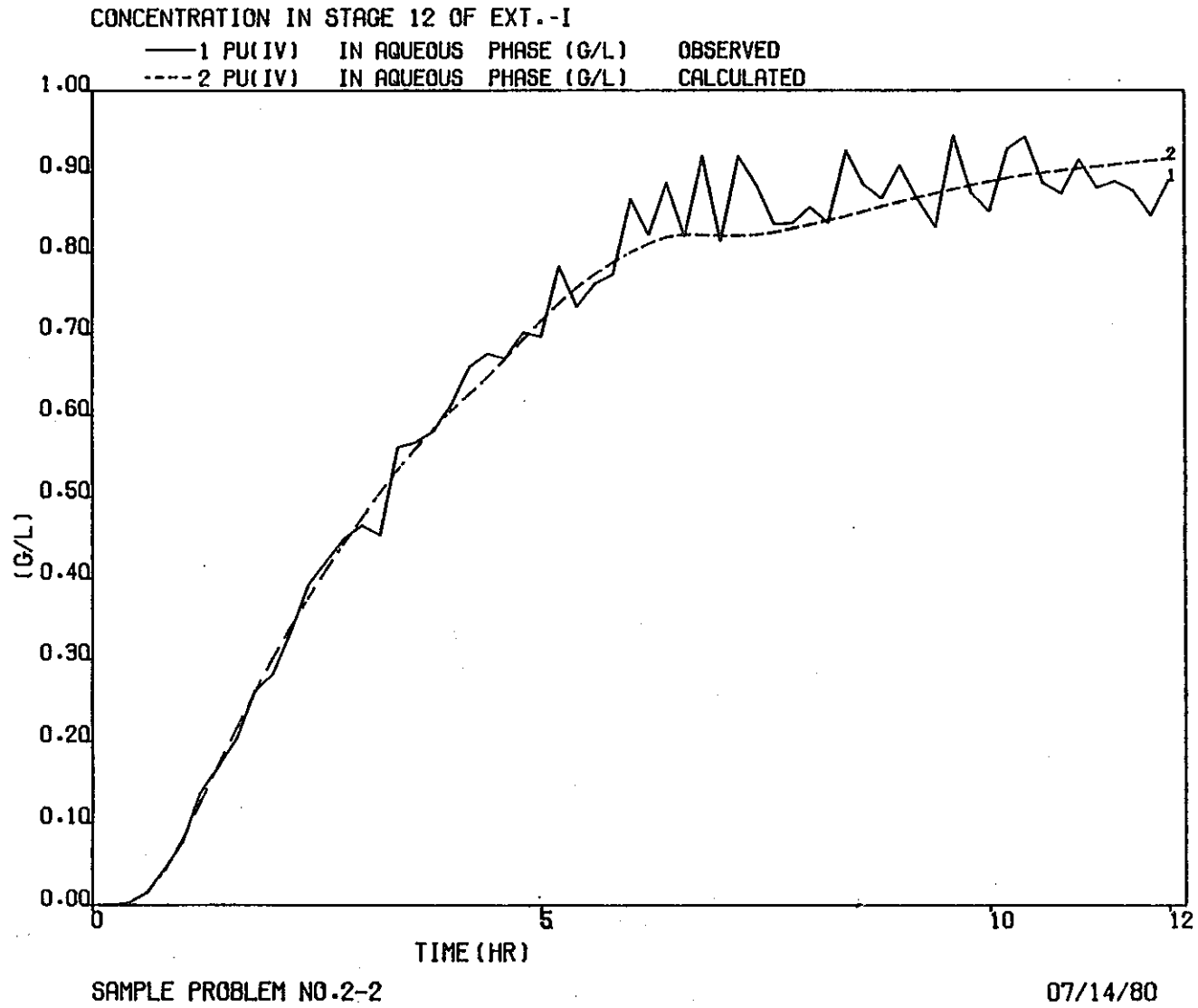
付図 3.31 EXT. I, 第9段水相のUの濃度変化



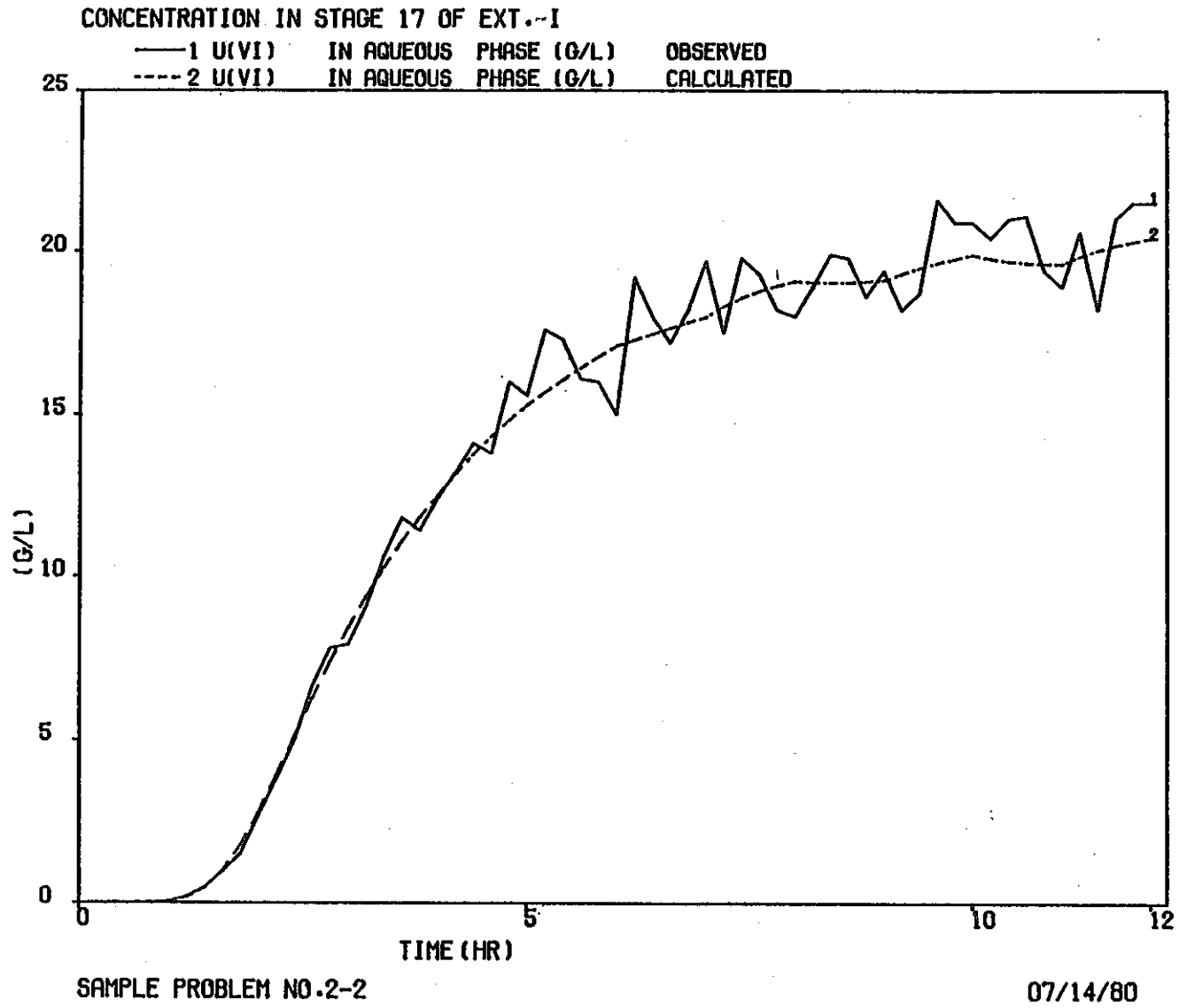
付図 3.32 EXT. I, 第 9 段水相の Pu の濃度変化



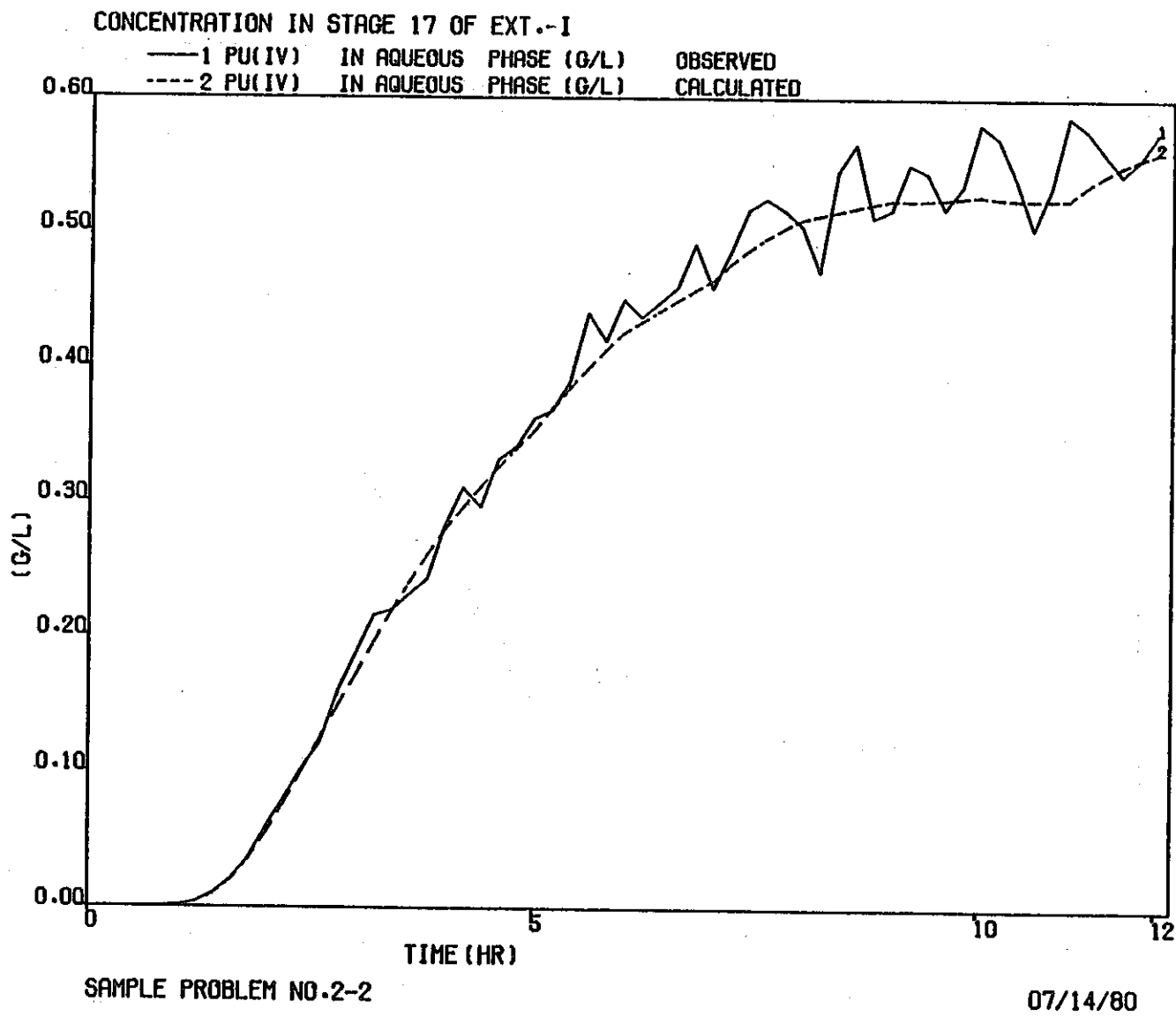
付図 3.33 EXT. I, 第12段水相のUの濃度変化



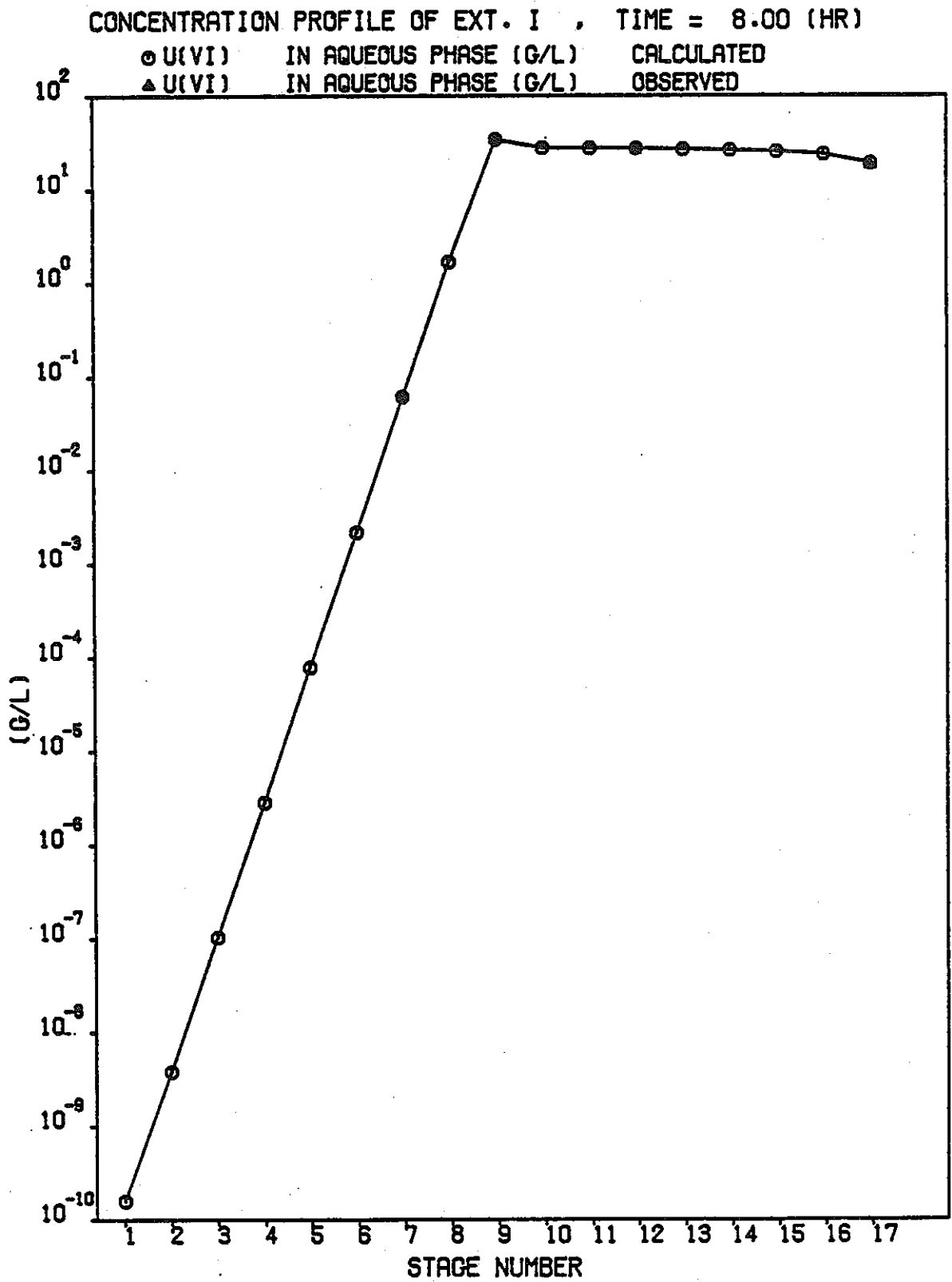
付図 3.34 EXT. I, 第12段水相のPuの濃度変化



付図 3.35 EXT. I, 第17段水相のUの濃度変化



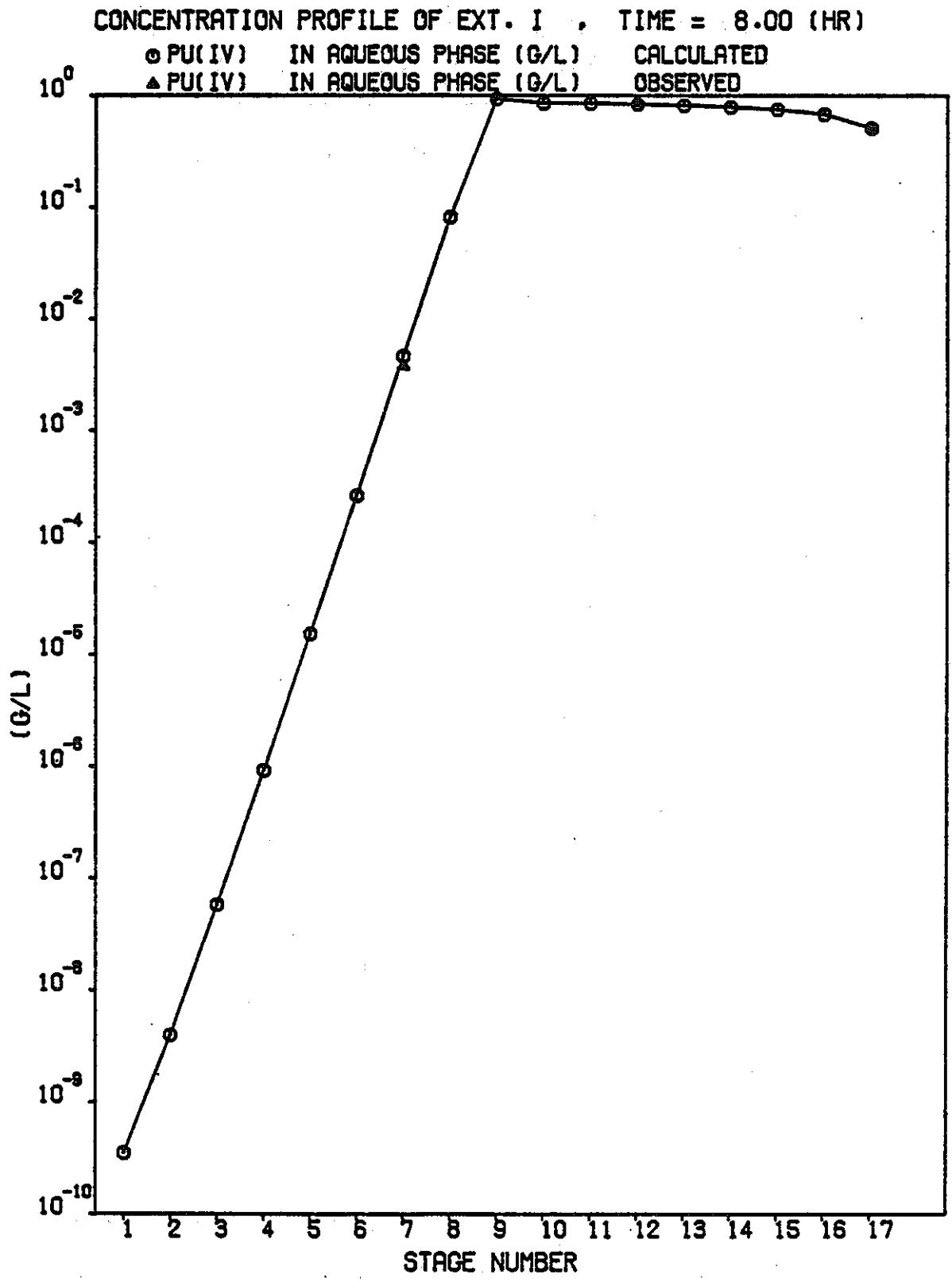
付図 3.36 EXT. I, 第17段水相のPuの濃度変化



SAMPLE PROBLEM NO.2-2

07/14/80

付図 3.37 EXT. I 水相における U の濃度分布



SAMPLE PROBLEM NO.2-2

07/14/80

付図 3.38 EXT. I 水相における Pu の濃度分布

付表 3.3 計算例 2.1 および 2.2 の 90%信頼区間巾〔%〕

段	計 算 例 2. 1			計 算 例 2. 2		
	H ⁺	U	Pu	H ⁺	U	Pu
1	30.6	35.2	41.1	5.4	28.8	31.6
2	73.0	48.5	73.7	12.5	29.3	34.2
3	35.8	34.8	41.6	6.3	27.6	32.5
4	17.4	31.2	38.2	3.1	25.7	30.4
5	14.2	27.6	32.0	2.5	23.0	26.4
6	15.1	22.8	24.1	2.7	19.2	20.5
7	15.4	17.4	17.1	2.7	14.4	13.4
8	13.3	12.6	15.8	2.3	8.9	6.6
9	14.5	7.2	14.5	2.0	2.6	2.5
10	58.4	35.1	50.8	7.9	3.7	5.7
11	27.3	21.7	21.4	3.2	1.7	2.6
12	20.9	20.9	20.4	2.2	1.0	1.6
13	17.5	26.9	28.3	1.6	0.7	1.4
14	26.9	40.9	42.1	2.2	0.9	1.9
15	63.7	79.6	73.0	4.8	2.0	3.6
16	145.8	220.6	176.3	10.5	4.8	8.1
17	224.9	730.7	571.5	16.2	13.1	21.9

$$90\% \text{ 信頼区間巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間の下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100$$

濃度はセトラ水相の成分濃度である

計算例3. 第1抽出器の界面変動

1. 計算目的

第1抽出器の界面が変動する場合に、界面位置をフィティング計算のパラメータとして計算する。

2. 計算条件

下記の運転データをもとに運転管理計算を行う。

2.1 供給液条件

付図3.1のフローシートによる。運転中の供給液条件は一定である。

2.2 界面位置

下記の3ケースの計算を行い、フィティングの状況を比較する。

計算例3.1 第9段の界面位置が変動し、それ以外の段では3個点灯している。

計算例3.2 第9, 13段の界面位置が変動し、それ以外の段では3個点灯している。

計算例3.3 第6, 9, 12段の界面位置が変動し、それ以外の段では3個点灯している。

各計算例の30分間隔で記録された界面指示灯の点灯個数を付図3.39に示す。

2.3 濃度測定値

第1段セトラ水相の酸濃度と7, 9, 12, 17段セトラ水相の酸, ウラン, プルトニウム濃度を12分間隔で測定する。

3. 計算結果

付図3.40, 3.41に計算例3.1における第7段セトラ部水相のウランおよびプルトニウム濃度測定値(実線)と濃度計算値(点線)を示す。

付図3.42, 3.45に計算例3.2における第7, 9段セトラ部水相のウランおよびプルトニウム濃度測定値(実線)と濃度計算値(点線)を示す。

付図3.46~3.51に計算例3.3における第7, 9, 12段セトラ部水相のウランおよびプルトニウム濃度測定値(実線)と濃度計算値(点線)を示す。

付表3.4に計算例3.1, 3.2および3.3のT=4Hrにおけるセトラ水相部のウランおよびプルトニウム濃度計算値の90%信頼区間巾[%]を示す。

計算例 3.1

		0	1	2	3	4	5	6	(hr)
9 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	○	○	○	○	○	○
	16	○	○	○	○	○	○	○	○
	14	●	○	○	○	○	○	○	○
	11	●	●	○	○	○	○	○	○
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●

計算例 3.2

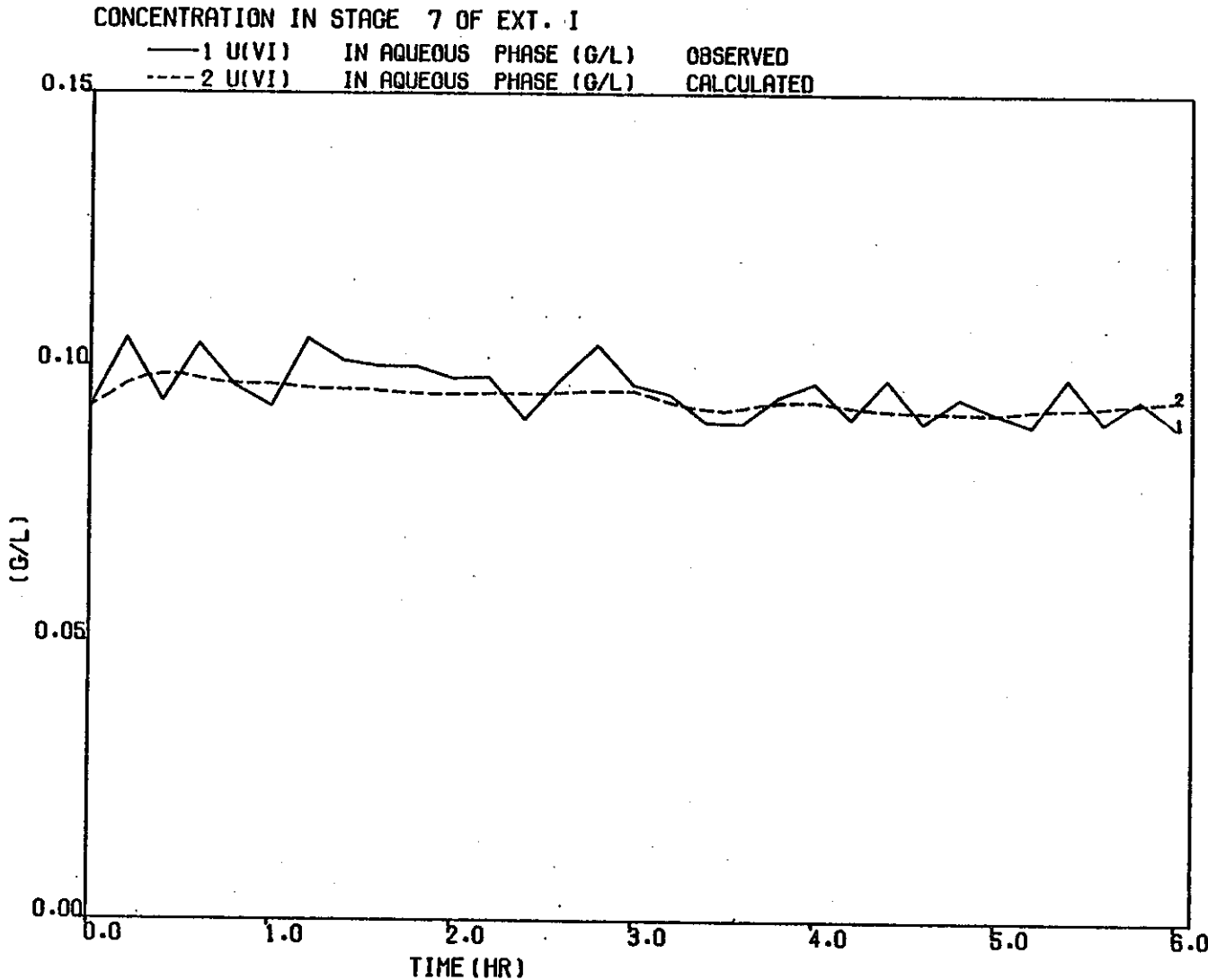
		0	1	2	3	4	5	6	(hr)
9 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	○	○	○	○	○	○
	16	○	○	○	○	○	○	○	○
	14	●	○	○	○	○	○	○	○
	11	●	●	○	○	○	○	○	○
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●
13 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	●	●	●	●	●	○
	16	○	●	●	●	●	●	●	●
	14	●	●	●	●	●	●	●	●
	11	●	●	●	●	●	●	●	●
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●

計算例 3.3

		0	1	2	3	4	5	6	(hr)
6 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	○	○	○	○	○	○
	16	○	○	○	○	○	○	○	○
	14	●	○	○	○	○	○	○	○
	11	●	●	●	●	●	●	●	●
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●
9 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	○	○	○	○	○	○
	16	○	●	●	●	●	○	○	○
	14	●	●	●	●	●	●	●	●
	11	●	●	●	●	●	●	●	●
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●
13 段	25	○	○	○	○	○	○	○	○
	19	○	○	●	○	○	○	○	○
	16	○	○	●	●	○	○	○	○
	14	●	●	●	●	●	●	●	●
	11	●	●	●	●	●	●	●	●
	5 (cm)	●	●	●	●	●	●	●	●

● は点灯を示す

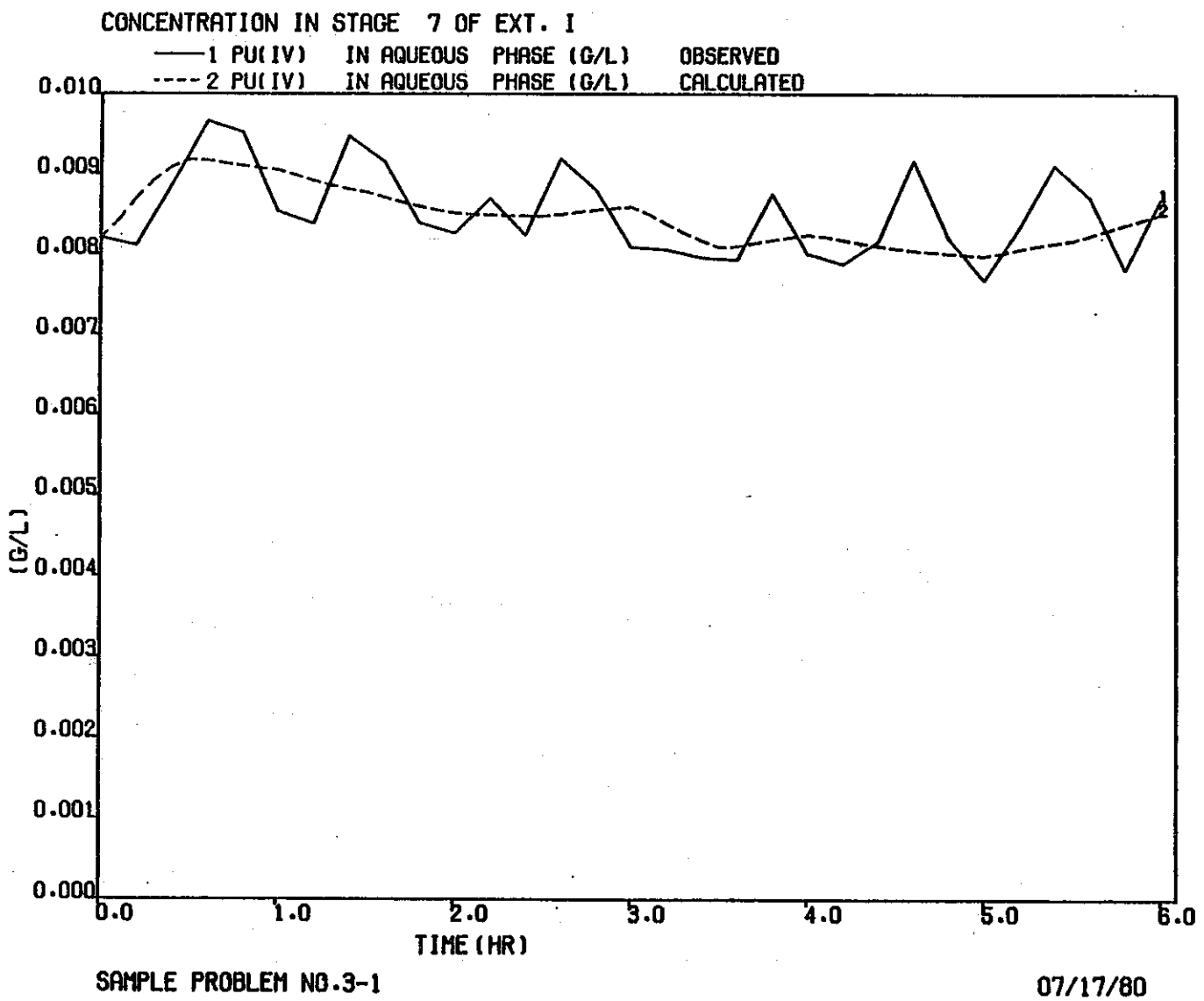
付図 3.39 計算例 3 の界面位置



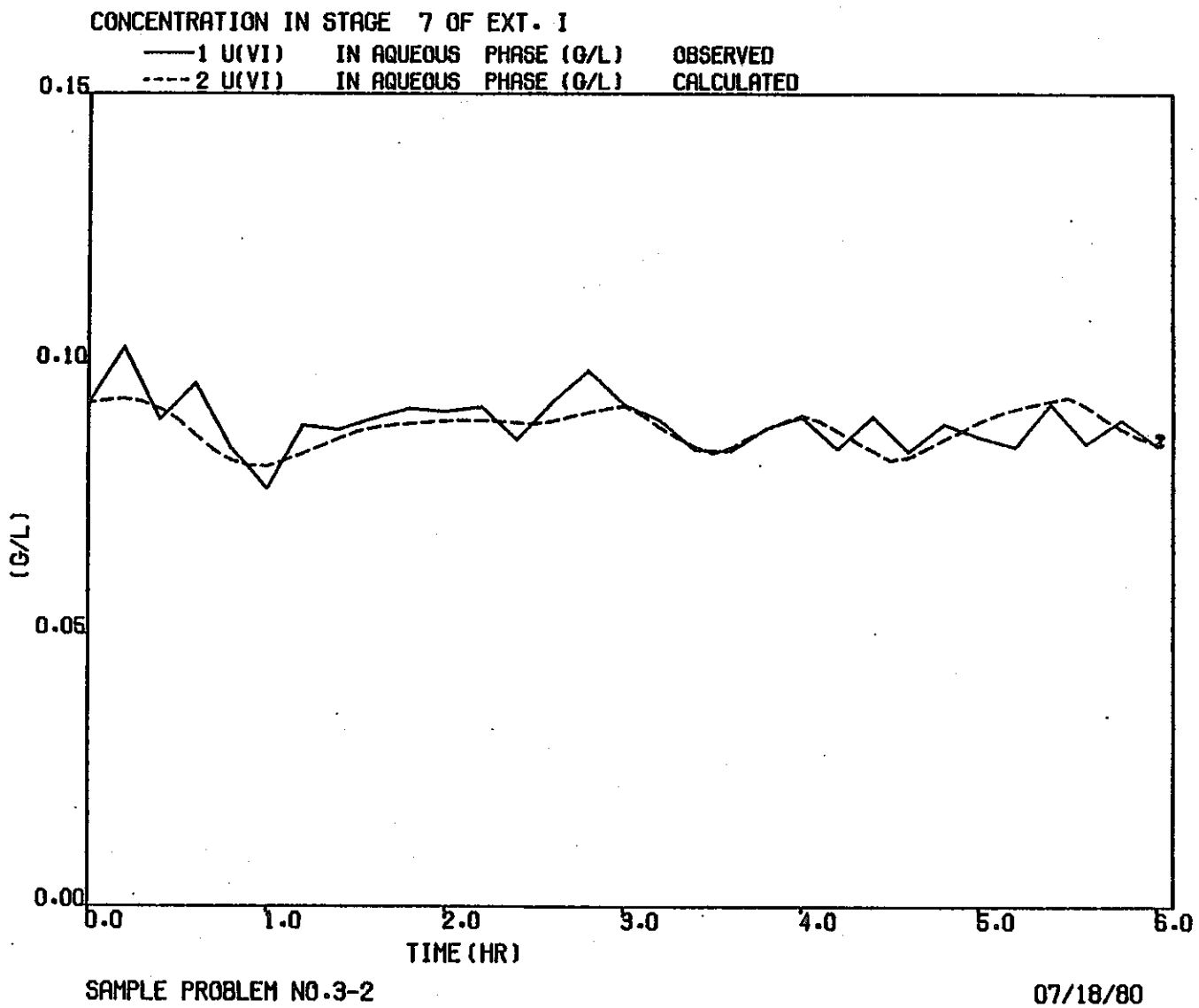
SAMPLE PROBLEM NO.3-1

07/17/80

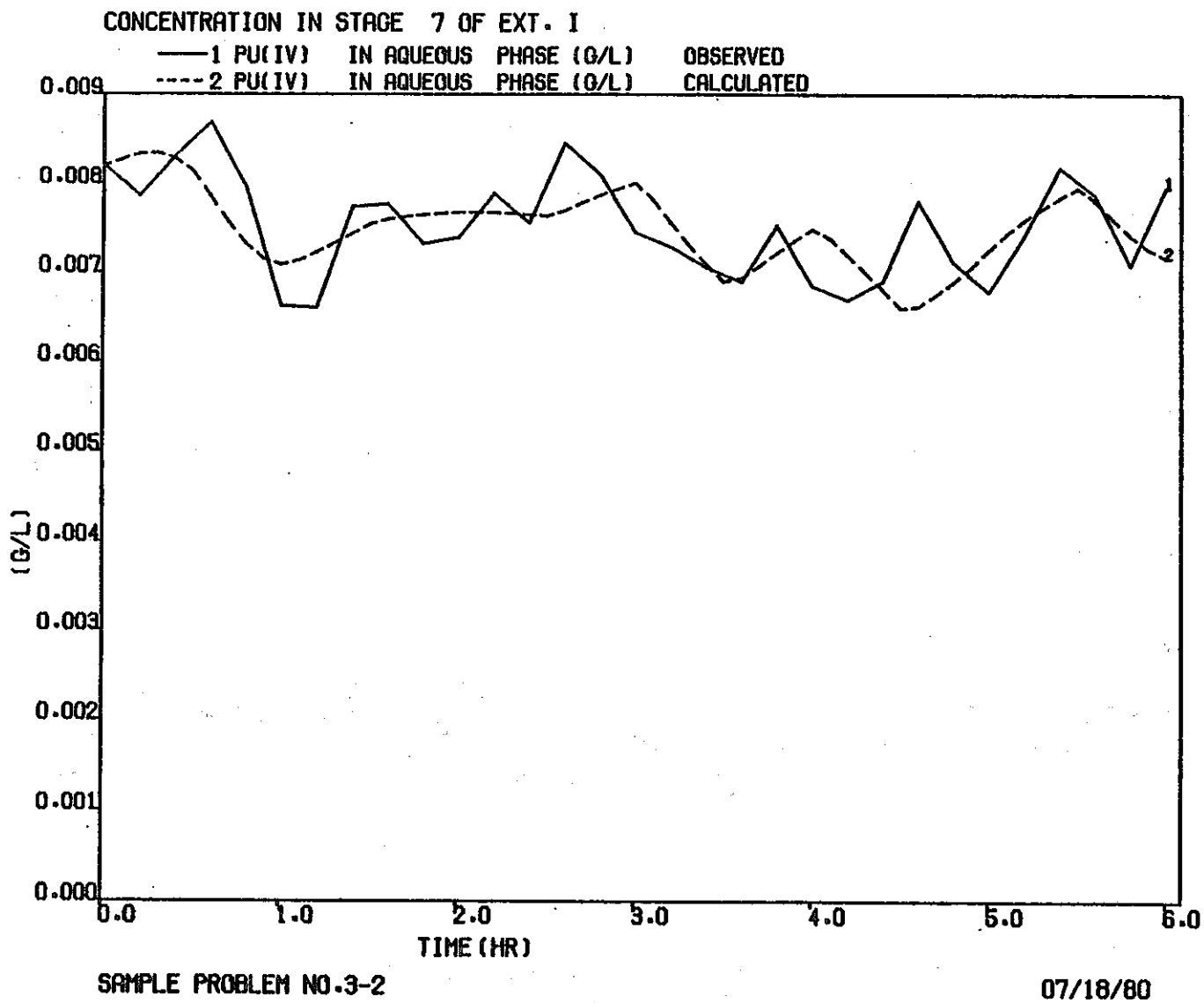
付図 3.40 EXT. I, 第7段水相Uの濃度変化



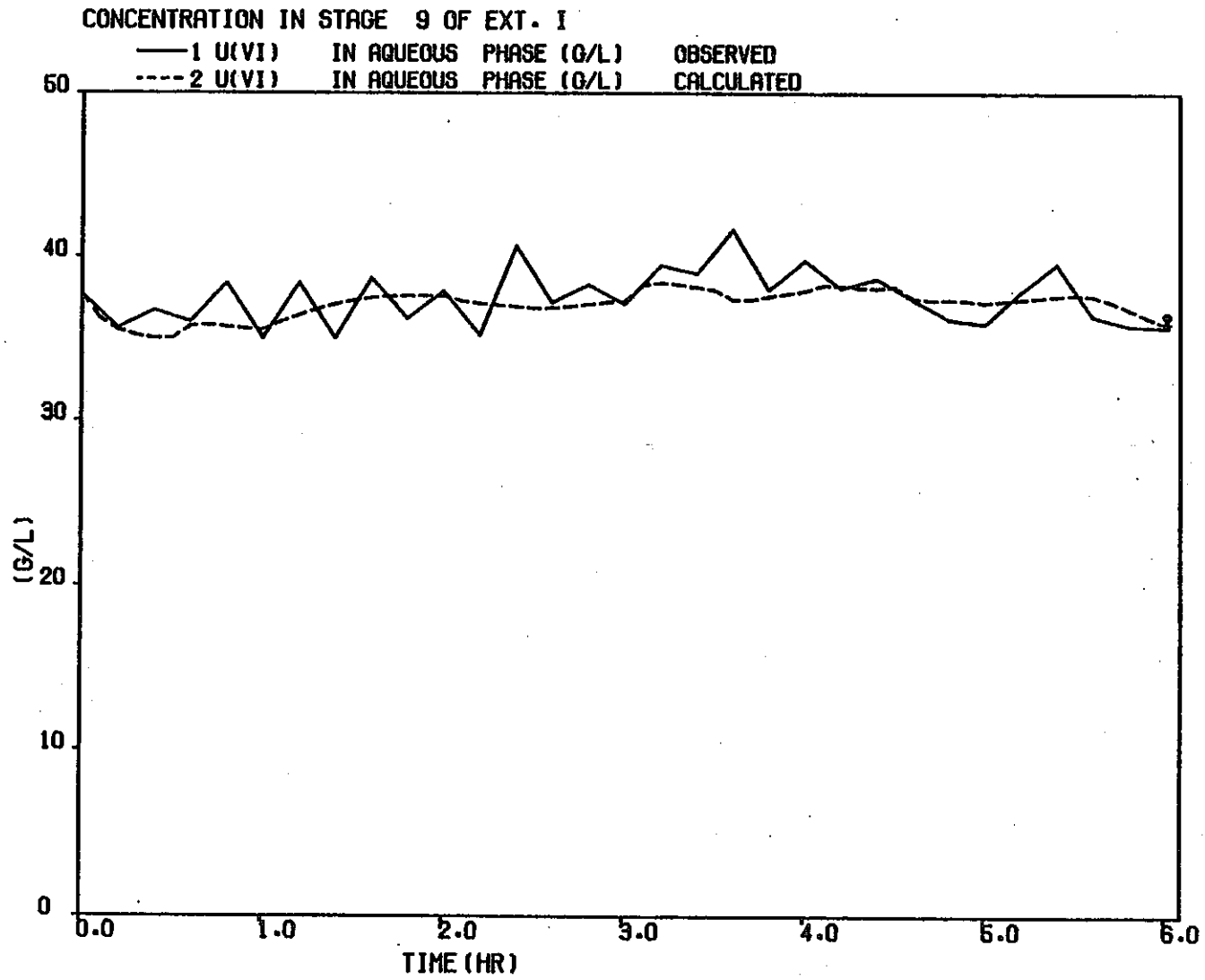
付図 3.41 EXT. I, 第 7 段水相の Pu の濃度変化



付図 3.42 EXT. I, 第 7 段水相の U の濃度変化



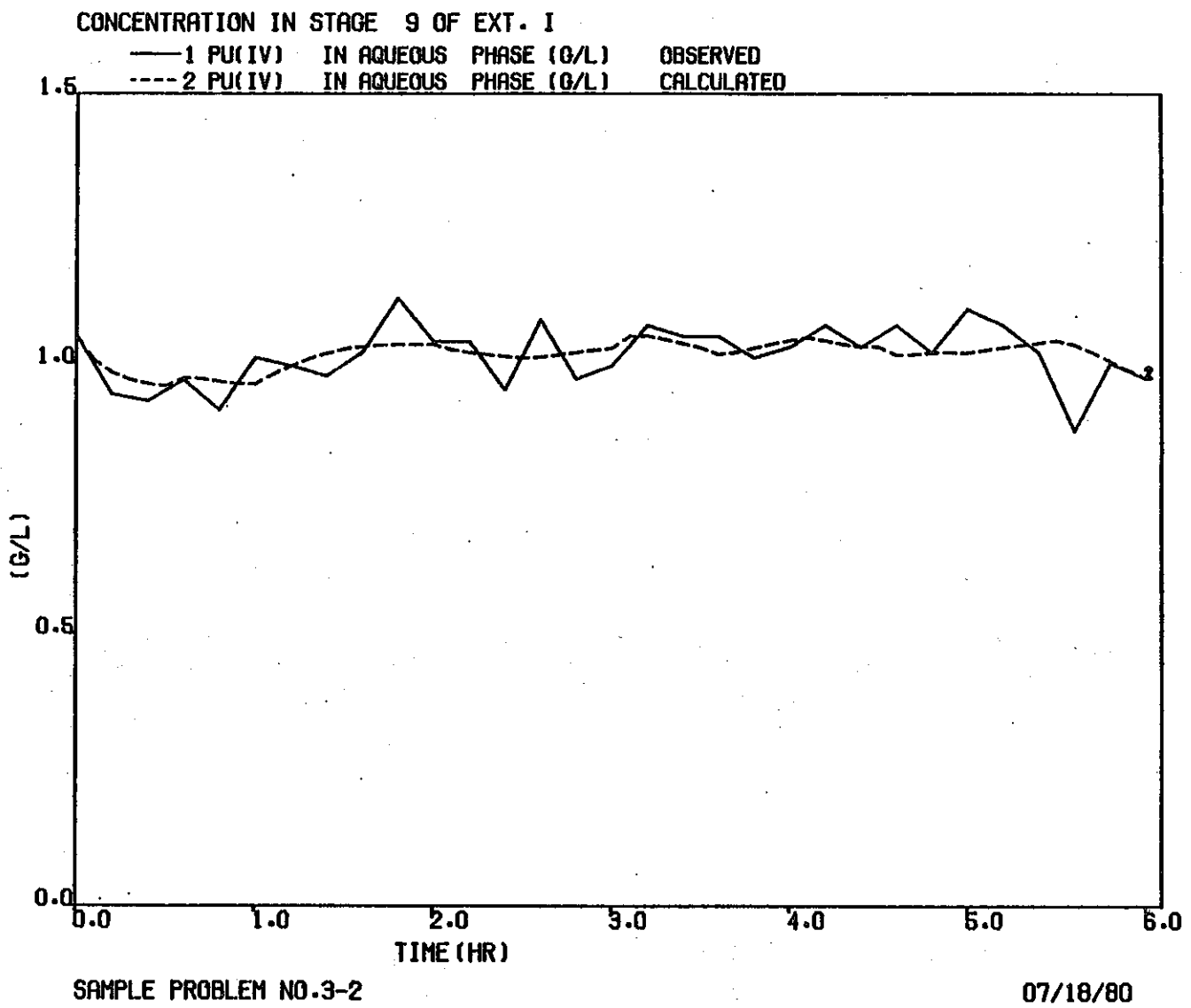
付図 3.43 EXT. I, 第7段水相のPuの濃度変化



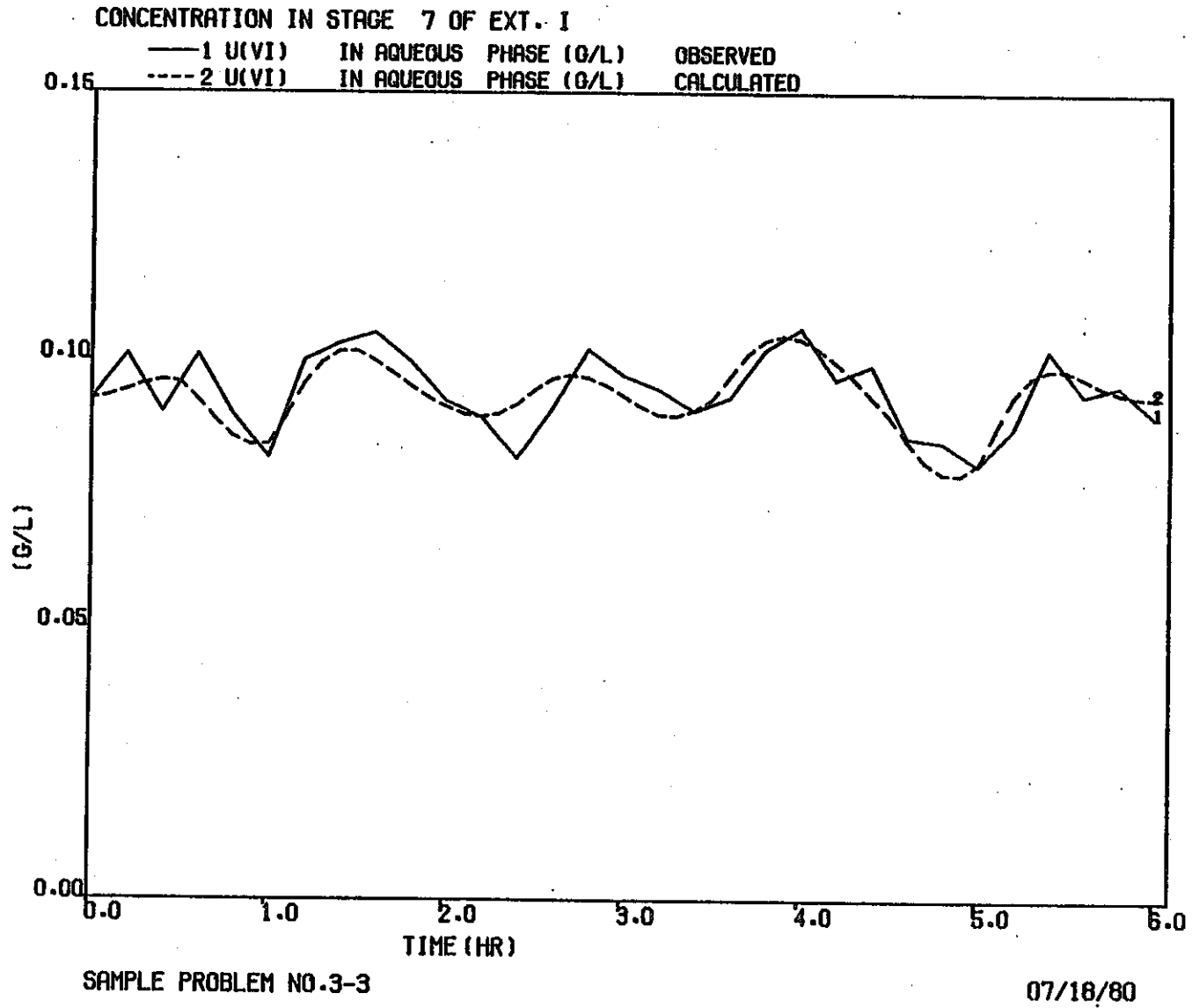
SAMPLE PROBLEM NO.3-2

07/18/80

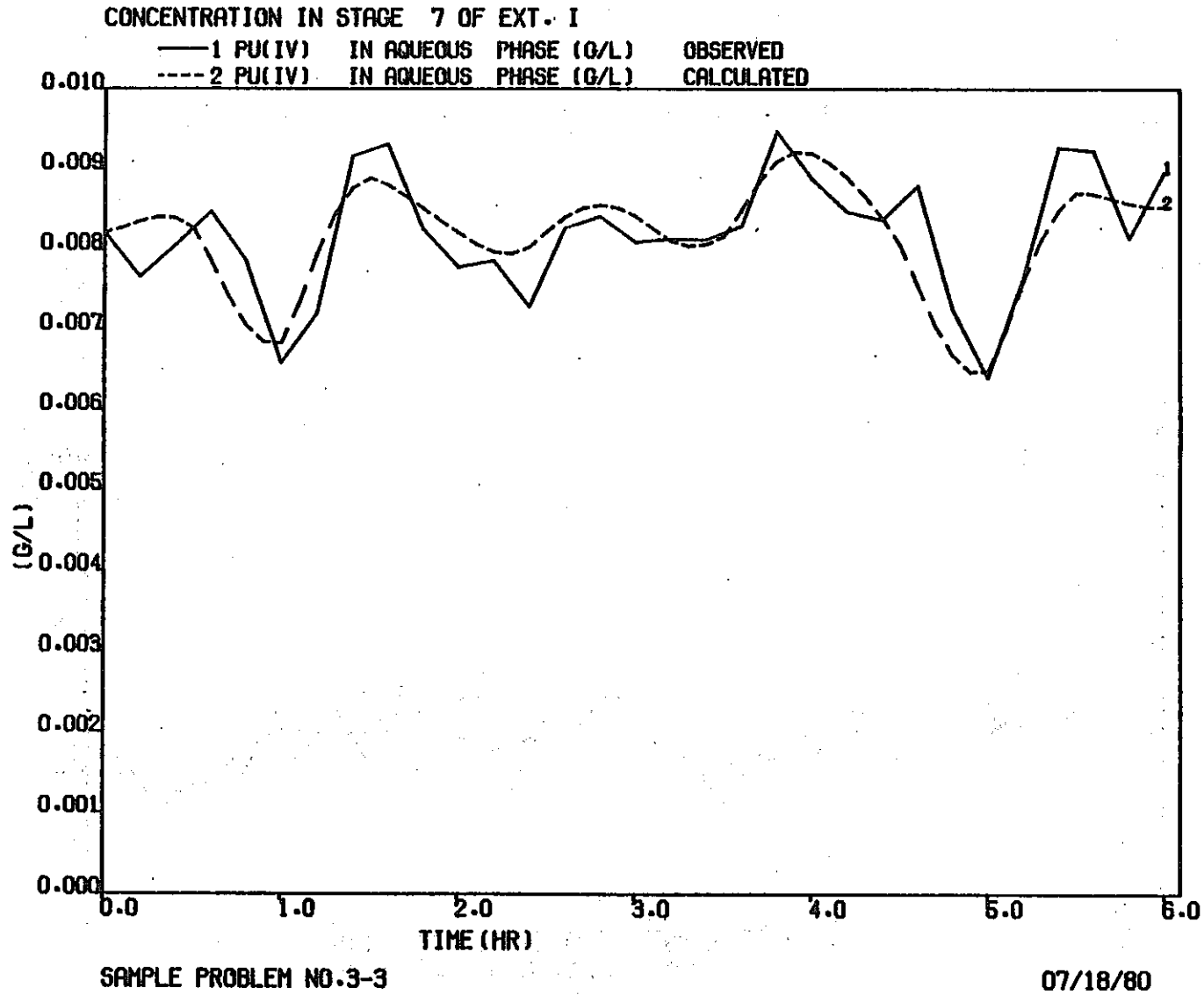
付図 3.44 EXT. I, 第9段水相のUの濃度変化



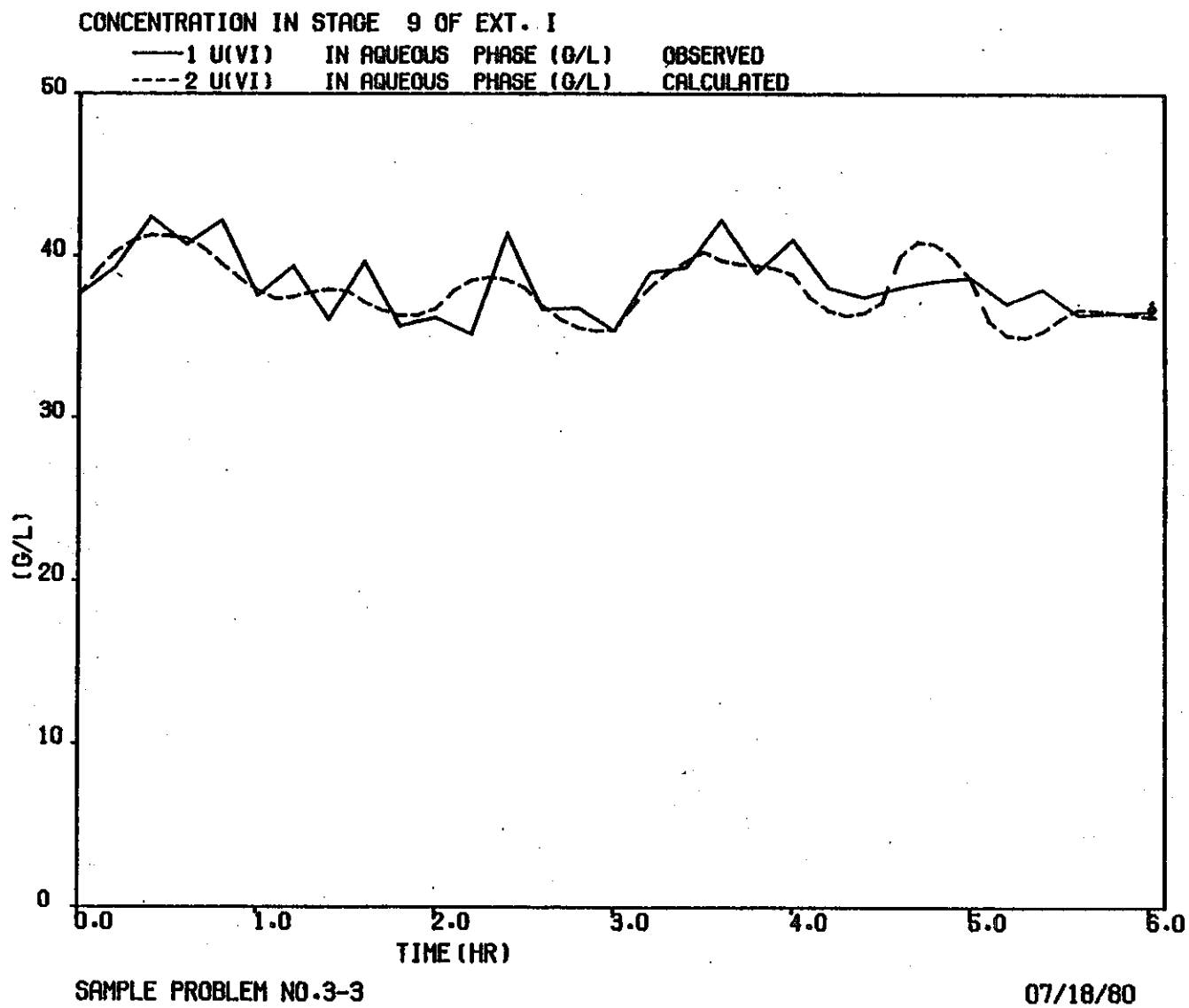
付図 3.45 EXT. I, 第9段水相のPuの濃度変化



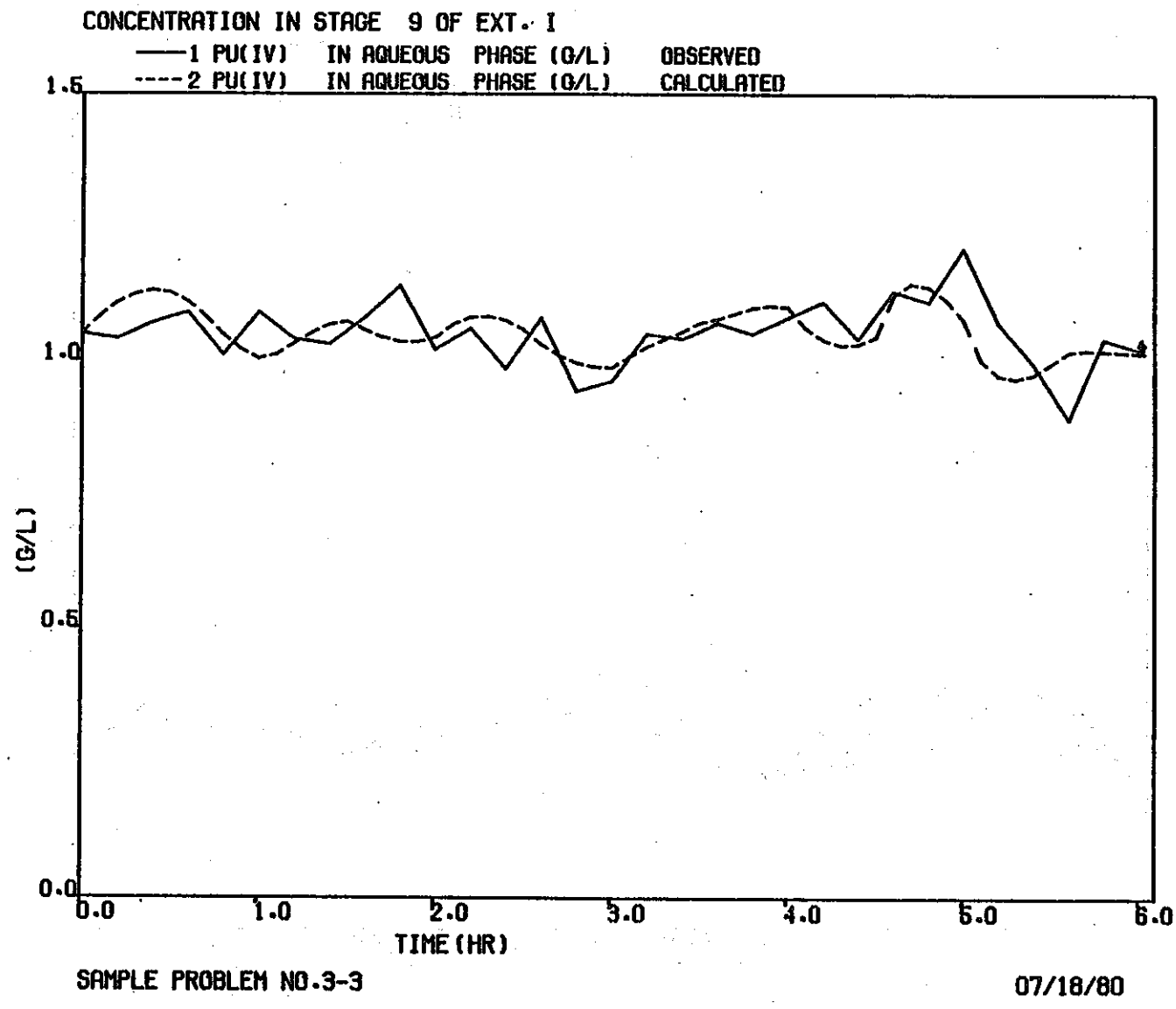
付図 3.46 EXT. I, 第 7 段水相の U の濃度変化



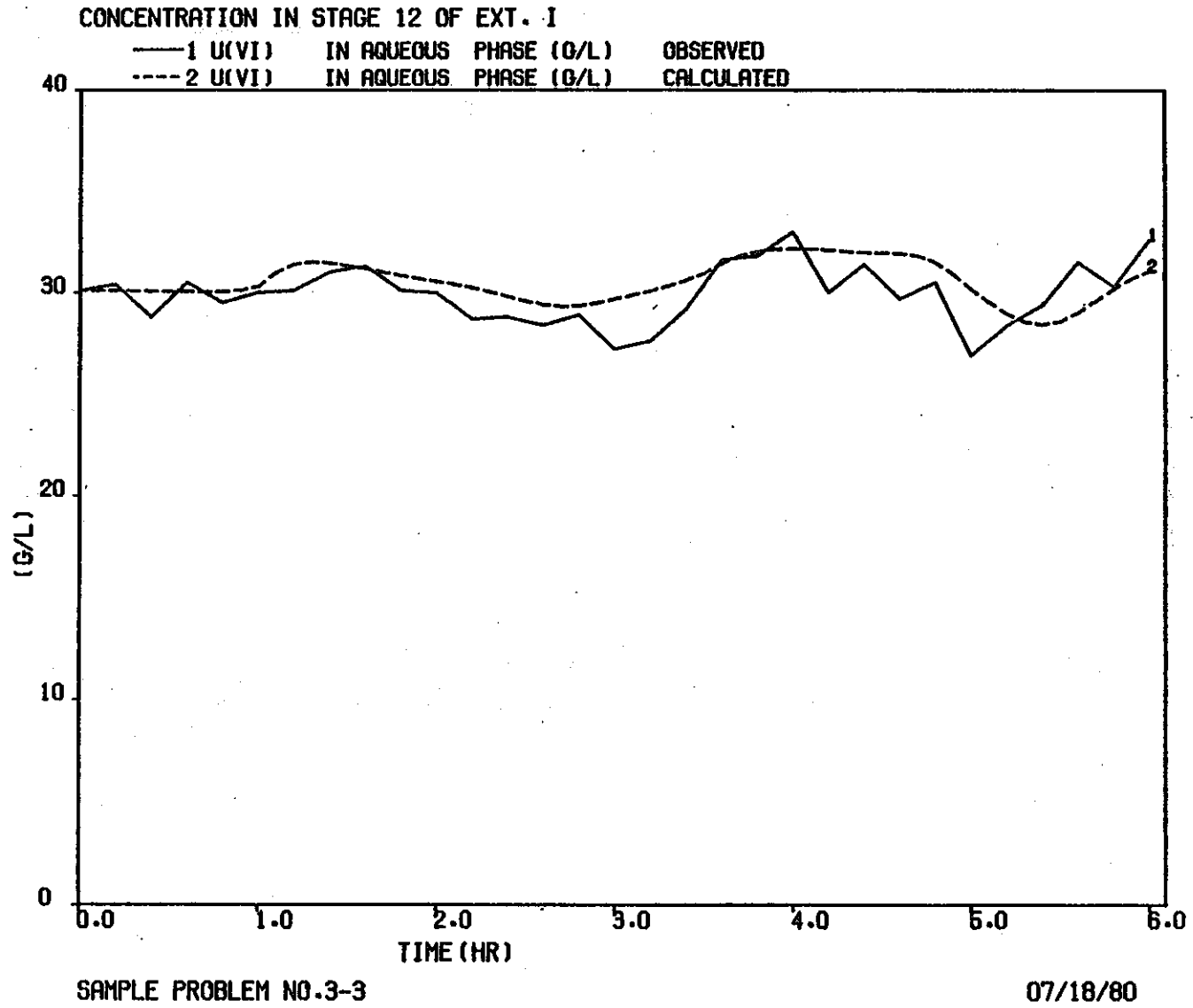
付図 3.47 EXT. I, 第 7 段水相の Pu の濃度変化



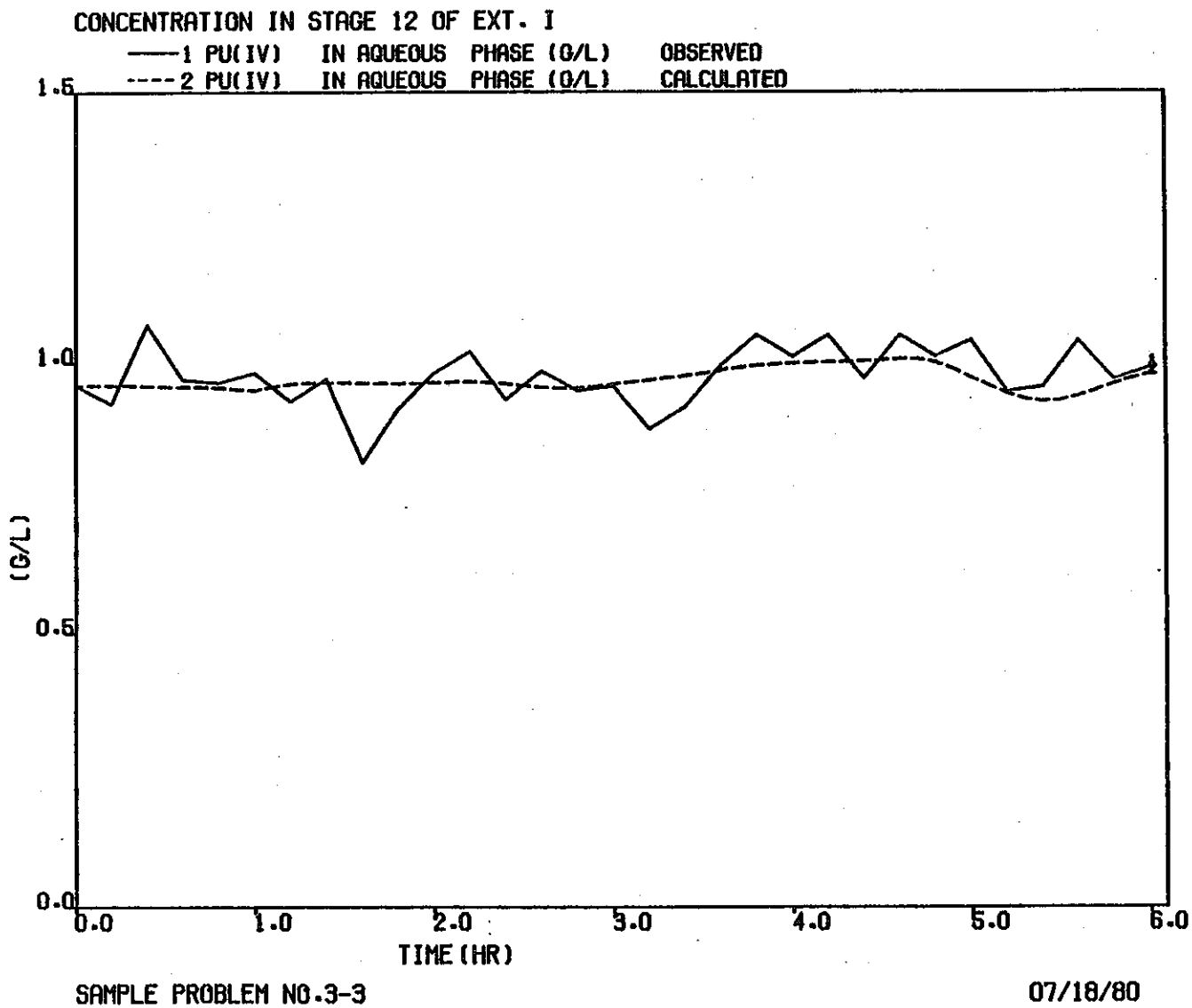
付図 3.48 EXT. I, 第9段水相のUの濃度変化



付図 3.49 EXT. I, 第 9 段水相の Pu の濃度変化



付図 3.50 EXT. I, 第12段水相のUの濃度変化



付図 3.51 EXT. I, 第12段水相のPuの濃度変化

付表 3.4 計算例 3 の 90%信頼区間巾〔%〕

段	計算例 3.1		計算例 3.2		計算例 3.3	
	U	Pu	U	Pu	U	Pu
1	6.2	7.3	8.3	9.8	7.7	10.1
2	6.9	8.6	9.1	11.2	8.5	11.3
3	7.1	9.0	9.4	11.7	9.3	11.7
4	7.2	9.2	9.6	12.1	11.1	12.0
5	7.1	9.7	9.9	12.7	14.7	15.0
6	6.5	10.0	9.8	13.2	18.4	22.4
7	4.7	8.7	9.1	12.4	8.4	10.8
8	0.9	3.9	8.9	10.3	10.3	9.6
9	4.3	4.1	7.6	8.9	10.9	8.0
10	5.0	4.2	7.3	6.1	15.0	10.9
11	2.2	1.8	3.5	2.6	6.0	3.8
12	0.6	0.5	1.5	0.9	1.9	0.7
13	0.2	0.1	13.0	13.0	34.7	35.0
14	0.04	0.00	10.7	8.9	22.2	17.7
15	0.04	0.08	4.8	3.8	8.9	6.9
16	0.1	0.2	1.5	1.0	2.7	1.9
17	0.4	0.5	0.4	0.6	0.8	0.7

$$90\% \text{ 信頼区間巾} = \frac{(\text{信頼区間の上限}) - (\text{信頼区間の下限})}{(\text{濃度計算値})} \times 100$$

濃度はセトラ水相の成分濃度である

付録4 数式の補足説明

付録4 数式の補足説明

本文の中で説明が不十分と思われる部分や基本的な事柄で、まとめて説明した方がよいと思われるものについて、簡単に補足説明を行う。

4.1 三次スプライン関数による界面レベルの補間

2.1.4にて界面レベルの時間変化は三次スプライン関数(Cubic spline function)によって補間されることを述べたが、ここではその具体的な計算法を示す。

ある時間区分[a, b]における界面レベル入力時間点(節点と呼ぶ)を

$$a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b \tag{1}$$

とし、節点における界面レベル高さとその一次導関数値をそれぞれ

$$l_0, l_1, \dots, l_n, m_0, m_1, \dots, m_n \tag{2}$$

とおく。一次導関数値 m_i を用いると、区間 $[t_{i-1}, t_i]$ における三次スプライン関数 $S(t)$ とその導関数 $S'(t)$ は

$$\begin{aligned} S(t) = & m_{i-1} (t_i - t)^2 (t - t_{i-1}) / h_i^2 - m_i (t - t_{i-1})^2 (t_i - t) / h_i^2 \\ & + l_{i-1} (t_i - t)^2 [2(t - t_{i-1}) + h_i] / h_i^3 \\ & + l_i (t - t_{i-1})^2 [2(t_i - t) + h_i] / h_i^3 \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} S'(t) = & m_{i-1} (t_i - t) (2t_{i-1} + t_i - 3t) / h_i^2 \\ & - m_i (t - t_{i-1}) (2t_i + t_{i-1} - 3t) / h_i^2 \\ & + 6(l_i - l_{i-1})(t_i - t)(t - t_{i-1}) / h_i^3 \end{aligned} \tag{4}$$

ここで $h_i = t_i - t_{i-1}$

と表わされる。 $S(t)$, $S'(t)$ は時間区分[a, b]の上で連続なことは明らかである。

二次導関数 $S''(t)$ は

$$\begin{aligned} S''(t) = & -2m_{i-1} (2t_i + t_{i-1} - 3t) / h_i^2 - 2m_i (2t_{i-1} + t_i - 3t) / h_i^2 \\ & + 6(l_i - l_{i-1})(t_i + t_{i-1} - 2t) / h_i^3 \end{aligned} \tag{5}$$

となる。

(3)式が二次導関数まで連続であるためには、 $t_i (i=1, 2, \dots, n-1)$ において $S''(t)$ を連続にすればよい。 t_i の両側で $S''(t)$ の極限值をとると、

$$\left. \begin{aligned} S''(t_i -) &= \frac{2 \cdot m_{i-1}}{h_i} + \frac{4 m_i}{h_i} - 6 \frac{l_i - l_{i-1}}{h_i} \\ S''(t_i +) &= -\frac{4 m_i}{h_{i+1}} - \frac{2 \cdot m_{i+1}}{h_{i+1}} + 6 \frac{l_{i+1} - l_i}{h_{i+1}^2} \end{aligned} \right\} \tag{6}$$

となり、次の関係式が成り立つ必要がある。

$$\frac{1}{h_i} \cdot m_{i-1} + 2 \cdot \left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}} \right) m_i + \frac{1}{h_{i+1}} \cdot m_{i+1} = 3 \cdot \frac{l_i - l_{i-1}}{h_i^2} + 3 \cdot \frac{l_{i+1} - l_i}{h_{i+1}^2} \tag{7}$$

(i=1, 2, …, n)

(7)式の両辺に $h_i \cdot h_{i+1}$ をかけて

$$\left. \begin{aligned} a_1^i &= h_{i+1} \\ a_2^i &= 2 \cdot (h_i + h_{i+1}) \\ a_3^i &= h_i \\ r^i &= 3 \cdot [h_{i+1}(\ell_i - \ell_{i-1}) / h_i + h_i \cdot (\ell_{i+1} - \ell_i) / h_{i+1}] \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

($i=0 \sim n$)

ただし、端条件として

$$h_0 = 0, \quad h_{n+1} = 0 \quad (9)$$

とおくと、(7)式は $n+1$ 元の連立方程式

$$a_1^i \cdot m_{i-1} + a_2^i \cdot m_i + a_3^i \cdot m_{i+1} = r_i \quad (10)$$

($i=0 \sim n$)

となる。(10)式の係数行列は三角対重であるから、消去法によって簡単に解ける。(10)式より一次導関数値 m_i ($i=0 \sim n$) が求まれば、(3)式、(4)式により時間区分 $[a, b]$ 内の任意の時間点 t における界面レベルとその一次導関数値を計算できる。

4.2 線型最小二乗法における正規方程式の導出¹⁰⁾

線型最小二乗法の問題をある独立変数ベクトル \mathbf{X}_i に対し測定値 y_i が与えられている時、

$$\begin{aligned} y_i &= f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon_i \\ &= \mathbf{X}_i \cdot \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i \end{aligned} \quad (11)$$

($i=1 \sim n$)

なる線型関数 $f(\mathbf{X}_i, \boldsymbol{\beta})$ でフィティングし、誤差 ε_i の二乗和が最小となるようなパラメーター $\boldsymbol{\beta}$

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)^T \quad (12)$$

を決定するものとしよう。簡単のため測定値 y_i ($i=1 \sim n$) の分散はすべて等しいと仮定すると、誤差 ε_i の二乗和 Q は

$$Q = \sum_{i=1}^n [y_i - \mathbf{X}_i \cdot \boldsymbol{\beta}]^2 \quad (13)$$

となる。 Q を最小とするため、 Q を $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ のそれぞれで微分してゼロとおくと、次のように $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ に関する連立一次方程式が得られる。

$$\left. \begin{aligned} \left(\sum_{i=1}^n x_{i1} \cdot x_{i1} \right) \beta_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_{i1} \cdot x_{i2} \right) \beta_2 + \dots + \left(\sum_{i=1}^n x_{i1} \cdot x_{ip} \right) \beta_p &= \sum_{i=1}^n x_{i1} y_i \\ \left(\sum_{i=1}^n x_{i2} \cdot x_{i1} \right) \beta_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_{i2} \cdot x_{i2} \right) \beta_2 + \dots + \left(\sum_{i=1}^n x_{i2} \cdot x_{ip} \right) \beta_p &= \sum_{i=1}^n x_{i2} y_i \\ \left(\sum_{i=1}^n x_{ip} \cdot x_{i1} \right) \beta_1 + \left(\sum_{i=1}^n x_{ip} \cdot x_{i2} \right) \beta_2 + \dots + \left(\sum_{i=1}^n x_{ip} \cdot x_{ip} \right) \beta_p &= \sum_{i=1}^n x_{ip} y_i \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

この方程式が正規方程式である。

$$X_i = (X_{i1}, X_{i2}, \dots, X_{iP}) \tag{15}$$

であり、行列Xを

$$X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11}, X_{12}, \dots, X_{1P} \\ X_{21}, X_{22}, \dots, X_{2P} \\ \vdots \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ X_{n1}, X_{n2}, \dots, X_{nP} \end{pmatrix} \tag{16}$$

とおくと(14)式は行列形式で

$$X^T X \cdot \beta = X^T Y \tag{17}$$

となるから、最小二乗推定パラメーターβは

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T Y \tag{18}$$

と表わされる。

また、測定値Y = (y₁, y₂, …, y_n)^Tの分散が等しくなく、重み行列Wが

$$W = \begin{pmatrix} w_1 & & & \\ & w_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & w_n \end{pmatrix}$$

と定義される場合は、最小とする評価関数Qは

$$Q = \sum_{i=1}^n w_i [y_i - X_i \cdot \beta]^2 \tag{19}$$

となるから正規方程式は

$$X^T W X \beta = X^T \cdot W \cdot Y \tag{20}$$

となる。TRANPESコードでは測定値y_iの分散をδ_i²と入力して、且つ重みw_iを

$$w_i = 1 / \delta_i^2 \tag{21}$$

としている。