

本資料は 年 月 日付けで登録区分、
変更する。 2001. 6. -6
[技術情報室]

燃料ペレット中のポア分布の計算

Calculation for Pore Distribution in Fuel Pellet.

1976年10月

動力炉・核燃料開発事業団

東海事業所

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村大字村松4番地49
核燃料サイクル開発機構
技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:
Technical Cooperation Section,
Technology Management Division,
Japan Nuclear Cycle Development Institute
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1184
Japan

だ
い
の

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)
2001



燃料ペレット中のポア分布の計算

実施責任者：小泉益通（プル燃部開発課）

井滝俊幸（プル燃部品質管理課）

報告者 落合洋治（プル燃部開発課）

去来川汎人（プル燃部品質管理課）

古屋広高（プル燃部開発課）

目的：金相研磨面上のポア断面径分布から

ペレット単位体積中の真のポア分布を推定する。

要旨：ペレット中に分散しているポアの三次元的分布を，ペレット研磨面上のポア断面径の個数分布から推定計算するコードPOREDIS - 1， 2を開発した。

ポアは球と仮定し，ポア径を不連続な大きさの級間（Cell）に分け，各級間内のポアは同じ直径を持つものと考えて計算を行った。この計算コードによって，三次元空間におけるポア個数頻度分布，ポア体積分布，ポア平均径，ポア総個数，ポア総体積，ペレット密度等が計算され，従来行われなかった。定量的なポア特性の評価が可能になった。

本計算コードはポアの分布のみならず，金属材料中の析出物や介在物，鉍石中のある特定成分等々の三次元的空間分布をその断面での観測結果から推定計算することにも使うことができ汎用性の大きいものである。

目 次

まえがき	1
I 計算概要	2
II フローチャート	23
III 入力形式	25
IV 出力形式	27
V 計算例	27
VI テスト評価および考察	51
VII 参考文献	58
付 録	59
計算コードリスト	

ま え が き

核燃料ペレット中のポア分布、ポア形状は、燃料の製造条件即ち原料粉特性、添加剤の種類と量、焼結温度と時間などによって決まる。

この燃料のポア特性 (porosity) は、原子炉内での燃料の熱伝導率、スウェリング、FP ガス保持率、破壊強度、クリープ率等の物性値と密接な関係を持っているので大きな関心を集めている。特に最近問題となった焼きしまり現象の原因は、燃料中のポアのうち数(1~2)ミクロン以下のものが原子炉内焼結によって、照射初期の段階で消滅することによると考えられている。そして照射前後の燃料中のポア分布に基づいて、種々の焼きしまりモデルが提案されており、また一方では燃料のポア分布特性をコントロールして、焼きしまり安定性の高いペレットを製造する試みも行われている。

酸化物燃料ペレットは不透明であるために、その中に分散しているポアの大きさの分布やポア形状を直接観測することは不可能である。それゆえ、燃料ペレットをある面で切断して得られた二次元の金相研磨面上に現われたポア断面の分布を測定し、その結果に基づいて三次元のポア空間分布を推定することが一般に行われる。

しかし、今まで動燃には、金相面上で観測されたポアの断面分布から、燃料ペレット中に分散しているポアの空間分布を推定する計算コードが作られていなかったために、極めて定性的な燃料のポア特性しか評価できなかった。そこで、今回画像解析装置などによって測定された、金相写真上のポア断面径の個数分布から、ペレット中に分散しているポアの空間分布を推定し、ポア径の個数分布、ポア体積分布、平均ポア径、ポア総数、ポア体積率、ペレット密度等々を計算するコード PORED IS-1、PORED IS-2 を開発したのでここに報告する。この計算コードによって、製造条件とポア特性 (porosity) の関係、燃料物性とポア特性の関係、照射中のポア分布の変化等々について定量的な解析が可能になるものと思われる。

またこれら二つの計算コードは、不透明なマトリクス中に分散している第二相の空間分布の解析、例えば、混合酸化物中の PuO_2 スポット、金属材料中の析出物や介在物、鉱石中のある特定成分、等々の三次元的空間分布をその断面での観測結果から推定することにも使うことができ、極めて汎用性の大きいものである。ただしこの場合、それら第二相が球状かあるいは球に近いものであることが必要である。

I. 計算概要

二次元の断面分布を、それに相当する空間分布に変換する解析方法は、次の三つの断面上で観測される量によって分類される。

- a) 直径の分布
- b) 面積の分布
- c) 弦の分布

このうち(a)の金相面上で観測されたポアの断面直径の分布に基づいて解析する方法には、Sheil, Saltykov, Schwartz, Nicholson らの方法がある。

これらの解析方法に共通することは、ポアを球と仮定しポア断面径およびポア径の分布を連続的な関数として考えるのではなく、不連続な大きさの級間 (Cell) に分け、各級間内のポアは同じ直径を持つものと考えて、ヒストグラム状累積分布の推定の問題として考える。また図1に示すように、ある断面径を持つ断面の数を数えると、そのうちのあるいくつかの断面は、より大きな直径を持つポアから生じたものであり、 j 番目の大きさのポアが切断されて、 i 番目 ($i \leq j$) の大きさの断面径に観測される確率 P_{ij} の行列要素は数学的モデルによって計算される。従って、線型的関係で変換されたベクトル (行列) から、もとのベクトルを推定する計算によって、三次元空間中における各級間のポア個数が計算できる。

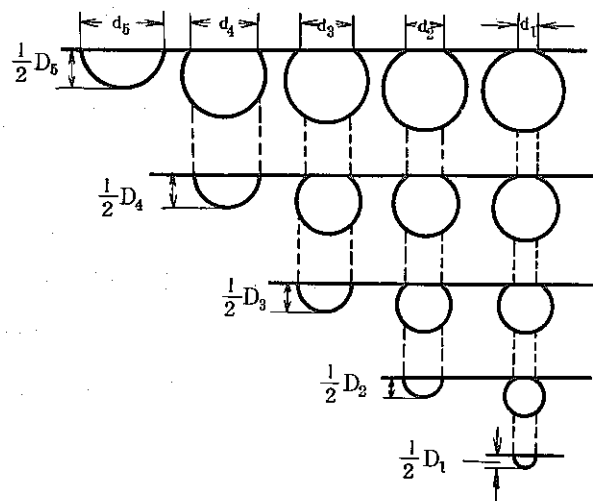


図1 直径が d_1 から d_5 の断面の総数に対する、直径が D_1 から D_5 までの球の寄与の図解

PORDIS-1 は Saltykov-Shwartz の方法¹⁾ を基礎にして作った基礎的な計算コードであり、PORDIS-2 は Hanford で開発されたポア分布計算コード LINEST-II²⁾ および Sheil 方法³⁾⁴⁾ を基礎にして作った改良コードである。

1 POREDIS - I

(a) 単位体積中の個数分布の計算

ペレット中のポアがすべて同じ大きさDを持つ場合には、単位面積あたりに観測されるすべての大きさのポア断面径の個数を N_A 、単位体積あたりのポアの個数を N_V とすれば、図2から $1 : N_V = D : N_A$ であるから

$$N_V = \frac{N_A}{D} \tag{1}$$

となり、単位体積中のポアの数計算できる。

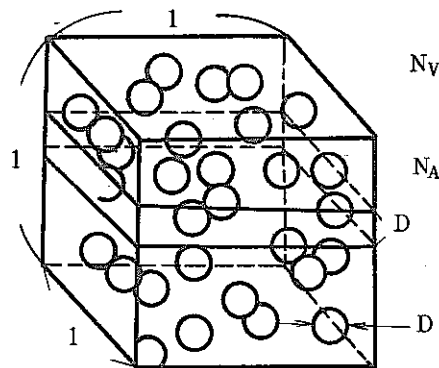


図2 単位体積中の単分散ポアの個数とポア断面個数

ポアがいろいろな大きさの径を持つ場合には(1)式は次のようになる。

$$N_V(j) = \frac{N_A(i, j)}{P(i, j)} \cdot \frac{1}{D_j} \tag{2}$$

ここで $N_V(j)$ は単位体積中の直径 D_j の個数

$N_A(i, j)$ は直径 D_j のポアから得られる直径 d_i の断面の単位面積あたりの数

$P(i, j)$ はランダムな平面が直径 D_j のポアに交って大きさ d_i の断面を作る確率である。金相断面上で観測されるポア断面径を測定限界径 $d(0)$ から最大径 $d(n)$ までを任意に分割し、 $d(0) \sim d(1)$, $d(1) \sim d(2) \dots \dots$, $d(n-1) \sim d(n)$ の n 個に分けて各級間内のポア断面径は同じ径を持つものとする。そして各級間内の単位面積あたりの断面個数を $N_A(1) \sim N_A(n)$ とする。同様にポア直径も $D(0) \sim D(n)$ の $(n+1)$ 個に分割し、 $D(0) \sim D(1)$, $D(1) \sim D(2) \dots \dots$, $D(n-1) \sim D(n)$ の n 個の各級間隔に分け各級間での単位体積中のポア個数を $N_V(1) \sim N_V(n)$ とする。図3に示したように、直径 $D(j)$ のポアに平面が交って直径 $d(i-1) \sim d(i)$ の直径を持つ断面ができる確率 $P(i, j)$ は、ポア中心からの距離を h_i と h_{i-1} とすれば次式になる。

$$P(i, j) = \frac{h}{D(i)/2} = \frac{h_{i-1} - h_i}{D(j)/2}$$

$$= \frac{\sqrt{D(j)^2 - d(i-1)^2} - \sqrt{D(j)^2 - d(i)^2}}{D(j)} \quad (3)$$

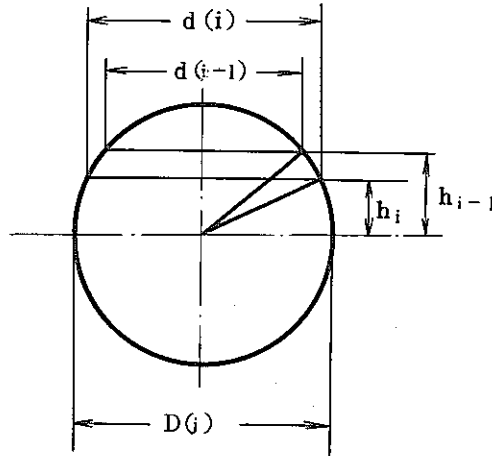


図3 ポア直径と断面径との間の関係

また図-1に示したように、断面上で同じ直径をもつ断面の数は、それと同じかあるいはそれよりも大きい直径を持つポアから生じたものであるから、

$$N_A(i) = \sum_{j=i}^n N_A(i, j), \quad (j \geq i) \quad (4)$$

となる。

(4)式へ(2), (3)式を代入すると

$$N_A(i) = \sum_{j=i}^n \{ N_V(j) \times [\sqrt{D(j)^2 - d(i-1)^2} - \sqrt{D(j)^2 - d(i)^2}] \}$$

$$= \sum_{j=i}^n N_V(j) \cdot C(i, j) \quad (j \geq i) \quad (5)$$

となる。

(5)式のn元一次連立方程式を解くことによって\$N_V(j)\$が計算できる。

例えば5ヶの級間に分ける場合には次のようになる

$$N_A(1) = N_V(1) \cdot C(1.1) + N_V(2) \cdot C(1.2) + N_V(3) \cdot C(1.3) + N_V(4) \cdot C(1.4) + N_V(5) \cdot C(1.5)$$

$$N_A(2) = N_V(2) \cdot C(2.2) + N_V(3) \cdot C(2.3) + N_V(4) \cdot C(2.4) + N_V(5) \cdot C(2.5)$$

$$N_A(3) = N_V(3) \cdot C(3.3) + N_V(4) \cdot C(3.4) + N_V(5) \cdot C(3.5)$$

$$N_A(4) = N_V(4) \cdot C(4.4) + N_V(5) \cdot C(4.5)$$

$$N_A(5) = N_V(5) \cdot C(5.5)$$

となり、 $N_A(5)$ の値から $N_V(5)$ が計算され、その値を逐次代入することによって $N_V(4) \sim N_V(1)$ までの値が計算される。

Saltykov-Schwartzの方法ではポア最小径から最大径までを等分割し、15ヶの級間に分けて(級間隔 Δ) (5)式を $N_V(j) = \sum_{i=j}^n N_A(i) \cdot \alpha(i, j) / \Delta$ という形に変え、任意の j に対して $N(j)$ が直接計算できるように $\alpha(i, j)$ を決めた。

この方法では、金相断面上のポア断面径個数ひん度を測定する時の径範囲が限定されるばかりでなく、Cell数も限られて、測定倍率の異なる複数金相顕微鏡写真上のポア断面を測定する実際の場合には不都合であるので、(5)式に基づいて $N_V(j)$ を求める方法をとった。

(b) ポア体積分布、ポア体積率、ペレット密度、ポア平均径の計算

(a)で単位面積中のポア断面径個数分布から、単位体積中のポア径個数分布が計算された。それぞれの級間に属するポアは、その級間の平均径である $DM(j)$ ($j = 1, n$) に等しいポア径を持つものと考えて、ポア体積分布、ポア体積率、ポア平均径の計算を行なう。

・ポア体積分布 $V_V(j)$

$$V_V(j) = N_V(j) \times 3.14 \times DM(j)^3 / 6$$

・ポア体積率 V_F

$$V_F = \sum_{j=1}^n V_V(j) / 100$$

・ペレット密度 PD

$$PD = 100 - V_F$$

・ポア平均径 PMD

$$PMD = \frac{\sum_{j=1}^n N_V(j) \cdot DM(j)}{\sum_{j=1}^n N_V(j)}$$

2 POREDISE-II

(a) 単位体積中の個数分布の計算

ポア断面の分布とポアの大きさの分布の間には次の積分方程式が成立することをSheilは示した。^{3),4)}

$$n(y) = \int_y^{\infty} \frac{y}{\sqrt{x^2 - y^2}} N(x) dx \quad (6)$$

ここで

x : ポア径

y : ポア断面径

$n(y)$: 単位面積、単位級間隔あたりの断面径 y の断面個数

$N(x)$: 単位体積、単位級間隔あたりの直径 x のポア個数

である。

(b)は Abel 型の積分方程式であるからこれを解くと

$$\int_t^\infty N(x) dx = \frac{2}{\pi} \int_t^\infty \frac{n(y)}{\sqrt{y^2 - t^2}} dy \tag{7}$$

となる。

この(7)式から、三次元空間中の直径 t 以上の径をもつポアの累積個数頻度が計算できる。

具体的には実験的に決定される断面直径の分布およびポア径の分布を連続的な関数として考えるのではなく、不連続な大きさの級間 (Cell) に分け、各級区間内のポアは同じ直径 (平均径) を持つものと考えて、(7)の計算を行う。そして記号を次のように定義する。

粒子径および断面径： d (1)~ d (2), d (2)~ d (3), ………; d (n)~ d (n+1)
(μm)

各級間の平均径： d C(1), d C(2) ……………, d C(n)
(μm)

各級間の断面個数頻度： n (1), n (2)……………, n (n)
(No/cm²・μm)

各級間の断面個数： FN(1), FN(2)……………, FN(n)
(No/cm²)

各級間のポア個数頻度： N(1), N(2)……………, N(n)
(No/cm³・μm)

各級間のポア個数： PD(1), PD(2)……………, PD(n)
(No/cm³)

累積ふるい上ポア数： CPD(1), CPD(2)……………, CPD(n)
(No/cm³)

$$\begin{aligned} HUF(i, j) &= \frac{1}{\sqrt{d_c(j)^2 - d(i)^2}} \cdot \frac{2}{\pi} \dots\dots (j \geq i) \\ &= 0 \dots\dots (j < i) \end{aligned}$$

こうすると、(7)式の右辺は次のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{d(i)}^{d_c(n)} N(x) dx &= \sum_{j=i}^n N(i) \cdot \{d(j+1) - d(j)\} \\ &= N(i) \{d(i+1) - d(i)\} + \dots\dots + N(n) \{d(n+1) - d(n)\} \\ &= PD(i) + PD(i+1) + \dots\dots + PD(n) \\ &= CPD(i) \end{aligned}$$

また(7)式の左辺は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} \int_{d(i)}^{d_c(n)} \frac{n(y)}{\sqrt{y^2 - d(i)^2}} dy &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=i}^n \frac{n(j)\{d(j+1) - d(j)\}}{\sqrt{d_c(j)^2 - d(i)^2}} \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{j=i}^n \frac{FN(j)}{\sqrt{d_c(j)^2 - d(i)^2}} \\ &= \sum_{j=i}^n FN(j) \cdot HUF(i, j) \end{aligned}$$

従って

$$CPD(i) = \sum_{j=i}^n FN(j) \cdot HUF(i, j) \quad (8)$$

$$PD(i) = CPD(i+1) - CPD(i) \quad (9)$$

となり、各級間の断面個数から累積ふるい上ポア数が計算でき、その値から各級間の単位体積中のポア個数が計算できる。

(b) 単位体積中のポア径個数分布を計算する場合の偏差の計算

W. L. Nicholson, K. R. Merckx の理論⁵⁾に基づいてこの計算を行う。

記号を次のように定義する。

ρ_i : i 番目のポアのポア密度 $\rho_i = (1/\tau) \mu_i$

μ_i : i 番目のポアの試料中の個数

τ : 試料体積

F_i : (i 番目のポアが断面上に現われる確率) $\times \tau / A$

A : 断面積

M_i : i 番目のポアのうちの断面上にあらわれた個数, $M_i = x$ ($x = 0.1 \dots \mu_i$) の確率は 2 項分布に従う

m_{ji} : 断面上に現われた i 番目のポアのうちの断面上では j 番目の大きさに観測された個数 ($m_{ji} = 0 \quad j > i$)

P_{ji} : 断面上に現われた i 番目のポアのうちの断面上では j 番目の大きさに観測される確率

Q_{ji} : i 番目の粒子が断面上に現われそれが j 番目の大きさに観測される確率

$Q_{ji} = P_{ji} \cdot F_i$, Q_{ji} の行列を \bar{Q} とする。

\bar{CPD} : 単位体積中の累積ふるい上ポア個数たて行列

\bar{m} : 断面上で観測されたポア断面径個数たて行列

$$\bar{m} = \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_\ell \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} + m_{12} + m_{13} + \dots + m_{1k} \\ m_{21} + m_{22} + \dots + m_{2k} \\ \vdots \\ m_{\ell 1} + m_{\ell 2} + \dots + m_{\ell k} \end{bmatrix}$$

\overline{FN} : 単位面積中のポア断面径個数たて行列

$$\overline{FN} = \frac{1}{A} \cdot \bar{m}$$

なお,

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T$$

$$D(\bar{x}) = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & x_2 & 0 & & 0 \\ \vdots & & 0 & x_3 & \\ & & & & \ddots \\ 0 & & & & 0 & x_n \end{bmatrix} \text{である。}$$

以上のように記号を定義すると, \bar{m} , $\bar{\rho}$, の期待値, 分散は次のようになる。

$$\begin{cases} E(\bar{m}) = A/\tau \cdot \bar{Q} \cdot \bar{\mu} = A \cdot \bar{Q} \cdot \bar{\rho} & (10) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{Var}(\bar{m}) = (A/\tau) D(\bar{Q} \cdot \bar{\mu}) - A^2/\tau^2 \cdot \bar{Q} \cdot D(\bar{\mu}) \bar{Q}^T & (11) \end{cases}$$

$$\begin{cases} E(\bar{\rho}) = 1/A \cdot \bar{Q}^{-1} \cdot \bar{m} = \bar{Q}^{-1} \cdot \overline{FN} & (12) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{Var}(\bar{\rho}) = \frac{1}{A} \bar{Q}^{-1} \cdot D(\bar{Q}, \hat{\rho}) \bar{Q}^{-1T} - \frac{1}{\tau} D(\hat{\rho}) & (13) \end{cases}$$

ここで行列 \bar{Q} は定義から $\begin{bmatrix} \text{E} \\ 0 \end{bmatrix}$ という形である。

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & & 1 \end{bmatrix} \text{とすれば,}$$

累積ふるい上ポア個数行列 \overline{CPD} とポア個数行列 $\bar{\rho}$ との間には次の関係がある。

$$\overline{CPD} = \bar{H} \cdot \bar{\rho} \tag{14}$$

\overline{FN} から \overline{CPD} を推定するのに(8)式の \overline{HUF} という係数行列を使うので

$$E(\overline{CPD}) = \overline{HUF} \cdot \overline{FN} \tag{15} \text{となる。}$$

(12), (14), (15) 式から

$$E(\overline{CPD}) = \bar{H} \cdot E(\hat{\rho}) = \bar{H} \cdot \bar{Q}^{-1} \cdot \overline{FN} = \overline{HUF} \cdot \overline{FN}$$

であるから

\overline{HUF} , \bar{Q} , \bar{H} の間には

$$\begin{cases} \overline{HUF} = \bar{H} \cdot \bar{Q}^{-1} \\ \bar{Q}^{-1} = \bar{H}^{-1} \cdot \overline{HUF} \\ \bar{Q} = \bar{H} \cdot \overline{HUF}^{-1} \end{cases}$$

の関係がある

なお、ここで \overline{HUF} および \bar{Q} は

$$\begin{bmatrix} \overline{HUF} & & & \\ & \bar{Q} & & \\ & & \overline{HUF} & \\ & & & \bar{Q} \end{bmatrix}$$

という形の行列である。

従って、

$$\begin{aligned} V_{ar}(\hat{\rho}) &= 1/A \cdot \bar{Q}^{-1} \cdot D(\bar{Q} \cdot \hat{\rho}) \bar{Q}^{-1T} - \frac{1}{\tau} D(\hat{\rho}) \\ &= 1/A \cdot \bar{H}^{-1} \cdot \overline{HUF} \cdot D(\bar{Q} \cdot \hat{\rho}) \overline{HUF}^T \cdot \bar{H}^{-1T} - \frac{1}{\tau} D(\hat{\rho}) \\ &= 1/A^2 \cdot \bar{H}^{-1} \cdot \overline{HUF} \cdot D(\bar{m}) \cdot \overline{HUF} \cdot \bar{H}^{-1T} - \frac{1}{\tau} D(\hat{\rho}) \end{aligned} \tag{15}$$

となる。

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \bar{Q} & & \\ & & 1 & \\ & & & \bar{Q} \end{bmatrix} \text{ であるから } \bar{H}^{-1} \text{ は } \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ & \bar{Q} & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \bar{Q} & \\ 0 & & & & 1 \end{bmatrix}$$

という行列であり、次の関係が成立する。

$$\begin{aligned} \{H^{-1}(a)H^{-1T}\}_{ij} &= \sum_k H_{ik}^{-1} \left\{ \sum_{\ell} a_{k\ell} \cdot H_{\ell i}^{-1T} \right\} \begin{pmatrix} \ell=j & 1 \\ \ell=j+1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \sum_k H_{ik}^{-1} (a_{kj} - a_{k,j+1}) \begin{pmatrix} k=i & 1 \\ k=i+1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= (a_{i,j} - a_{i,j+1}) - (a_{i+1,j} - a_{i+1,j+1}) \\ &= a_{i,j} - a_{i,i+1,j} - a_{i+1,j} + a_{i+1,j+1} \end{aligned} \tag{16}$$

$$\{ H^{-1}(a) H^{-1T} \}_{ii} = a_{ii} - a_{i,i+1} - a_{i+1,i} + a_{i+1,i+1} \quad (17)$$

したがって、(15)式において次の関係が成立する。

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2} \{ HUF \cdot D(m) \cdot HUF^T \}_{i,j} &= \frac{1}{A^2} \sum_k HUF_{ik} \left\{ \sum_{\ell} D(m)_{k\ell} \cdot HUF_{\ell i}^T \right\} \\ &= \frac{1}{A^2} \sum_k HUF_{ik} \cdot m_k \cdot HUF_{ki}^T \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2} \{ HUF \cdot D(m) \cdot HUF^T \}_{i,i} &= \frac{1}{A^2} \sum_k HUF_{ik} \cdot m_k \cdot HUF_{ki}^T \\ &= \frac{1}{A^2} \sum_{k \geq i} HUF_{ik}^2 \cdot m_k \\ &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i} HUF_{ik}^2 \cdot FN_k \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2} \{ HUF \cdot D(m) \cdot HUF^T \}_{i+1,i+1} &= \frac{1}{A^2} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i+1,k}^2 \cdot m_k \\ &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i+1,k}^2 \cdot FN_k \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2} \{ HUF \cdot D(m) \cdot HUF^T \}_{i,i+1} &= \frac{1}{A^2} \sum_k HUF_{ik} \cdot m_k \cdot HUF_{k,i+1}^T \\ &= \frac{1}{A^2} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i,k} \cdot HUF_{i+1,k} \cdot m_k \\ &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i,k} \cdot HUF_{i+1,k} \cdot FN_k \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{A^2} \{ HUF \cdot D(m) \cdot HUF^T \}_{i+1,i} &= \frac{1}{A^2} \sum_k HUF_{i+1,k} \cdot m_k \cdot HUF_{k,i}^T \\ &= \frac{1}{A^2} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i+1,k} \cdot m_k \cdot HUF_{i,k} \\ &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i+1} HUF_{i+1,k} \cdot HUF_{i,k} \cdot FN_k \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \text{また } \{ D(\varnothing) \}_{ii} &= \sum_{k \geq i} CPD_{ik} - \sum_{k \geq i+1} CPD_{i+1,k} \\ &= \sum_{k \geq i} HUF_{ik} \cdot FN_k - \sum_{k \geq i+1} HUF_{i+1,k} \cdot FN_k \end{aligned} \quad (23)$$

(17) 式の関係を使って (15) 式に (18) ~ (23) 式を代入すると

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\rho})_{ii} &= \frac{1}{A} \left\{ \sum_{k \geq i} \text{HUF}_{ik}^2 \cdot \text{FN}_k + \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i+1,k}^2 \cdot \text{FN}_k \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{\tau} \left\{ \sum_{k \geq i} \text{HUF}_{i,k} \cdot \text{FN}_k + \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i+1,k} \cdot \text{FN}_k \right\} \\
 &\quad - \frac{2}{A} \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i,k} \cdot \text{HUF}_{i+1,k} \cdot \text{FN}_k + \frac{2}{\tau} \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i+1,k} \cdot \text{FN}_k \\
 &= \text{Var}(\text{CPD})_{ii} + \text{Var}(\text{CPD})_{i+1,i+1} - \frac{2}{A} \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i,k} \cdot \text{HUF}_{i+1,k} \cdot \text{FN}_k \\
 &\quad + \frac{2}{\tau} \sum_{k \geq i+1} \text{HUF}_{i+1,k} \cdot \text{FN}_k \tag{24}
 \end{aligned}$$

となって $\bar{\rho}$ の分散が求まる。

一方 CPD の分散は次のようにして求める。

$\widehat{\text{CPD}} = \bar{H} \cdot \hat{\rho}$ より分散, 共分散行列の関係を用いて

$$\begin{aligned}
 \widehat{\text{Var}}(\widehat{\text{CPD}}) &= \bar{H} \cdot \widehat{\text{Var}}(\hat{\rho}) \cdot \bar{H}^T \\
 &= \bar{H} \left\{ \frac{1}{A^2} \bar{H}^{-1} \cdot \overline{\text{HUF}} \cdot \text{D}(\bar{m}) \overline{\text{HUF}}^T \cdot \bar{H}^{-1T} - \frac{1}{\tau} \text{D}(\hat{\rho}) \right\} \bar{H}^T \\
 &= \frac{1}{A} \cdot \overline{\text{HUF}} \cdot \text{D}(m) \cdot \overline{\text{HUF}} - \frac{1}{\tau} \bar{H} \cdot \text{D}(\hat{\rho}) \cdot \bar{H}^T \\
 &= \frac{1}{A} \cdot \overline{\text{HUF}} \cdot \text{D}(\text{FN}) \cdot \overline{\text{HUF}} - \frac{1}{\tau} \bar{H} \text{D}(\hat{\rho}) \cdot \bar{H}^T
 \end{aligned}$$

したがって,

$$\begin{aligned}
 \widehat{\text{Var}}(\widehat{\text{CPD}})_{ii} &= \frac{1}{A} \sum_k \text{HUF}_{ik} \left\{ \sum_{\ell} (\text{FN})_{k\ell} \cdot \text{HUF}_{\ell i} \right\} \\
 &\quad - \frac{1}{\tau} \sum_k \text{H}_{ik} \left\{ \sum_{\ell} \text{D}(\rho)_{k\ell} \cdot \text{H}_{\ell i}^T \right\} \\
 &= \frac{1}{A} \sum_k \text{HUF}_{ik} \cdot \text{FN}_k \cdot \text{HUF}_{ki} - \frac{1}{\tau} \sum_k \text{H}_{ik} \cdot \rho_k \cdot \text{H}_{ki}^T \\
 &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i} \text{HUF}_{ik}^2 \cdot \text{FN}_k - \frac{1}{\tau} \sum_{k \geq i} \rho_k \\
 &= \frac{1}{A} \sum_{k \geq i} \text{HUF}_{ik}^2 \cdot \text{FN}_k - \frac{1}{\tau} \sum_{k \geq i} \text{HUF}_{ik} \cdot \text{FN}_k \tag{25}
 \end{aligned}$$

となって CPD の分散が求まる。

このようにして、(24)式、(25)式から
単位面積中のポア断面径個数から、単位体積中の累積ふるい上ポア個数および各級間のポア
個数を推定する際の偏差が計算できる。

(c) ポア体積率, ポア平均径, ポア比表面積, ペレット密度の計算

(i) W. L. Nicholson の理論による方法⁶⁾

次のように記号を定義する。

$$\left\{ \begin{array}{l} x : \text{ポア直径} (0 < x \leq x_u) \\ y : \text{観測される断面径} (y_o \leq y \leq y_u) \\ f(x) : \text{直径 } x \text{ のポアが観測される確率} \\ \mu(x) : \text{直径が } x \text{ 以下のポアの累積個数} \\ d\mu(x) = \mu(x) - \mu(x-) : \text{直径が } x \text{ である級間でのポア個数} \\ N(x) : \text{直径が } x \text{ 以下のポアで観測されたものの累積個数} \\ dN(x) = N(x) - N(x-) : \text{直径が } x \text{ である級間での観測されたポア個数} \\ n(y) : \text{断面径が } y \text{ 以下の大きさに観測されたポア累積個数} \\ dn(y) = n(y) - n(y-) : \text{断面径が } y \text{ として観測された各級間のポア個数} \\ G(y|x) : \text{観測面上に表われている } x \text{ の大きさのポアが } y \text{ 以下の断面径で観測される確率} \\ g(x) : \text{全体のポア特性 (総個数, 比表面積, ポア体積等) に対する直径が } x \text{ であるポア} \\ \quad \text{の寄与関数} \\ \theta = \int_0^{x_u} g(x) d\mu(x) : \text{linear or additive property.} \end{array} \right.$$

ある直径 x_i のポアに着目すると, 観測されたポア個数 $dN(x_i)$ は, 試料中の個数 $d\mu(x_i)$ と観測確率 $f(x_i)$ の二項分布に従う。

二項分布の性質から

$$E\{dN(x_i)\} = f(x_i) \cdot d\mu(x_i)$$

$$V_{ar}\{dN(x_i)\} = f(x_i) \cdot \{1 - f(x_i)\} \cdot d\mu(x_i)$$

$$E\{N(x)\} = \sum f(x_i) \cdot d\mu(x_i) = \int_0^{x_u} f(x) d\mu(x)$$

$$V_{ar}\{N(x)\} = \sum f(x_i) \{1 - f(x_i)\} d\mu(x_i) = \int_0^{x_u} f(x) \{1 - f(x)\} d\mu(x)$$

となる。

また, $x \leq x'$ の時, $N(x)$ と $N(x')$ の共分散は,

$$\begin{aligned} C_{ov}\{N(x), N(x')\} &= E\left[\left\{\sum_{i=1}^{\ell} dN(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} E(dN(x_i))\right\}\left\{\sum_{i=1}^k dN(x_i) - \sum_{i=1}^k E(dN(x_i))\right\}\right] \\ &= E\left[\left\{\sum_{i=1}^{\ell} dN(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} E(dN(x_i))\right\}\left\{\sum_{i=1}^{\ell} dN(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} E(dN(x_i))\right\}\right] + \\ &= E\left[\left\{\sum_{i=1}^{\ell} dN(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} E(dN(x_i))\right\}\left\{\sum_{i=\ell+1}^k dN(x_i) - \sum_{i=\ell+1}^k E(dN(x_i))\right\}\right] \\ &= E\left[\left\{\sum_{i=1}^{\ell} dN(x_i) - \sum_{i=1}^{\ell} E(dN(x_i))\right\}^2\right] \\ &= V_{ar}\{N(x)\} \quad \text{となる。} \end{aligned}$$

$\bar{\theta}\{N(\cdot)\} = \int_0^{x_u} \{g(x)/f(x)\} dN(\cdot) = \Sigma \{g(x_i)/f(x_i)\} dN(x_i)$ とすると各 $dN(x_i)$ は $d\mu(x_i)$ と確率 $f(x_i)$ の 2 項分布にしたがうので、

$E[\bar{\theta}\{N(\cdot)\}] = \Sigma \{g(x_i)/f(x_i)\} \cdot f(x_i) \cdot d\mu(x_i) = \int_0^{x_u} g(x) d\mu(x)$ となり、
 $\bar{\theta}\{N(\cdot)\}$ は不偏推定値であることがわかる。

また推定値の分散の不偏推定値は次のようになる。

$$\begin{aligned} \text{Var}[\bar{\theta}\{N(\cdot)\}] &= \Sigma [\{g(x_i)/f(x_i)\}^2 f(x_i) \{1-f(x_i)\}] d\mu(x_i) \\ &= \int_0^{x_u} \frac{\{g(x)\}^2}{f(x)} \{1-f(x)\} d\mu(x) \end{aligned}$$

$$\widehat{\text{Var}}[\theta\{N(\cdot)\}] = \int_0^{x_u} \left\{ \frac{g(x)}{f(x)} \right\}^2 \{1-f(x)\} dN(x)$$

$h(y)$ を次のように定義すれば、

$$\begin{cases} \int_{y_0}^{y_u} h(y) \cdot dG(y|x) = g(x)/f(x) & (26) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \bar{\theta}\{n(\cdot)\} = \int_{y_0}^{\infty} h(y) dn(y) & (27) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} E[\theta\{\hat{n}(\cdot)\}] &= E\left[\Sigma_i \left\{ dN(x_i) \int_{y_0}^{y_u} h(y) dG(y|x_i) \right\}\right] \\ &= E\left[\Sigma_i \left\{ dN(x_i) \frac{g(x_i)}{f(x_i)} \right\}\right] \\ & \qquad \qquad \qquad (dN(x) = f(x) \cdot d\mu(x)) \\ &= \Sigma_i g(x_i) d\mu(x_i) \\ &= \int g(x) d\mu(x) \end{aligned}$$

となり、 $\hat{\theta}\{n(\cdot)\}$ が不偏推定値であることがわかる。

$$\int_{y_0}^{y_u} h(y) dG(y|x) = g^2(x)/f(x) \quad (28)$$

を満足するように $k(y)$ を定義する。

$$\begin{aligned} \text{Var}[\theta\{n(\cdot)\}] &= \text{Var}\left[\Sigma_j \Sigma_i h(y_i) dn(y_i|x_j)\right] \\ &= \Sigma_j \left[\text{Uar}\left\{ \Sigma_i h(y_i) dn(y_i|x_j) \right\} \right] \end{aligned}$$

ここで二項分布の性質および $dn(y_i|x_j) = f(x_j) \cdot dG(y_i|x_j) \cdot d\mu(x_j)$ から、

$$\text{Var}\left\{ \Sigma_i h(y_i) dn(y_i|x_j) \right\}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_i h(y_i)^2 \cdot f(x_j) \cdot dG(y_i | x_j) \{ 1 - f(x_j) \cdot dG(y_i | x_j) \} d\mu(x_j) \\
 &\quad - \sum_{i \neq i'} \sum_{i'} f(x_j)^2 h(y_i) h(y_{i'}) dG(y_i | x_j) dG(y_{i'} | x_j) \cdot d\mu(x_j) \\
 &= \sum_i h(y_i)^2 dG(y_i | x_j) d\mu(x_j) f(x_j) - \left\{ \sum_i h(y_i) dG(y_i | x_j) \right\}^2 d\mu(x_j) f(x_j)^2 \\
 &= \sum_i h(y_i)^2 \cdot dn(y_i | x_j) - \left\{ g(x_j) / f(x_j) \right\}^2 \cdot \frac{dN(x_j)}{f(x_j)} \cdot f(x_j)^2
 \end{aligned}$$

従って、

$$\begin{aligned}
 V_{\hat{\theta}} [\hat{\theta} \{ n(\cdot) \}] &= \sum_j \left[\sum_i \left\{ h(y_i)^2 \cdot dn(y_i | x_j) - \frac{\{ g(x_j) \}^2}{f(x_j)} \cdot dN(x_j) \right\} \right] \\
 &= \sum_i h(y_i)^2 \cdot dn(y_i) - \sum_j \left\{ \frac{g(x_j)^2}{f(x_j)} \cdot dN(x_j) \right\} \\
 &= \sum_i h(y_i)^2 \cdot dn(y_i) - \sum_j \left[\sum_i k(y_i) dG(y_i | x_j) dN(x_j) \right] \\
 &= \sum_i h(y_i)^2 \cdot dn(y_i) - \sum_i k(y_i) dn(y_i) \\
 &= \int_{y_0}^{\infty} \{ h^2(y) - k(y) \} dn(y) \tag{29}
 \end{aligned}$$

となる。

球状ポアがランダムに分散しており、それがある断面で切断される場合を考える。

図-4に示すように、断面径の測定限界径を y_0 とすれば直径 x のポアが観測される確率は次のようになる。

$$f(x) = \frac{\Delta V(x)}{V} = \begin{cases} A \sqrt{x^2 - y_0^2} / V \cdots (y_0 \leq x \leq x_u) \\ 0 \cdots (0 < x < y_0) \end{cases} \tag{30}$$

$$G(g|x) = \frac{\int_{\frac{1}{2}\sqrt{x^2 - y_0^2}}^{\frac{1}{2}\sqrt{x^2 - y^2}} \frac{dH}{\sqrt{x^2 - y_0^2}} = \begin{cases} 0 \cdots (y \leq y_0) \\ 1 - \sqrt{(x^2 - y^2) / (x^2 - y_0^2)} \cdots (y_0 < y \leq x) \\ 1 \cdots (x < y) \end{cases} \tag{31}$$

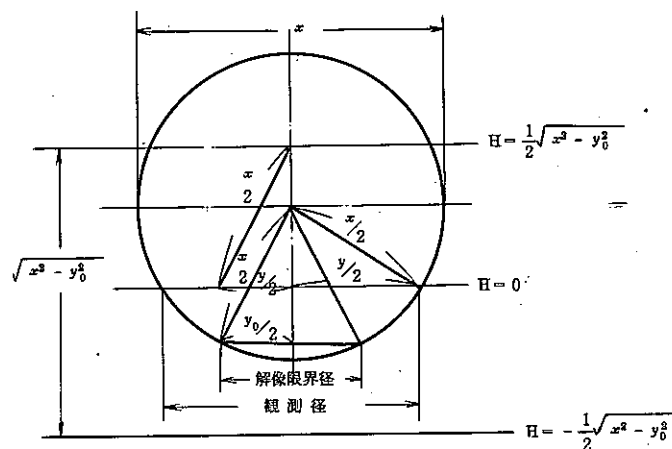


図-4

ポア特性への個々のポアの寄与関数 $g(x)$ を次のように置く

$$g(x) = Mx^r \quad (32)$$

ここで M , r は定数であり

ポア個数を計算する場合には

$$r=0, M=1/V$$

ポア直径を計算する場合には

$$r=1, M=1/V$$

ポア比表面積を計算する場合には

$$r=2, M=\pi/V, \left(4\pi \cdot \left(\frac{x}{2}\right)^2\right)/V = \frac{\pi}{V} x^2$$

ポア体積を計算する場合には

$$r=3, M=\frac{\pi}{6V}, \left(\frac{4}{3}\pi \left(\frac{x}{2}\right)^3\right)/V = \frac{\pi}{6V} x^3$$

である。

(30), (31), (32)式を(27), (28)式へ代入すると,

$$\int_{y_0}^x \frac{h(y) \cdot y}{\sqrt{x^2 - y^2}} dy = \left(\frac{V}{A}\right) Mx^r \quad (33)$$

$$\int_{y_0}^x \frac{k(y) \cdot y}{\sqrt{x^2 - y^2}} dy = \left(\frac{V}{A}\right) (Mx^r)^2 \quad (34)$$

(33)式を解くと

$$h(y) = \frac{2VM}{A\pi} \left\{ r y^{r-1} \int_{y_0/y}^1 \frac{w^{r-1}}{\sqrt{1-w^2}} dw + \frac{y_0^r}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\}$$

となる。

したがって,

$$r=0 \text{ の時 } h(y) = \frac{2VM}{A\pi} \times \frac{1}{\sqrt{y - y_0^2}} = \frac{2}{A\pi} \times \frac{1}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} r=1 \text{ の時 } h(y) &= \frac{2VM}{A\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \frac{y_0}{y} + \frac{y_0}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} \\ &= \frac{2}{A\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \frac{y_0}{y} + \frac{y_0}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

$r=2$ の時

$$h(y) = \frac{2VM}{A\pi} \left\{ 2y \int_{y_0/y}^1 \frac{w}{\sqrt{1-w^2}} dw + \frac{y_0}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\}$$

$$= \frac{2}{A} \left[2y \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right] \quad (37)$$

$r = 3$ の時

$$h(y) = \frac{1}{4} \pi y^2 / A - \left(\frac{y^2}{2A}\right) \sin^{-1} \left(\frac{y_0}{y}\right) + \{y_0(3y^2 - y_0^2)\} / \{12A\sqrt{y^2 - y_0^2}\} \quad (38)$$

次に $k(y)$ の値は(33), (34)式から次のようになる。

$r = 0$ の時

$$k(y) = h(y)_{r=0} \times M_1 = \frac{2}{A\pi V} \times \frac{1}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \quad (39)$$

$r = 1$ の時

$$k(y) = h(y)_{r=2} \times \frac{M_1^2}{M_2} = \frac{2}{A\pi V} \left\{ 2y \sqrt{1 - \frac{y_0^2}{y^2}} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} \quad (40)$$

$r = 2$ の時

$$\begin{aligned} k(y) &= h(y)_{r=4} \times \frac{M_2^2}{M_4} \\ &= \frac{2\pi}{AV} \left[4y^3 \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2}\right)^3 \right] + \frac{y_0^4}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \end{aligned} \quad (41)$$

$r = 3$ の時

$$\begin{aligned} k(y) &= h(y)_{r=6} \times \frac{M_3^2}{M^6} \\ &= \pi (16y^2 - 8y^4 y_0^2 - 2y^2 y_0^4 - y_0^6) / \{45AV\sqrt{y^2 - y_0^2}\} \end{aligned} \quad (42)$$

したがって、(27)式 $\theta\{n(\cdot)\} = \int_{y_0}^{\infty} h(y) dn'(y)$ に(35)~(38)式を代入すればポア総個数、ポア総直径、ポア総表面積、ポア総体積が計算できる。

また、(29)式 $V_{ar}[\theta\{n(\cdot)\}] = \int_{y_0}^{\infty} \{h^2(y) - k(y)\} dn(y)$ に(35)~(42)式を代入すれば総個数、総直径、総表面積、総体積の偏差が計算できる。

即ち、単位面積当りの各級間内の観測個数を $AN(i) (= \frac{dn(y_i)}{A})$ とおくと、次のようになる。

ポア総数 (THZ)

$$\begin{aligned} \text{THZ} &= \int_{y_0}^{\infty} h(y)_{r=0} dn(y) = \int_{y_0}^{\infty} \frac{2}{A\pi} \times \frac{1}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} dn(y) \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{i=1}^n \frac{AN(i)}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \end{aligned}$$

ポア総数の偏差 (VTHZ)

$$\begin{aligned}
VTHZ &= \int_{y_0}^{\infty} (h^2(y) - k(y)) dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \left\{ \left(\frac{2}{A\pi \sqrt{y^2 - y_0^2}} \right)^2 - \frac{2}{AV\pi \sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} dn(y) \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{1}{A} \left(\frac{2}{\pi \sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right)^2 AN(i) - \sum_{i=1}^n \frac{2AN(i)}{V\pi \sqrt{y_i^2 - y_0^2}}
\end{aligned}$$

ポア総直径 (TH1)

$$\begin{aligned}
TH1 &= \int_{y_0}^{\infty} h(y) dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \frac{2}{A\pi} \left\{ \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \frac{y_0}{y} + \frac{y_0}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} dn(y) \\
&= \sum_{i=1}^n \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \frac{y_0}{y_i} + \frac{2}{\pi} \frac{y_0}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right\} AN(i)
\end{aligned}$$

ポア総直径偏差 (VTH1)

$$\begin{aligned}
VTH1 &= \int_{y_0}^{\infty} (h^2(y) - k(y)) dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \left\{ \frac{2}{A\pi} \left(\frac{2}{\pi} - \sin^{-1} \frac{y_0}{y} + \frac{y_0}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right) \right\}^2 dn(y) \\
&\quad - \int_{y_0}^{\infty} \frac{2}{A\pi V} \left\{ 2y \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} dn(y) \\
&= \sum_{i=1}^n \left(1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \frac{y_0}{y_i} + \frac{2}{\pi} \frac{y_0}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right)^2 \frac{AN(i)}{A} \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \frac{2}{V\pi} \left\{ 2y_i \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y_i}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right\} AN(i)
\end{aligned}$$

ポア総表面積 (SSA)

$$\begin{aligned}
SSA &= \pi \cdot TH2 = \int_{y_0}^{\infty} h(y) \cdot dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \frac{2}{A} \left[2y \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right] dn \\
&= \sum_{i=1}^n 2 \left[2\sqrt{y_i^2 - y_0^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right] AN(i)
\end{aligned}$$

ポア総表面積の偏差 (VSSA)

$$\begin{aligned}
VSSA &= \pi^2 \cdot VTH2 = \int_{y_0}^{\infty} \left\{ h^2(y) - k(y) \right\} dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \left[\frac{2}{A} \left\{ 2y \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right\} \right]^2 dn(y)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \int_{y_0}^{\infty} \frac{2\pi}{AV} \left[4y^3 \left\{ \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y}\right)^2} \right)^3 \right\} + \frac{y_0^4}{\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right] dn(y) \\
& = \sum_{i=1}^n 2 \left\{ 2y_i \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y_i}\right)^2} + \frac{y_0^2}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right\}^2 AN(i) \\
& - \sum_{i=1}^n \frac{2\pi}{V} \left[4y_i^3 \left\{ \sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y_i}\right)^2} - \frac{1}{3} \left(\sqrt{1 - \left(\frac{y_0}{y_i}\right)^2} \right)^3 \right\} + \frac{y_0^4}{\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right] dn(y)
\end{aligned}$$

ポア総体積 VF

$$\begin{aligned}
VF &= \frac{\pi}{6} TH3 = \int_{y_0}^{\infty} \left(\frac{h}{r=3}(y) \right) dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \frac{1}{A} \left[\frac{\pi y^2}{4} - \frac{y^2}{2} \sin^{-1} \left(\frac{y_0}{y} \right) + \frac{y_0(3y^2 - y_0^2)}{12\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right] dn(y) \\
&= \sum_{i=1}^n \left[\frac{\pi y_i^2}{4} - \frac{y_i^2}{2} \sin^{-1} \left(\frac{y_0}{y_i} \right) + \frac{y_0(3y_i^2 - y_0^2)}{12\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right] AN(i)
\end{aligned}$$

ポア総体積の偏差

$$\begin{aligned}
VVF &= \left(\frac{\pi}{6} \right)^2 \cdot VTH3 = \int_{y_0}^{\infty} \left\{ \frac{h}{r=3}(y) - \frac{k}{r=3}(y) \right\} dn(y) \\
&= \int_{y_0}^{\infty} \left[\frac{1}{4} \pi y^2 - \frac{y^2}{2} \sin^{-1} \left(\frac{y_0}{y} \right) + \frac{y_0(3y^2 - y_0^2)}{12\sqrt{y^2 - y_0^2}} \right]^2 \frac{dn(y)}{A^2} \\
&\quad - \int_{y_0}^{\infty} \frac{\pi(16y^2 - 8y^4 y_0 - 2y^2 y_0^4 - y_0^6)}{45V\sqrt{y^2 - y_0^2}} \frac{dn(y)}{A} \\
&= \sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{4} \pi y_i^2 - \frac{y_i^2}{2} \sin^{-1} \left(\frac{y_0}{y_i} \right) + \frac{y_0(3y_i^2 - y_0^2)}{12\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} \right]^2 \frac{AN(i)}{A} \\
&\quad - \sum_{i=1}^n \frac{\pi(16y_i^2 - 8y_i^2 y_0^2 - 2y_i^2 y_0^4 - y_0^6)}{45V\sqrt{y_i^2 - y_0^2}} AN(i)
\end{aligned}$$

なお、ポア平均径 PSM1，およびその偏差 VPSM1 はポア総個数および総直径から次式で求める。

$$PSM1 = TH1 / THZ$$

$$VPSM1 = VTH1 / (THZ)^2$$

(ロ) 各級間のポア個数および平均径から求める方法

2-(a)の(9)式から求めた各級間の学位体積中のポア個数 PD(i)および各級間の平均径 dc(i)から、ポア体積分布、ポア体積率、ペレット密度、ポア平均径の計算を行う。

・ポア体積分布 PV(i)

$$PV(i) = PD(i) \times dc(i)^3 \times \frac{\pi}{6}$$

- ・ポア体積率 VF

$$VF = \frac{\sum_{i=1}^n PV(i)}{100}$$

- ・ペレット密度 DENS2

$$DENS2 = 100 - VF$$

- ・ポア平均径 PSM2

$$PSM2 = \frac{\sum_{i=1}^n PD(i) \cdot DC(i)}{\sum_{i=1}^n PD(i)}$$

(d) 最小二乗法によるポア断面径個数分布曲線のフィッティング

試料ペレット中のポア分布を知るには、十倍程度のマクロ写真から数千倍までのマイクロ写真までが必要である。

各々の倍率の金相写真について、画像解析装置を用いて、いろいろな大きさのポア断面径を持つ個数を測定し、ポア断面径個数頻度分布を両対数紙にプロットすると、図-5のような曲線が各倍率について得られる。

これらの観測データを最小二乗法を用いて、 $\log F = A + B \log D + C(\log D)^2$ という形の二次曲線をあてはめ、最適個数頻度を計算する。

ここで F は断面個数頻度であり D は断面平均径である。

$$\log F_i = Y_i, \quad \log D_i = X_i, \quad (i=1 \cdots N) \text{ とすれが,}$$

正規方程式は,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N Y_i = A \cdot N + B \sum_{i=1}^N X_i + C \sum_{i=1}^N X_i^2 \\ \sum_{i=1}^N X_i Y_i = A \sum_{i=1}^N X_i + B \sum_{i=1}^N X_i^2 + C \sum_{i=1}^N X_i^3 \\ \sum_{i=1}^N X_i^2 Y_i = A \sum_{i=1}^N X_i^2 + B \sum_{i=1}^N X_i^3 + C \sum_{i=1}^N X_i^4 \end{cases} \text{ である。}$$

この方程式を解いて、A、B、Cの値を決める。

$$D_0 = \begin{vmatrix} N & \sum X_i & \sum X_i^2 \\ \sum X_i & \sum X_i^2 & \sum X_i^3 \\ \sum X_i^2 & \sum X_i^3 & \sum X_i^4 \end{vmatrix}, \quad D_1 = \begin{vmatrix} \sum Y_i & \sum X_i & \sum X_i^2 \\ \sum X_i Y_i & \sum X_i^2 & \sum X_i^3 \\ \sum X_i^2 Y_i & \sum X_i^3 & \sum X_i^4 \end{vmatrix}$$

$$D_2 = \begin{vmatrix} N & \sum Y_i & \sum X_i^2 \\ \sum X_i & \sum X_i Y_i & \sum X_i^3 \\ \sum X_i^2 & \sum X_i^2 Y_i & \sum X_i^4 \end{vmatrix}, \quad D_3 = \begin{vmatrix} N & \sum X_i & \sum Y_i \\ \sum X_i & \sum X_i^2 & \sum X_i Y_i \\ \sum X_i^2 & \sum X_i^3 & \sum X_i^2 Y_i \end{vmatrix}$$

$$A = D_1 / D_0$$

$$B = D_2 / D_0$$

$$C = D_3 / D_0$$

A, B, Cが決めれば, $\log F = A + B \log D + C(\log D)^2$ に各ポア級間の平均値 $d_c(i)$ を代入し, 最適のポア断面径個数頻度 $F(i)$ が求まる。

なお, 全領域を1つの二次曲線でフィッティングするには, 無理があるので, 三つの領域に分けてフィッティングを行った。また $D_0 \sim D_3$ の計算は倍精度で行なわないと正しい計算結果が得られないので注意する必要がある。

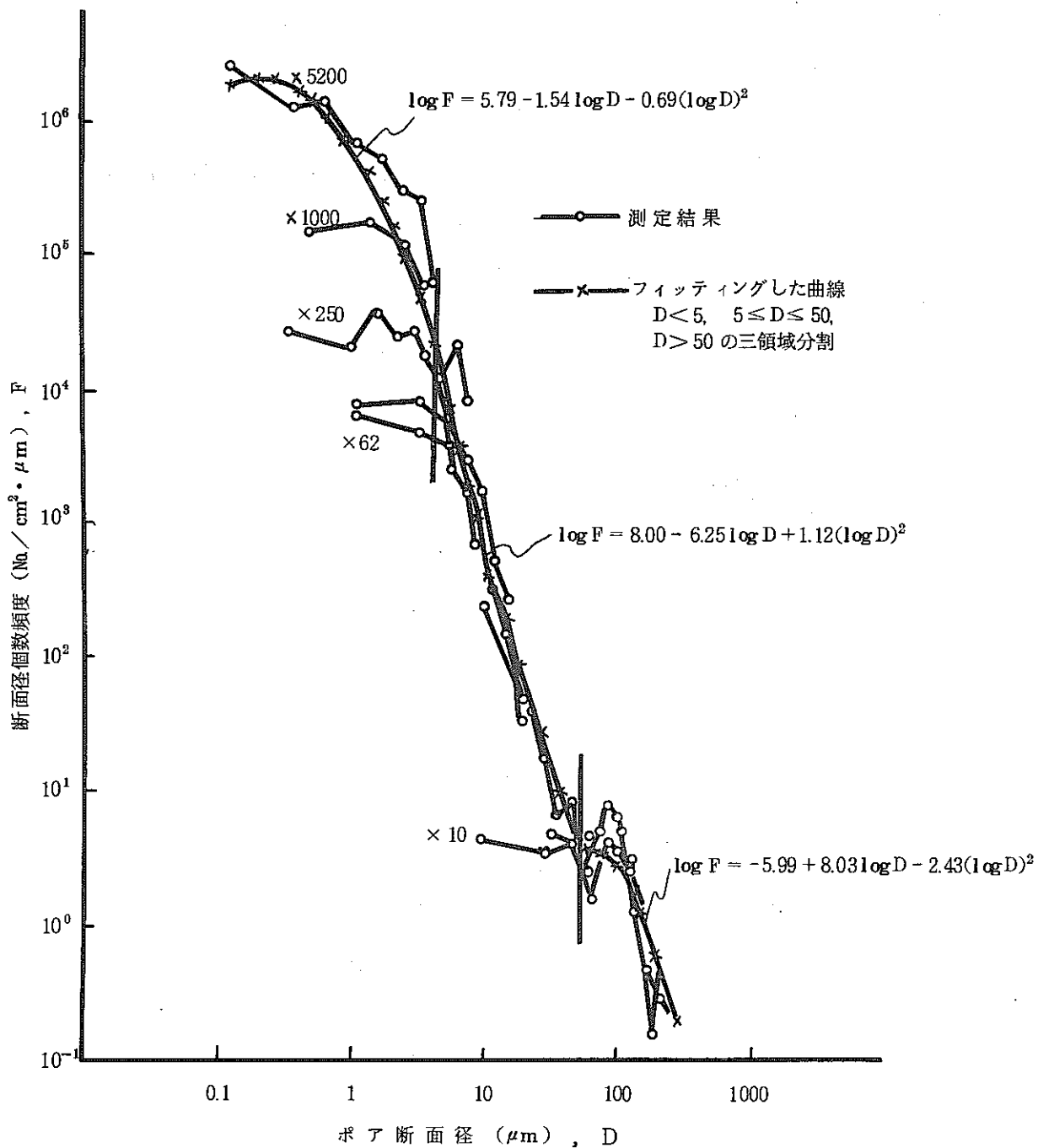


図5 ポア断面径個数頻度分布曲線

(e) 炉内焼きしまり量の推定計算

オプションとして、照射前のポア分布から Carlson のモデルおよび Stehle, Assmann のモデルを使って炉内焼きしまり量を計算するようなサブルーチンを加えた。

(イ) M. J. C. Carlson のモデル⁷⁾

ガス原子の再固溶によるポア径の減少と, f.p. ガス原子の捕獲によるポア径の増加によって、照射中のポア径は変化するとすれば、不変領域のポアの径の変化 (ΔD) は $\Delta D = K_1 I - K_2 I^2 T$ で表わされる。高速炉での混合酸化物の照射前後の空孔径分布変化から K_1 , K_2 の値を実験的に決め、次式を得た。

$$\Delta D = -(4.37 \pm 0.49) \times 10^{-5} I + (9.45 \pm 0.62) \times 10^{-13} I^2 T$$

$$I < 30000 \text{ MWD/MTM}, 1000^\circ\text{K} < T < 1450^\circ\text{K}$$

(ロ) H. Stehle & H. Assmann のモデル⁸⁾

ポアを横切る核分裂破片によって Vacancy が生成し、この Vacancy が Sink に移動し、焼きしまりが起こる。

Vacancy の生成速度が焼きしまりの律速段階である場合のペレットの体積変化は次式で評価できる。

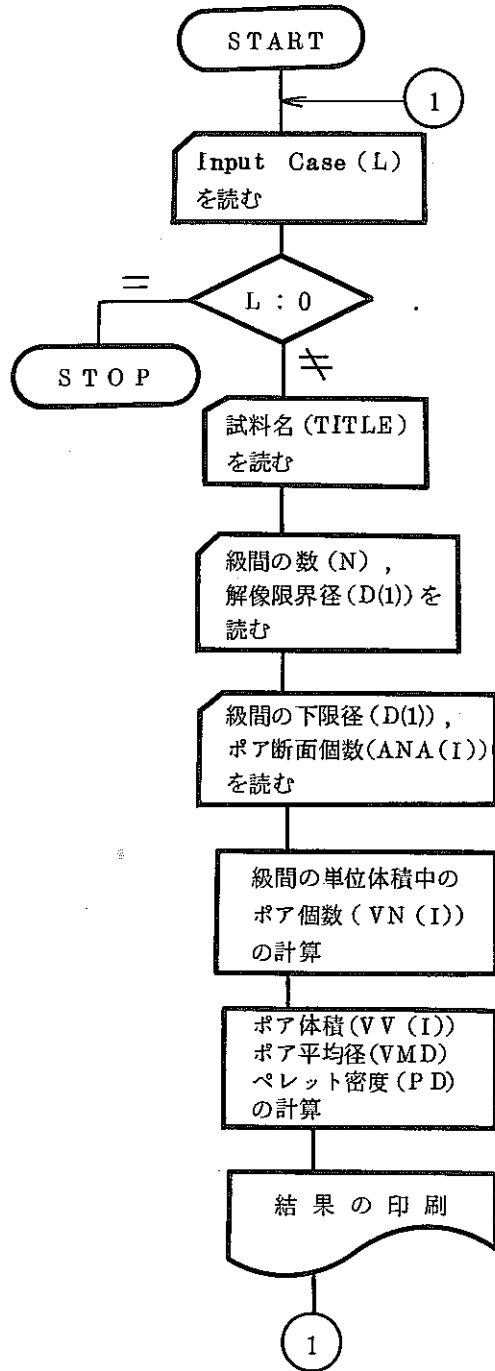
$$\Delta V/V = (\Delta V/V)^{\text{Swell}} + (\Delta V/V)^{\text{Pore Shrinkage}}$$

$$= KFt - \int_0^\infty \left[1 - \left(1 - \frac{\eta w \lambda}{3 r_0} Ft \right) \right] P_0(r_0) dr$$

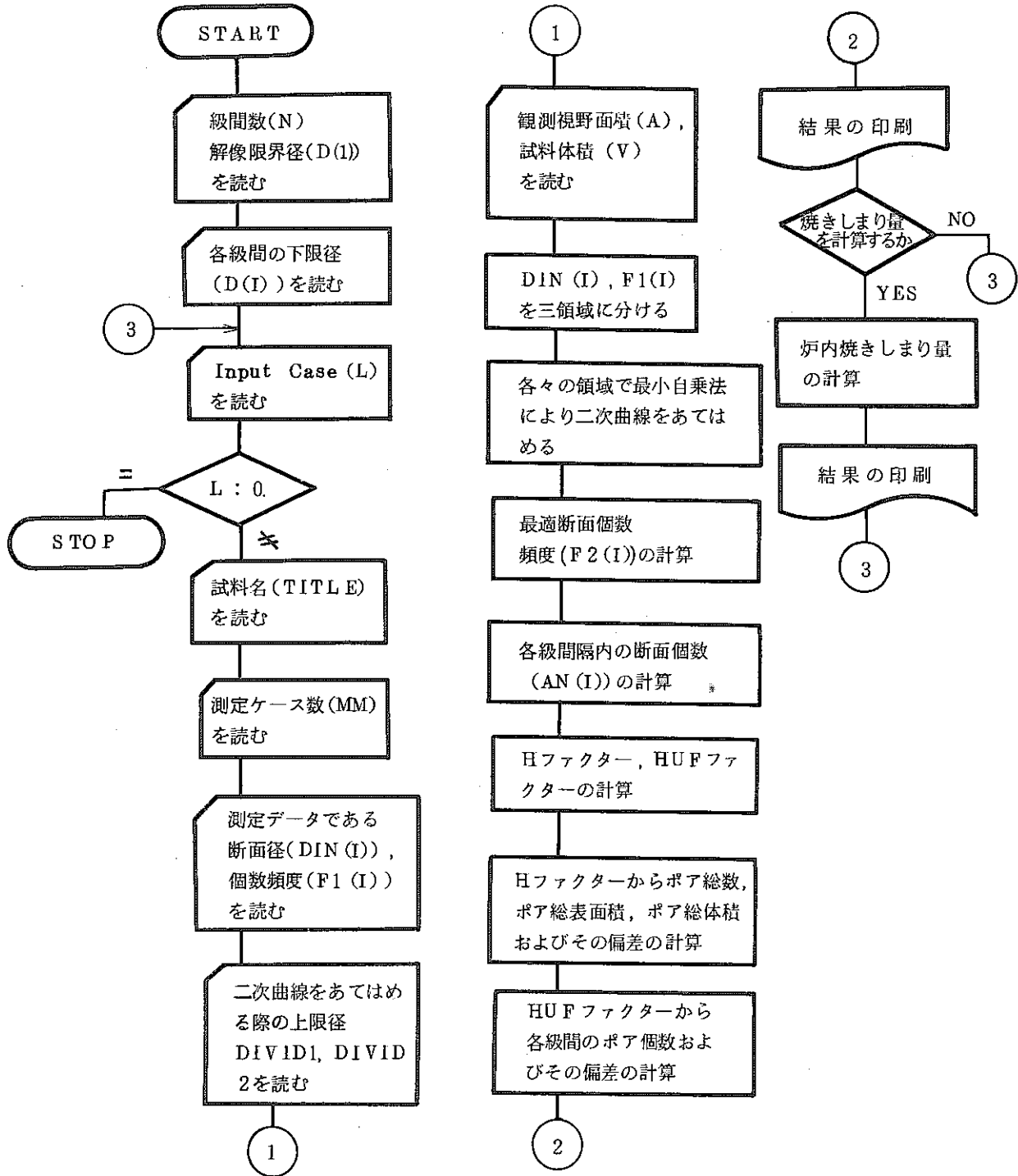
$$\left\{ \begin{array}{l} F : \text{fission rate per cc} \\ t : \text{irradiation time} \\ \eta : \text{average number of vacancy} \\ w : \text{vacancy volume} \\ \lambda : \text{length of fission spike} \\ r_0 : \text{initial radius of pores} \\ P_0(r_0) : \text{initial porosity for } r_0 \end{array} \right.$$

II. フローチャート

1. POREDISE-1



2. POREDISE - 2



III. 人 力 形 式

1. POREDIS -1

Card No.	FORTRAN Symbol	Data Form	Description	Unit
1	L	I10	インプットデータケースの連続性 $L \neq 0$, 連続	
2	TITLE	20A4	試料名	
3	N D(1)	I10 F105	インプットする断面径級間の数 測定限界のポア断面径	μm
4	D(2) F(1)	F105 E103	1番目の断面径級間の上限値 1番目の級間での断面個数	μm $\text{No}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m}$
5	D(3) F(2)	F105 E103	2番目の断面径級間の上限値 2番目の級間での単位面積中の 断面個数	μm $\text{No}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
3+N	D(N+1) F(N)	F105 E103	N番目の断面径級間の上限値 N番目の級間での単位面積中の 断面個数	μm $\text{No}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m}$
次のデータケースを計算する場合にはCard No. 1~3+Nと 同様な順序, 形式でインプットする。				
最後の カード	L	I10	0をインプットする	

2. POREDIS -2

Card No.	FORTRAN Symbol	Data Form	Description	Unit
1	N D(1)	I10 F15.5	ポア級間の数 測定限界径	μm
2	D(2)	F15.5	1番目の径級間の上限値*	μm
3	D(3)	F15.5	2番目の径級間の上限値*	μm
⋮	⋮	〃	⋮	⋮
N+1	D(N+1)	F15.5	N番目の径級間の上限値*	μm

Card No.	FORTRAN Symbol	Data Form	Description	Unit
N+2	L	I 10	インプットデータケースの 連続性 L≧0 連続	
N+3	TITLE	20 A 4	試料名	
N+4	MM	I 10	測定した断面径，個数頻度の ケース数	
N+5	D1N(1) F1(1)	F15.5 E10.3	測定した断面径級間の平均径** 測定した断面級間での** 断面個数頻度	μm $\text{No}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
MM+N+4	D1N(MM) F1 (MM)	F15.5 E10.3	測定した断面径級間の平均径** 測定した断面級間での断面個数 頻度**	μm $\text{No}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m}$
MM+N+5	DIVID1 DIVID2	F10.5 F10.5	三領域に分けて二次曲線をフィ テイングする際の径が小さい領 域の上限径 径が中程度である領域の上限径	μm μm
MM+N+6	A V	F15.5 F15.5	測定視野面積 試料体積	cm^2 cm^3
MM+N+7	LLL	I 10	999≧焼きしまり量を計算 999= 焼きしまり量を計算しない	
<p>次のデータケースを計算する場合には Card No. (N+2) ~ (MM+N+6) と同様な順序・形式でインプットする。</p>				
最後の カード	L	I 10	0をインプットする	

* 最小径から最大径までを log スケール上で等間隔になるように各級間の境界値を決める。

** 測定値である D1N(1) と F1(1) のインプット順序はどんな順序でもよい。

IV. 出力形式

1. POREDISE-1

次のようなデータがアウトプットされる。出力形式については表-3参照。

- ① 各級間における単位体積中のポア数
- ② 各級間における単位体積中のポア体積
- ③ るい積ふるい下ポア体積
- ④ 平均ポア径およびその標準偏差
- ⑤ ペレット密度

2. POREDISE-2

次のようなデータがアウトプットされる。出力形式については表4.5, 6.7参照。

- ① 測定データをフィッティングした二次関数 $\log F = A + B \log D + C (\log D)^2$ の係数 A, B, C
- ② この二次関数を使って読み込んだ最適断面個数頻度
- ③ W. L. Nicholson の理論から求めた。

単位体積中のポア総個数, ポア総体積, ポア総表面積, ポアの平均径, ペレット密度およびそれらの標準偏差

- ④ Sheil の積分方程式を解いて求めた。
各級間における単位体積中のポア数および標準偏差
- ⑤ 各級間のポア数から求めた。
各級間のポア体積, るい積ふるい上ポア体積, 平均ポア径, ペレット密度
- ⑥ ポア径個数頻度分布に二次関数をフィッティングした結果
- ⑦ 炉内焼きしまり量の推定値 (必要に応じて)

V. 計算例

FOGENペレット (試料名 FG00101, 寸法密度 94.16%TD) を例にとってポア分布計算の手順を示す。

1. 金相写真の撮影

写真倍率の種類, 写真枚数は多い方がより正確な推定ができるが, 写真倍率, 写真枚数は次のよ

うに選んだ。

写真倍率	写真枚数	顕微鏡	
1.1.8倍	2枚	光学	図6
6.1.8倍	3枚	"	図7
2.5.3倍	3枚	"	図8
9.3.0倍	4枚	SEM	図9
4.9.0.0倍	6枚	"	図10, 図11

2. 画像解析装置によるポア断面径分布の測定

(イ) 写真倍率1.1.8倍

画像解析装置-オムニコン, 測定視野面積-84.057mm²

断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数 (No.)	1cm ² 中の個数	個数頻度 (No./cm ² · μm)
0 ~ 8.2	4.1	184	2.19×10^2	0.27×10^2
8.2 ~ 16.3	12.3	147	1.75×10^2	0.21×10^2
16.3 ~ 32.6	24.5	256	3.05×10^2	0.19×10^2
32.6 ~ 48.9	40.8	244	2.90×10^2	0.18×10^2
48.9 ~ 65.2	57.1	153	1.82×10^2	0.11×10^2
65.2 ~ 81.5	73.4	41	0.49×10^2	0.08×10^2
81.5 ~ 97.8	89.7	19	0.23×10^2	0.014×10^2
97.8 ~ 114.1	105.95	12	0.14×10^2	0.0086×10^2
114.1 ~ 130.4	122.3	2	0.02×10^2	0.0012×10^2
130.4 ~ 146.7	138.6	1	0.01×10^2	0.00016×10^2

(ロ) 写真倍率6.1.8倍

画像解析装置-オムニコン, 測定視野面積- 4.47×10^{-3} cm²

断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数	1cm ² 中の個数	個数頻度 (No./cm ² · μm)
1.31 ~ 2.61	1.96	65	1.45×10^4	1.12×10^4
2.61 ~ 3.92	3.27	34	7.61×10^3	5.85×10^3
3.92 ~ 5.22	4.57	20	4.47×10^3	3.44×10^3
5.22 ~ 6.53	5.88	19	4.25×10^3	3.27×10^3
6.53 ~ 7.83	7.18	11	2.46×10^3	1.89×10^3
7.83 ~ 10.4	9.12	12	2.68×10^3	1.03×10^3
10.4 ~ 13.1	11.8	5	1.12×10^3	4.29×10^2
13.1 ~ 15.7	14.4	3	6.71×10^2	2.57×10^2

画像解析装置—オムニコン，測定視野面積— $1.727 \times 10^{-2} \text{ cm}^2$

断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数	1 cm^2 中の個数	個数頻度 $\text{No.}/\mu\text{m} \cdot \text{cm}^2$
0 ~ 3	1.5	144	8.32×10^3	2.77×10^3
3 ~ 7.5	6.25	42	2.43×10^3	5.40×10^2
7.5 ~ 15	11.25	24	1.39×10^3	1.85×10^2
15 ~ 22.5	18.75	11	6.39×10^2	8.5×10^1
22.5 ~ 30	26.25	2	1.16×10^2	1.5×10^1
30 ~ 37.5	33.75	4	2.31×10^2	3.1×10^1
37.5 ~ 45	41.25	7	4.05×10^2	5.4×10^1
45 ~ 60	52.5	6	3.47×10^2	2.3×10^1
60 ~ 75	67.5	2	1.16×10^2	7.7×10^0
75 ~ 100	87.5	3	1.73×10^2	6.9×10^0

(ハ) 写真倍率 253倍

画像解析装置—オムニコン，測定視野面積— $0.1826 \times 10^{-2} \text{ cm}^2$

断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数	1 cm^2 中の個数	個数頻度 $(\text{No.}/\text{cm}^2 \cdot \mu\text{m})$
0 ~ 0.38	0.19	405	2.21×10^5	5.82×10^5
0.38 ~ 0.76	0.57	203	1.11×10^5	2.92×10^5
0.76 ~ 1.52	1.14	163	8.91×10^4	1.17×10^5
1.52 ~ 2.28	1.90	68	3.72×10^4	4.89×10^4
2.28 ~ 3.04	2.66	59	3.22×10^4	4.24×10^4
3.04 ~ 3.80	3.42	12	6.6×10^3	8.7×10^3
3.80 ~ 4.56	4.18	7	3.8×10^3	5.0×10^3
4.56 ~ 5.32	4.94	3	1.6×10^3	2.2×10^3
5.32 ~ 6.08	5.70	2	1.1×10^3	1.4×10^3
6.08 ~ 6.84	6.46	1	5.5×10^2	7.2×10^2

(二) 写真倍率 930倍

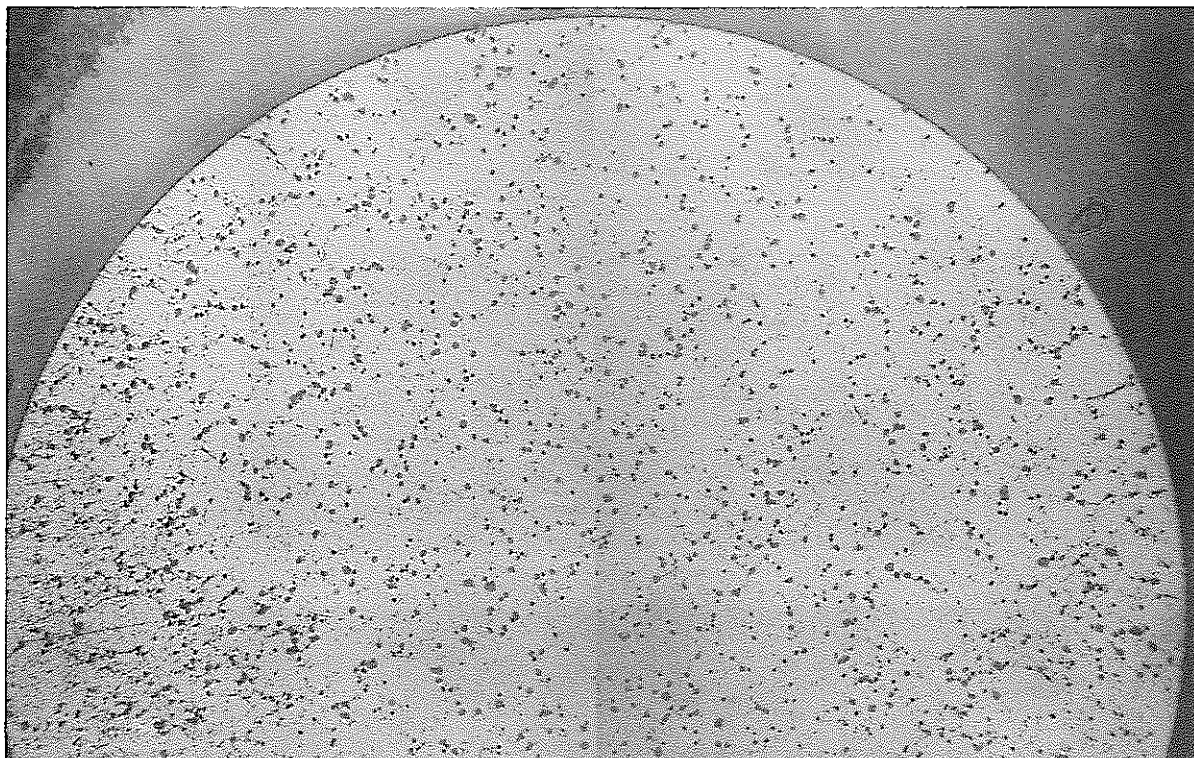
画像解析装置 QTM-720, 測定視野面積 $-2.88 \times 10^{-5} \text{ cm}^2$

断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数	1 cm^2 中の個数	個数頻度 ($\text{No./cm}^2 \cdot \mu\text{m}$)
0 ~0.12	0.06	175	6.08×10^5	5.06×10^6
0.12~0.5	0.31	604	2.10×10^6	5.52×10^6
0.5 ~1.0	0.75	946	3.28×10^6	6.56×10^6
1.0 ~1.5	1.25	232	8.06×10^5	1.61×10^6
1.5 ~2.0	1.75	52	1.8×10^5	3.60×10^5
2.0 ~2.5	2.25	9	3.1×10^4	6.20×10^4
2.5 ~3.0	2.75	5	1.7×10^4	3.40×10^4

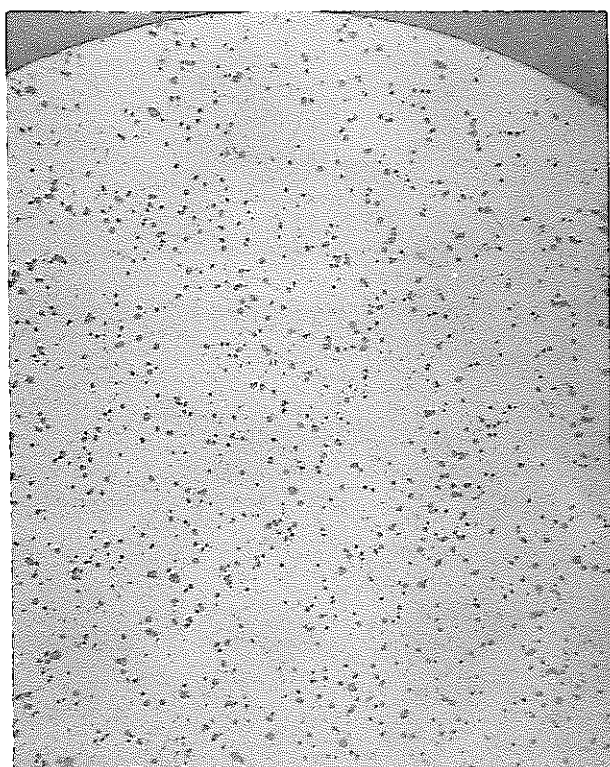
(ホ) 写真倍率 4900倍

画像解析装置-QTM-720, 測定視野面積 $0.765 \times 10^{-5} \text{ cm}^2$

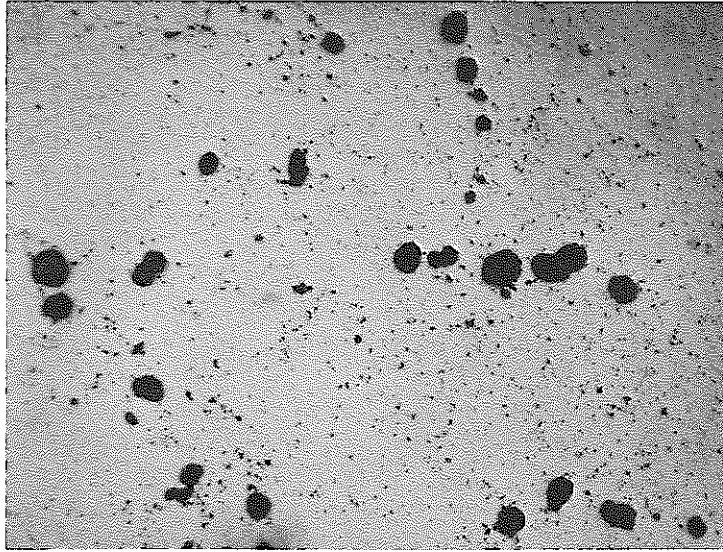
断面径級間 (μm)	平均径 (μm)	測定個数	1 cm^2 中の個数	個数頻度 ($\text{No./cm}^2 \cdot \mu\text{m}$)
0.026~0.1	0.063	162	2.12×10^7	2.12×10^8
0.1 ~0.3	0.15	159	2.08×10^7	1.04×10^8
0.3 ~0.5	0.40	100	1.42×10^7	7.10×10^7
0.5 ~0.7	0.60	29	3.79×10^6	1.90×10^7
0.7 ~0.9	0.80	12	1.57×10^6	7.85×10^6
0.9 ~1.1	1.0	5	6.50×10^5	3.27×10^6
1.1 ~1.3	1.2	3	3.90×10^5	1.96×10^6



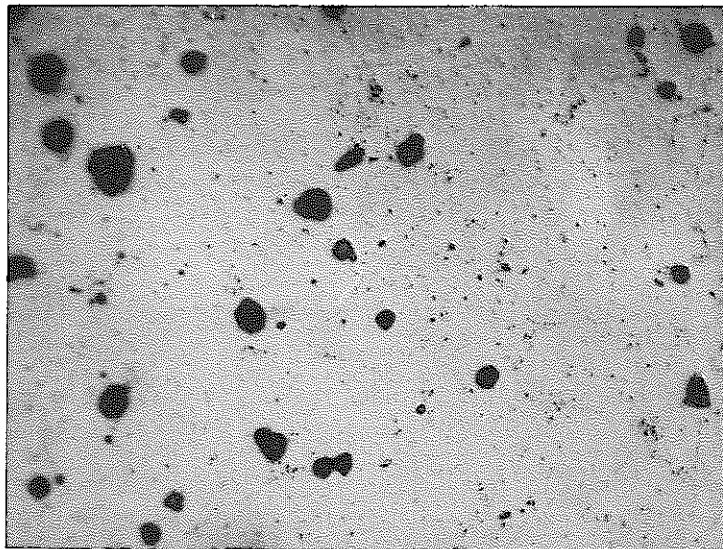
1mm



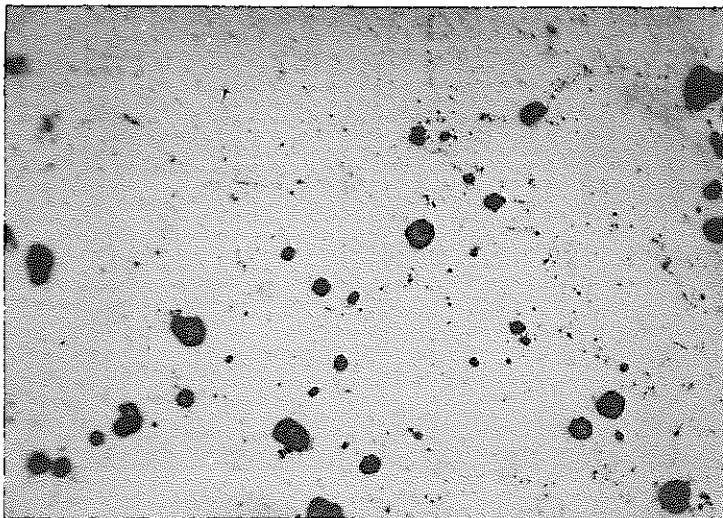
☒ - 6



200 μ

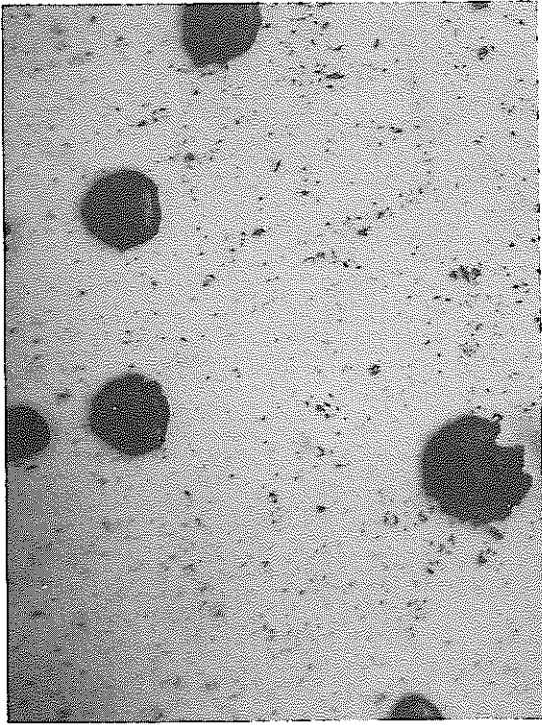


200 μ

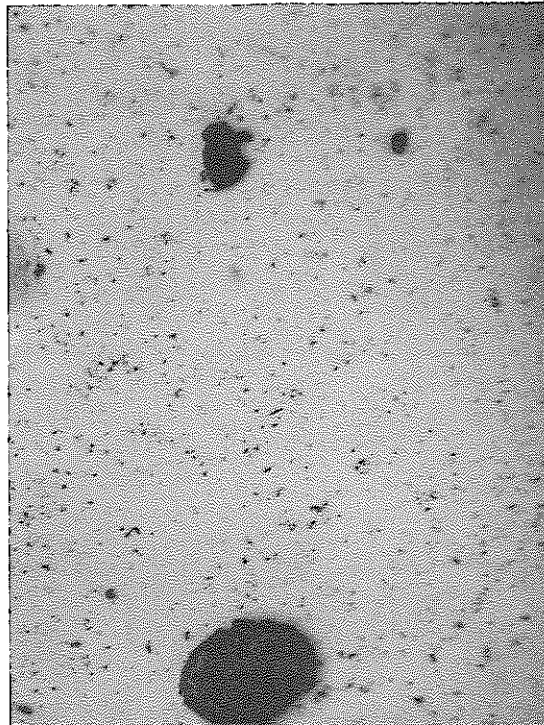
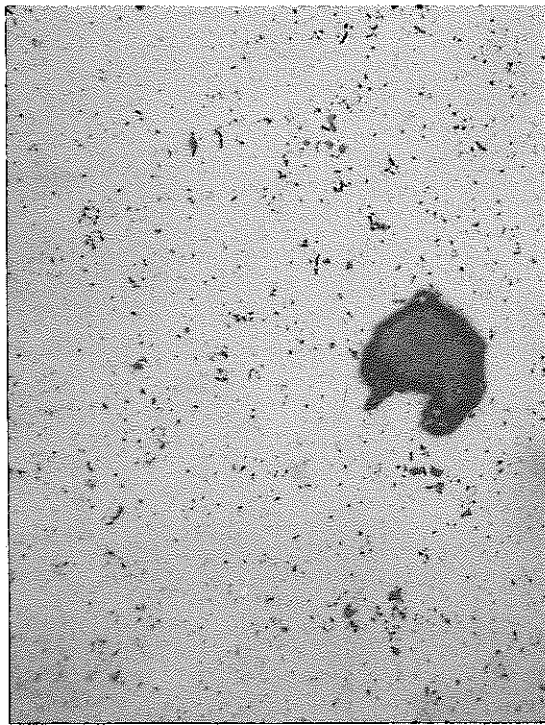


200 μ

☒ - 7

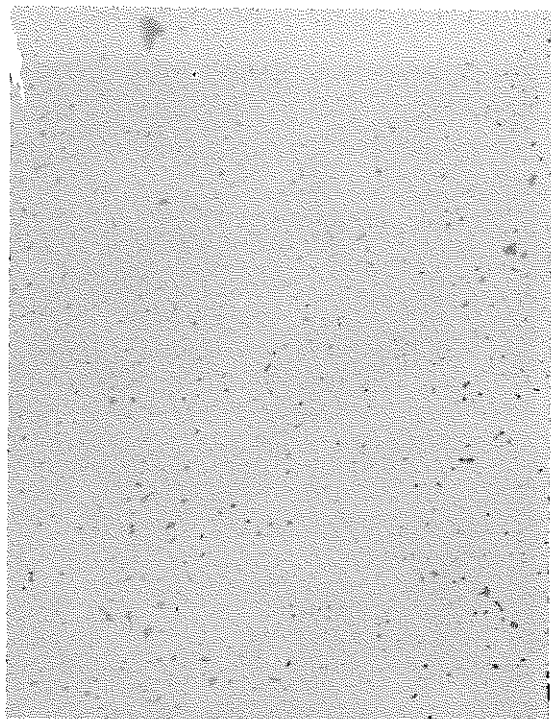
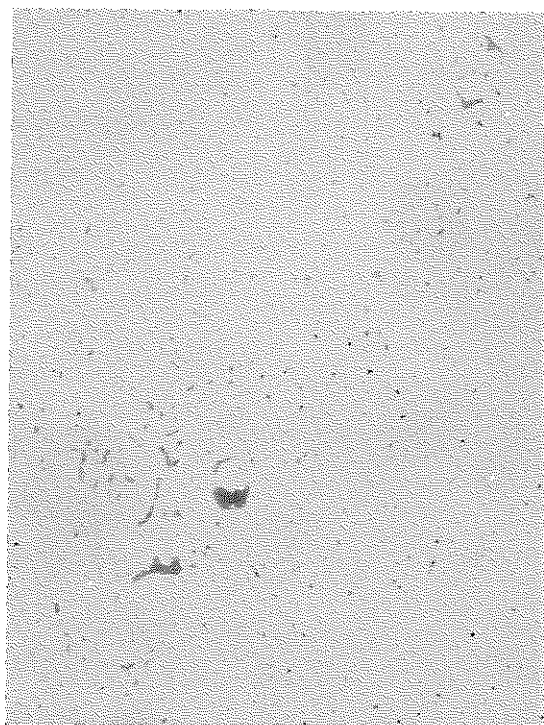
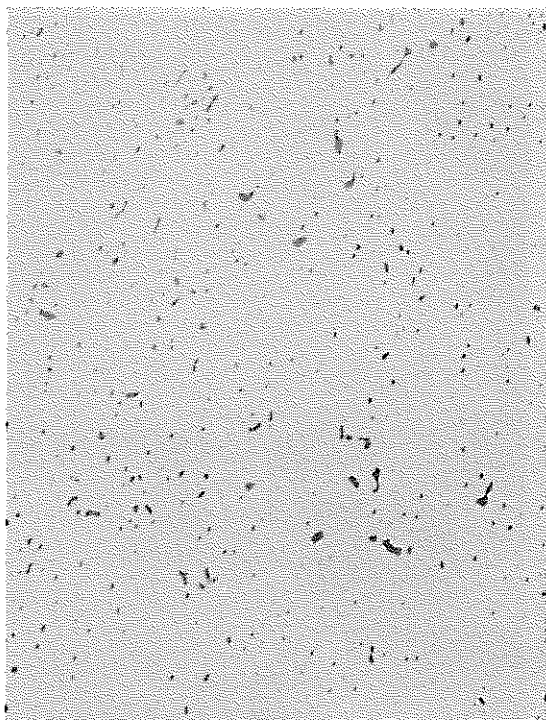


50 μ



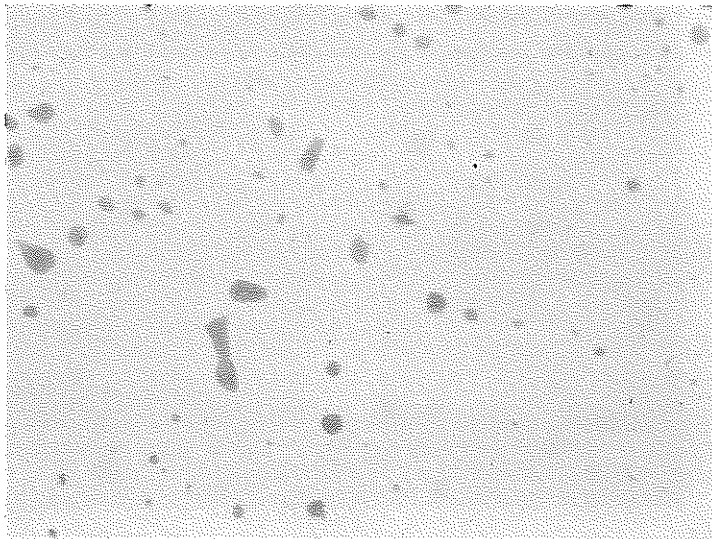
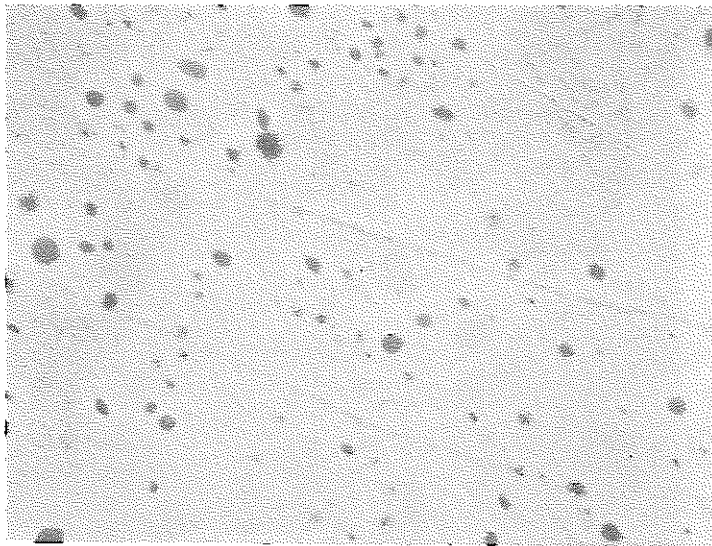
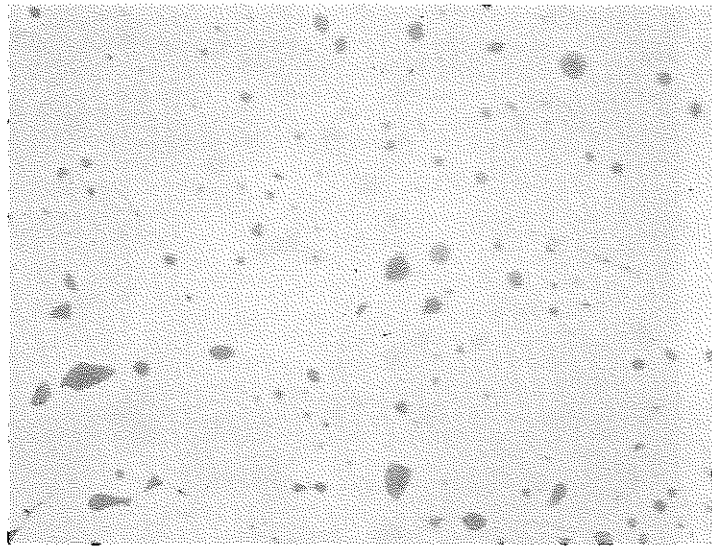
50 μ

☒ - 8



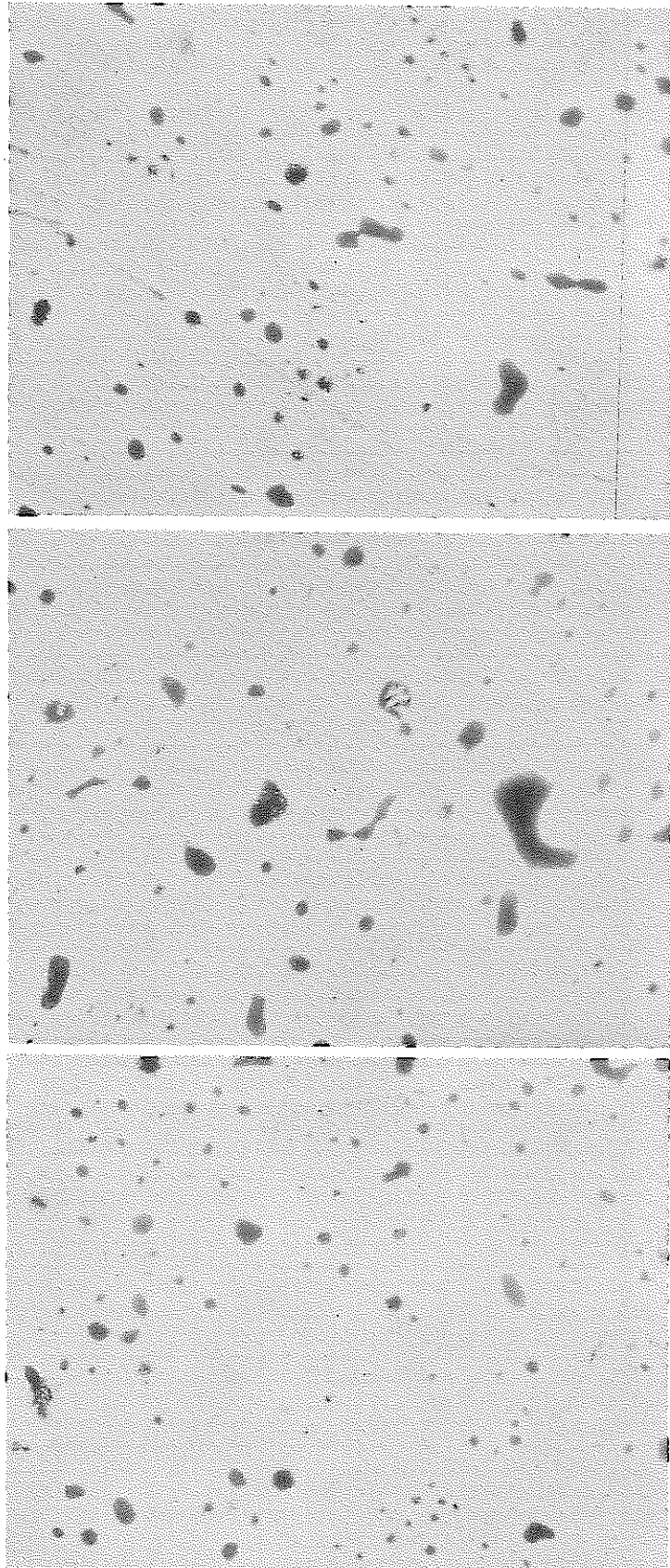
10 μ

☒-9



2 μ

☒-10



2 μ

图-11

3. 断面径個数頻度曲線からインプットデータ

画像解析装置では、ポアと背景との濃淡差を利用して対象物であるポアを背景から分離・識別する。

図-12に示すように、金相写真上の小さなポアは濃度レベルが低いのに対して、大きなポアは濃度レベルが高いので、小さなポアを正確に測定しようとして濃度しきい値 (threshold) を低く設定すると (図中C) 大きなポアは実際のポアよりも大きく認識されたり、近接ポアの連結が起こる。逆に大きなポアを正確に測定しようとして、濃度しきい値を高く設定すると (図中A), 小さなポアが測定されなくなる。

実際の測定は、中程度の大きさのポアに合わせて濃度しきい値を設定するのであるが (図中B), 微少なポアの数え落しは避けられない。

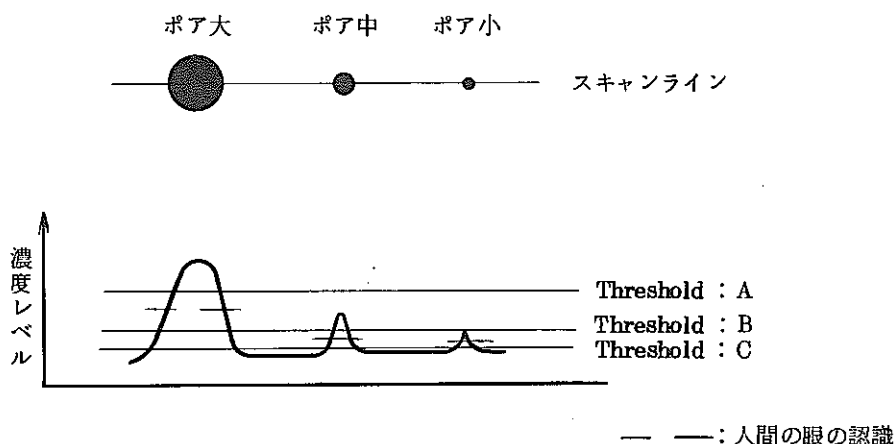


図-12

各写真倍率について、断面径級間の平均径に対して断面個数頻度を両対数紙にプロットすると図-13のようになる。図-13において、各倍率の金相写真上で、ポア径が小さい方では個数頻度の測定値が小さい値になっているのは上述の理由によるものである。

従って、全体の断面径個数頻度分布曲線の感じから、個数頻度の観測データの取捨選択が必要である。

(イ) POREDISE-1で計算する場合

最小径から最大径までを log スケール上で等間隔になるように分割して断面級間をとり、各級間の平均径での個数頻度を図-13の曲線から内挿あるいは外挿して最適個数頻度を選びインプットデータとする。

表 - 1

No.	断面径級間 (μm)		平均径 (μm)	最適個数頻度 ($\text{No./cm}^2 \cdot \mu\text{m}$)
	D(I)	D(I+1)	DC(I)	F(I)
1	0.032	~0.041	0.037	3.0×10^8
2	0.041	~0.052	0.047	2.7×10^8
3	0.052	~0.066	0.059	2.2×10^8
4	0.066	~0.082	0.074	1.9×10^8
5	0.082	~0.100	0.091	1.6×10^8
6	0.100	~0.125	0.112	1.5×10^8
7	0.125	~0.160	0.142	1.3×10^8
8	0.160	~0.200	0.180	1.1×10^8
9	0.200	~0.250	0.225	1.0×10^8
10	0.250	~0.320	0.285	8.5×10^7
11	0.320	~0.41	0.365	7.5×10^7
12	0.41	~0.52	0.465	5.0×10^7
13	0.52	~0.66	0.590	2.0×10^7
14	0.66	~0.82	0.74	1.0×10^7
15	0.82	~1.00	0.91	5×10^6
16	1.00	~1.25	1.12	2.5×10^6
17	1.25	~1.60	1.42	1.0×10^6
18	1.60	~2.00	1.80	3.0×10^5
19	2.00	~2.50	2.25	9.0×10^4
20	2.50	~3.20	2.85	3.5×10^4
21	3.20	~4.10	3.65	7.0×10^3
22	4.1	~5.2	4.65	3.0×10^3
23	5.2	~6.6	5.90	1.5×10^3
24	6.6	~8.2	7.40	7.0×10^2
25	8.2	~10	9.1	4.0×10^2
26	10	~12.5	11.2	2.0×10^2
27	12.5	~16.0	14.2	1.2×10^2
28	16.0	~20	18.0	9×10^1
29	20	~25	22.5	2×10^1
30	25	~32	28.5	2.5×10^1
31	32	~41	36.5	4.0×10^1
32	41	~52	46.5	2.5×10^1
33	52	~66	59	1.5×10^1
34	66	~82	74	3×10^0
35	82	~100	91	1.5×10^0
36	100	~125	112	9×10^{-1}
37	125	~160	142	6×10^{-2}
38	160	~200	180	2×10^{-2}

(ロ) POREDISE-2で計算する場合

測定データは最小目乘法を用いて二次関数をあてはめ、最適個数頻度を読み取るようになって
いるが、各測定倍率について、ポア径が小さい所の個数頻度は除いて（図13中の×印）インプ
ット測定データとした。

また図-13の分布の様子から、最小径～1 μ m、1 μ m～10 μ m、10 μ m～最大径と三
つの領域に分けて二次曲線をあてはめた。

表 - 2

No.	測定断面径級間の平均径 (μ m)	個数頻度 (No./ $\text{cm}^2 \cdot \mu$ m)	備 考
I	DIN(I)	F1(I)	
1	0.063	2.12×10^8	×4900
2	0.15	1.04×10^8	〃
3	0.40	7.10×10^7	〃
4	0.60	1.9×10^7	〃
5	0.80	7.85×10^6	〃
6	1.0	3.27×10^6	〃
7	1.2	1.96×10^6	〃
8	0.75	6.56×10^6	×930
9	1.25	1.61×10^6	〃
10	1.75	3.6×10^5	〃
11	2.25	6.2×10^4	〃
12	2.75	3.40×10^4	〃
13	1.90	4.89×10^4	×253
14	2.66	4.24×10^4	〃
15	3.42	8.7×10^3	〃
16	4.18	5.0×10^3	〃
17	4.94	2.2×10^3	〃
18	5.70	1.4×10^3	〃
19	6.46	7.2×10^2	〃
20	11.25	1.85×10^2	×61.8
21	18.75	8.5×10^1	〃
22	26.25	1.5×10^1	〃
23	33.75	3.1×10^1	〃
24	41.25	5.4×10^1	〃
25	52.5	2.3×10^1	〃
26	67.5	7.7×10^0	〃
27	87.5	6.9×10^0	〃
28	32.7	5.85×10^3	〃

29	4.57	3.44×10^3	$\times 61.8$
30	5.88	3.27×10^3	“
31	7.18	1.89×10^3	“
32	9.12	1.03×10^3	“
33	11.8	4.29×10^2	“
34	14.4	2.57×10^2	“
35	24.5	1.9×10^1	11.8
36	40.8	1.8×10^1	“
37	57.1	1.1×10^1	“
38	73.4	3×10^0	“
39	89.7	1.4×10^0	“
40	105.95	8.6×10^{-1}	“
41	122.3	1.2×10^{-1}	“
42	138.6	6×10^{-2}	“

4. データのインプット

イ) POREDISE-1

Ⅲの入力形式に従って表-1のデータをインプットする。

ロ) POREDISE-2

表-2のデータのほかに測定視野面積： $8.64 \times 10^{-1} \text{ cm}^2$ ，試料体積： 2.90 cm^3 ，二次関数フィッティングの上限径： $1.10 \mu\text{m}$ ，最小径から最大径までをlogスケール上で等間隔に分割した径級間，などをⅢの入力形式に従ってインプットする。

5. アウトプット結果

(イ) DOREDISE-1のアウトプット

a) 計算したポア分布の一覧表 表-3

b) 平均径，単位体積中の総ポア個数，ポア体積率，ペレット密度

```

***** MEAN VOID DIAMETER                0.145E-04    <CM>
***** VOID DIAMETER STANDARD DEVIATION   0.158E-04    <CM>
***** TOTAL VOID NUMBER PER 1 CM**3     0.36824020E+13 <KO>
***** TOTAL VOID VOLUME PER 1 CM**3     0.70318520E-01 <CM**3>
***** VOID FRACTION                      7.031852     <PERCENT>
***** PELLET DENSITY                     92.968140    <PERCENT>
    
```

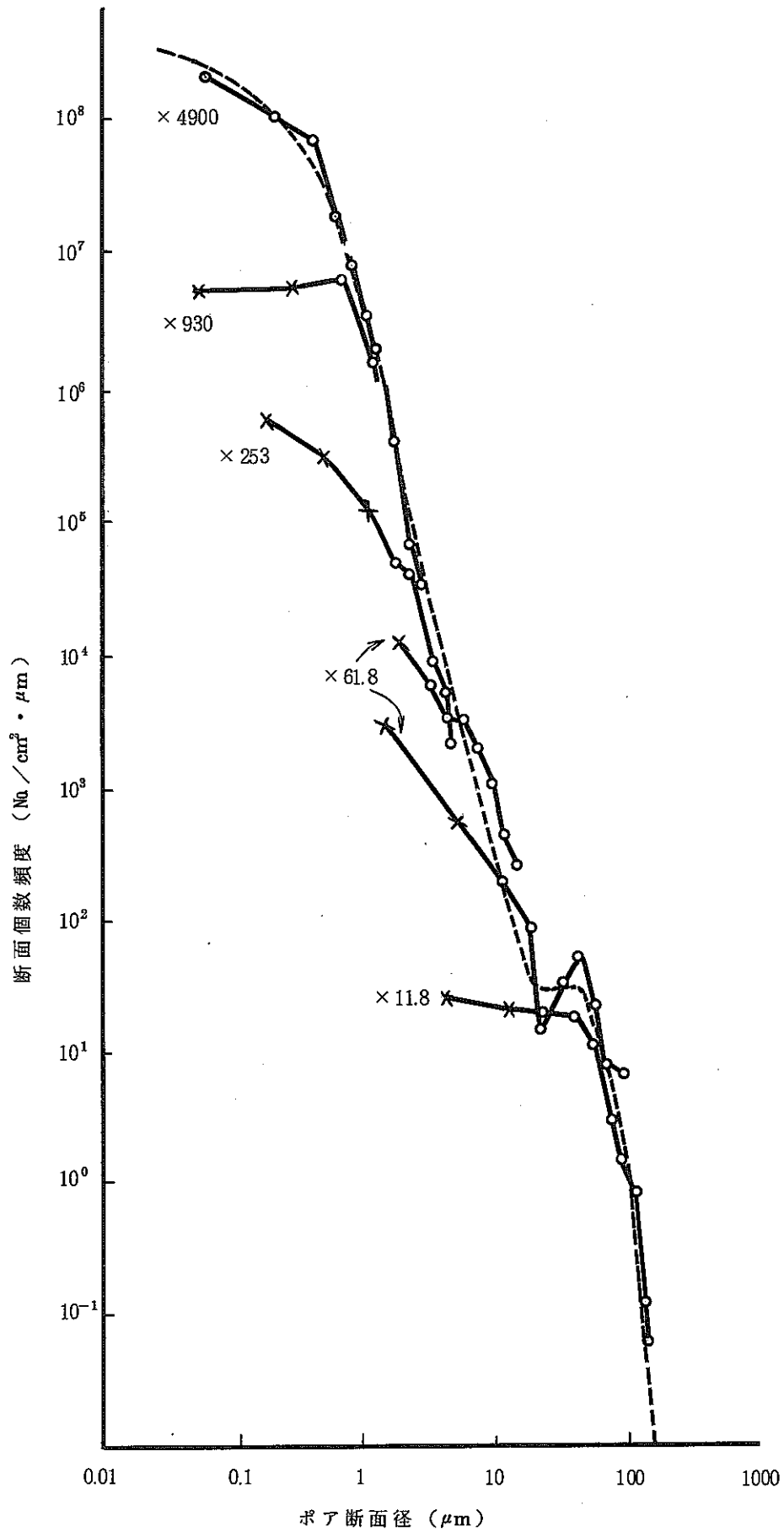


図13 断面径個数頻度分布曲線

(ロ) POREDISE-2のアウトプット

a) 最小自乗法で Input データを処理して、フィッティングした三つの二次関数

 $\log F = A + B \log DC + C (\log DC)^2$ の係数と標準偏差 (SS)

AA1= 6.54807	AA2= 6.87757	AA3= -0.11404
BB1= -3.40023	BB2= -7.27357	BB3= 4.73684
CC1= -1.65188	CC2= 3.33315	CC3= -2.37061
SS1= 0.12974	SS2= 0.19381	SS3= 0.34936

b) W. L. Nicholson の理論式から求めたポア分布, 表-4

c) W. L. Nicholson の理論式から求めたポア総数, 平均径, 表面積, ポア体積率, ペレット密度とその標準偏差

PROPERTY	ESTIMATE	STANDARD DEVIATIONS
TOTAL PORE NUMBER	0.2747E+13 /CC	0.6027E+09
MEAN PORE DIAMETER	0.1993E-04 CM	0.2928E-08
SPECIFIC SURFACE AREA	0.5792E+04 /CM	0.1366E+01
PORE VOLUME FRACTION	0.7912E+01 PERCENT	0.8714E-01
PELLET DENSITY	0.9209E+02 PERCENT	0.8714E-01

d) Sheil の基礎式(7)から計算したポア分布一覧表, 表-5

e) 各級間のポア数から求めた平均径, ポア総数, ポア体積率, ペレット密度

***** THE VALUES WRITER BELOW ARE CALCULATED FROM PORES NUMBER IN EACH CELL *****

MEAN PORE DIAMETER	0.17196750E-04	<CM>
PORE DIAMETER STANDARD DEVIATION	0.15160450E-04	<CM>
TOTAL PORES NUMBER PER 1 CM**3	0.27473320E+13	<KO>
PORE VOLUME FRACTION	5.752113	<PERCENT>
PELLET DENSITY	94.247880	<PERCENT>

f) 炉内焼きしまり量の推定計算結果

Stehle and Assman のモデルによる結果 表-6

Carlson のモデルによる結果 表-7

(ハ) アウトプットデータのプロット

表3, 表4の計算結果のうち, ポア個数頻度, ポア体積率, るい積ポア体積率をポア径に対し

て、両対数紙にプロットすると、図14および図15のようになる。

ポア個数頻度の分布はPOREDIS-1とPOREDIS-2とでlogスケール上ではほとんど大差ないが、ポア体積率の分布は若干、両者の間で異なっており、その結果計算密度がPOREDIS-1では92.99%、POREDIS-2では94.25%となっている。

この相違が生じた原因は、①断面個数分布からポア個数分布を計算する際の変換式が異なること、②断面径個数頻度分布のインプットデータの選択方法が異なることによるものである。

表-3

*** VOID DISTRIBUTION DATA ***

TEST SAMPLE FG00101 GEOMETRICAL DENSITY **94.16 PERCENT TD **

NO	DIAMETER RANGE		NO OF SECTIONS	NO OF VOIDS	RELATIVE VOID NO FRACTION	VOID NO FREQUENCY	VOID VOLUME	RELATIVE VOID VOLUME FRACTION	CUMULATIVE VOID VOLUME FRACTION
	<MICROMETER>		<PER 1 CM**2>	<PER 1 CM**3>	<PERCENT>	<NO/CC, MICRON>	<CM**3>	<PERCENT>	<PERCENT>
1	0.03---	0.04	0.27000E+07	0.57908E+12	0.15726E+02	0.64342E+14	0.14736E-04	0.14736E-02	0.14736E-02
2	0.04---	0.05	0.29700E+07	0.54003E+12	0.14665E+02	0.49094E+14	0.28415E-04	0.28415E-02	0.43152E-02
3	0.05---	0.07	0.30800E+07	0.41692E+12	0.11322E+02	0.29780E+14	0.44811E-04	0.44811E-02	0.87963E-02
4	0.07---	0.08	0.30400E+07	0.33739E+12	0.91622E+01	0.21087E+14	0.71549E-04	0.71549E-02	0.15951E-01
5	0.08---	0.10	0.28800E+07	0.25383E+12	0.68930E+01	0.14102E+14	0.10010E-03	0.10010E-01	0.25961E-01
6	0.10---	0.13	0.37500E+07	0.27879E+12	0.75709E+01	0.11152E+14	0.20774E-03	0.20774E-01	0.46735E-01
7	0.13---	0.16	0.45500E+07	0.25745E+12	0.69912E+01	0.73556E+13	0.38986E-03	0.38986E-01	0.85721E-01
8	0.16---	0.20	0.44000E+07	0.19857E+12	0.53925E+01	0.49643E+13	0.60605E-03	0.60605E-01	0.14633E+00
9	0.20---	0.25	0.50000E+07	0.19601E+12	0.53228E+01	0.39202E+13	0.11684E-02	0.11684E+00	0.26317E+00
10	0.25---	0.32	0.59500E+07	0.18386E+12	0.49930E+01	0.26266E+13	0.22274E-02	0.22274E+00	0.48591E+00
11	0.32---	0.41	0.67500E+07	0.19292E+12	0.52389E+01	0.21435E+13	0.49094E-02	0.49094E+00	0.97684E+00
12	0.41---	0.52	0.55000E+07	0.14328E+12	0.38909E+01	0.13025E+13	0.75390E-02	0.75390E+00	0.17307E+01
13	0.52---	0.66	0.28000E+07	0.54487E+11	0.14797E+01	0.38919E+12	0.58563E-02	0.58563E+00	0.23164E+01
14	0.66---	0.82	0.16000E+07	0.25897E+11	0.70327E+00	0.16186E+12	0.54919E-02	0.54919E+00	0.28656E+01
15	0.82---	1.00	0.90000E+06	0.12483E+11	0.33899E+00	0.69351E+11	0.49229E-02	0.49229E+00	0.33579E+01
16	1.00---	1.25	0.62500E+06	0.70386E+10	0.19114E+00	0.28154E+11	0.52446E-02	0.52446E+00	0.38823E+01
17	1.25---	1.60	0.35000E+06	0.31000E+10	0.84185E-01	0.88572E+10	0.46945E-02	0.46945E+00	0.43518E+01
18	1.60---	2.00	0.12000E+06	0.87966E+09	0.23888E-01	0.21991E+10	0.26848E-02	0.26848E+00	0.46202E+01
19	2.00---	2.50	0.45000E+05	0.25584E+09	0.69477E-02	0.51169E+09	0.15251E-02	0.15251E+00	0.47728E+01
20	2.50---	3.20	0.24500E+05	0.11273E+09	0.30613E-02	0.16104E+09	0.13657E-02	0.13657E+00	0.49093E+01
21	3.20---	4.10	0.63000E+04	0.20205E+08	0.54868E-03	0.22450E+08	0.51417E-03	0.51417E-01	0.49607E+01
22	4.10---	5.20	0.33000E+04	0.81737E+07	0.22197E-03	0.74307E+07	0.43008E-03	0.43008E-01	0.50037E+01
23	5.20---	6.60	0.21000E+04	0.41244E+07	0.11200E-03	0.29460E+07	0.44330E-03	0.44330E-01	0.50481E+01
24	6.60---	8.20	0.11200E+04	0.17275E+07	0.46911E-04	0.10797E+07	0.36634E-03	0.36634E-01	0.50847E+01
25	8.20---	10.00	0.72000E+03	0.96993E+06	0.26339E-04	0.53885E+06	0.38251E-03	0.38251E-01	0.51230E+01
26	10.00---	12.50	0.50000E+03	0.48555E+06	0.13186E-04	0.19422E+06	0.36180E-03	0.36180E-01	0.51591E+01
27	12.50---	16.00	0.42000E+03	0.29385E+06	0.79797E-05	0.83956E+05	0.44498E-03	0.44498E-01	0.52036E+01
28	16.00---	20.00	0.36000E+03	0.25707E+06	0.69810E-05	0.64267E+05	0.78459E-03	0.78459E-01	0.52821E+01
29	20.00---	25.00	0.10000E+03	0.16887E+05	0.45859E-06	0.33774E+04	0.10067E-03	0.10067E-01	0.52922E+01
30	25.00---	32.00	0.17500E+03	0.25766E+05	0.69971E-06	0.36809E+04	0.31215E-03	0.31215E-01	0.53234E+01
31	32.00---	41.00	0.36900E+03	0.10726E+06	0.29129E-05	0.11918E+05	0.27297E-02	0.27297E+00	0.55963E+01
32	41.00---	52.00	0.27500E+03	0.66643E+05	0.18098E-05	0.60584E+04	0.35066E-02	0.35066E+00	0.59470E+01
33	52.00---	66.00	0.21000E+03	0.47348E+05	0.12858E-05	0.33820E+04	0.50890E-02	0.50890E+00	0.64559E+01
34	66.00---	82.00	0.46000E+02	0.77617E+04	0.21078E-06	0.48510E+03	0.16460E-02	0.16460E+00	0.66205E+01
35	82.00---	100.00	0.27000E+02	0.36781E+04	0.99883E-07	0.20434E+03	0.14505E-02	0.14505E+00	0.67655E+01
36	100.00---	125.00	0.22500E+02	0.29227E+04	0.79370E-07	0.11691E+03	0.21778E-02	0.21778E+00	0.69833E+01
37	125.00---	160.00	0.21000E+01	0.18615E+03	0.50551E-08	0.53186E+01	0.28189E-03	0.28189E-01	0.70115E+01
38	160.00---	200.00	0.80000E+00	0.66667E+02	0.18104E-08	0.16667E+01	0.20347E-03	0.20347E-01	0.70319E+01
<TOTAL>			0.57050E+08	0.36824E+13			0.70319E-01		

**** MEAN VOID DIAMETER

0.145E-04

**** VOID DIAMETER STANDARD DEVIATION

0.158E-04

<CM>
<CM>

表-4. INCREMENTAL CONTRIBUTIONS TO MOMENTS

CELL NO.	D**0	D**1	D**2	D**3	
1	0.3432610E+12	0.14015310E+07	0.56338830E+01	0.22381060E-04	0.24004220E+07
2	0.29058410E+12	0.17245710E+07	0.95840800E+01	0.51176420E-04	0.46372740E+07
3	0.30661520E+12	0.24972510E+07	0.18206680E+02	0.12536980E-03	0.76606730E+07
4	0.29141340E+12	0.31172700E+07	0.28931430E+02	0.25127670E-03	0.11343050E+08
5	0.26691500E+12	0.36087470E+07	0.41473080E+02	0.44388560E-03	0.15563200E+08
6	0.28955750E+12	0.48683420E+07	0.69430180E+02	0.91953880E-03	0.21227520E+08
7	0.26045740E+12	0.61327520E+07	0.11102830E+03	0.18633980E-02	0.28343490E+08
8	0.20979170E+12	0.58443840E+07	0.13379610E+03	0.28369190E-02	0.35116110E+08
9	0.16317730E+12	0.57120960E+07	0.16354570E+03	0.43349190E-02	0.41731420E+08
10	0.12813810E+12	0.57019200E+07	0.20684810E+03	0.69449430E-02	0.48332860E+08
11	0.82679170E+11	0.47227680E+07	0.21945240E+03	0.94364920E-02	0.53799820E+08
12	0.47311750E+11	0.34478400E+07	0.20411790E+03	0.11181850E-01	0.57790660E+08
13	0.26319260E+11	0.24357440E+07	0.18296970E+03	0.12717780E-01	0.60609900E+08
14	0.12695110E+11	0.14743040E+07	0.13890700E+03	0.12109760E-01	0.62316300E+08
15	0.60943240E+10	0.87064000E+06	0.10087700E+03	0.10814670E-01	0.63324000E+08
16	0.46242200E+10	0.81688000E+06	0.11701030E+03	0.15508060E-01	0.64269470E+08
17	0.10758390E+10	0.24081600E+06	0.43695070E+02	0.73354240E-02	0.64548210E+08
18	0.24431820E+09	0.69184000E+05	0.15858400E+02	0.33628940E-02	0.64628290E+08
19	0.75497470E+08	0.26800000E+05	0.76809080E+01	0.20359750E-02	0.64659310E+08
20	0.28311550E+08	0.12688000E+05	0.46093750E+01	0.15476350E-02	0.64674000E+08
21	0.10455760E+08	0.62400000E+04	0.29036090E+01	0.12486580E-02	0.64681230E+08
22	0.41943040E+07	0.35360000E+04	0.20961910E+01	0.11483430E-02	0.64685330E+08
23	0.20971520E+07	0.24960000E+04	0.18757320E+01	0.13038520E-02	0.64688210E+08
24	0.10455760E+07	0.18880000E+04	0.17856450E+01	0.15567540E-02	0.64690400E+08
25	0.10455760E+07	0.16640000E+04	0.19355470E+01	0.20751360E-02	0.64692320E+08
26	0.0	0.43200000E+03	0.63061520E+00	0.83577630E-03	0.64692820E+08
27	0.0	0.54400000E+03	0.99584960E+00	0.16719100E-02	0.64693440E+08
28	0.0	0.49600000E+03	0.11450200E+01	0.24281740E-02	0.64694020E+08
29	0.0	0.44800000E+03	0.12961430E+01	0.34358500E-02	0.64694530E+08
30	0.0	0.40000000E+03	0.14606930E+01	0.49049260E-02	0.64694990E+08
31	0.0	0.27200000E+03	0.13232420E+01	0.56900980E-02	0.64695310E+08
32	0.0	0.16000000E+03	0.10158690E+01	0.55661800E-02	0.64695500E+08
33	0.0	0.96000000E+02	0.72778320E+00	0.50592420E-02	0.64695620E+08
34	0.0	0.32000000E+02	0.43188480E+00	0.37661790E-02	0.64695660E+08
35	0.0	0.16000000E+02	0.24365230E+00	0.26123520E-02	0.64695680E+08
36	0.0	0.0	0.15209960E+00	0.20163660E-02	0.64695680E+08
37	0.0	0.0	0.78125000E-01	0.13150570E-02	0.64695680E+08
38	0.0	0.0	0.29541020E-01	0.63091520E-03	0.64695680E+08

ZEROTH THROUGH THIRD MOMENTS OF THE DISTRIBUTION AND THEIR VARIANCES

TYPE	MOMENT/CC	VARIANCE	STANDARD DEVIATION
0	0.2747E+13	0.3632E+18	0.6027E+09
1	0.5475E+08	0.6470E+08	0.8043E+04
2	0.1844E+04	0.1891E+00	0.4348E+00
3	0.1511E+00	0.2770E-05	0.1664E-02

表-5

**** POROSITY CHARACTERISTICS ****

SN841-76-33

***** INPUT DATA NAME --- FLUGEN TEST SAMPLE FG00101 GEOMETRICAL DENSITY **94.16 PERCENT TD

NO	DIAMETER RANGE <MICROMETER>	OBSERVED PORE SECTIONS <NO./CM**2>	NO. OF PORE <NO./CC>	PORE FREQUENCY <NO./CC.MICRON>	STANDARD DEVIATION <NO./CC.MICRON>	PORE VOLUME <CC>	INCREMENTAL VOLUME FRACTION <PERCENT>	CUMULATIVE VOLUME FRACTION <PERCENT>
1	0.03---	0.04	0.94712E+06	0.80921E+11	0.89912E+13	0.92657E+11	0.20603E-05	0.20603E-03
2	0.04---	0.05	0.15389E+07	0.15168E+12	0.13789E+14	0.71488E+11	0.79852E-05	0.79852E-03
3	0.05---	0.07	0.23673E+07	0.21950E+12	0.15679E+14	0.51716E+11	0.23604E-04	0.23604E-02
4	0.07---	0.08	0.30543E+07	0.26226E+12	0.16391E+14	0.40911E+11	0.55645E-04	0.55645E-02
5	0.08---	0.10	0.35717E+07	0.30094E+12	0.16719E+14	0.31891E+11	0.11874E-03	0.11874E-01
6	0.10---	0.12	0.40428E+07	0.35131E+12	0.14052E+14	0.19253E+11	0.26190E-03	0.26190E-01
7	0.12---	0.16	0.61174E+07	0.35198E+12	0.10057E+14	0.11134E+11	0.53328E-03	0.53328E-01
8	0.16---	0.20	0.58372E+07	0.29321E+12	0.73302E+13	0.76989E+10	0.89533E-03	0.89533E-01
9	0.20---	0.25	0.57089E+07	0.24630E+12	0.49260E+13	0.46767E+10	0.14690E-02	0.14690E+00
10	0.25---	0.32	0.57002E+07	0.19461E+12	0.27830E+13	0.24084E+10	0.23612E-02	0.23612E+00
11	0.32---	0.41	0.47225E+07	0.12931E+12	0.14368E+13	0.12960E+10	0.32925E-02	0.32925E+00
12	0.41---	0.52	0.34476E+07	0.77493E+11	0.70448E+12	0.71126E+09	0.40796E-02	0.40796E+00
13	0.52---	0.66	0.24557E+07	0.43420E+11	0.31015E+12	0.36532E+09	0.46692E-02	0.46692E+00
14	0.66---	0.82	0.14743E+07	0.21685E+11	0.13553E+12	0.20853E+09	0.46010E-02	0.46010E+00
15	0.82---	1.00	0.87665E+06	0.10490E+11	0.58279E+11	0.12348E+09	0.41391E-02	0.41391E+00
16	1.00---	1.25	0.81689E+06	0.93058E+10	0.37223E+11	0.54208E+08	0.69376E-02	0.69376E+00
17	1.25---	1.60	0.24083E+06	0.20266E+10	0.57904E+10	0.16158E+08	0.30706E-02	0.30706E+00
18	1.60---	2.00	0.69196E+05	0.46976E+09	0.11744E+10	0.65201E+07	0.14345E-02	0.14345E+00
19	2.00---	2.50	0.26612E+05	0.14385E+09	0.28769E+09	0.26488E+07	0.85791E-03	0.85791E-01
20	2.50---	3.20	0.12703E+05	0.50115E+08	0.71593E+08	0.10060E+07	0.60743E-03	0.60743E-01
21	3.20---	4.10	0.62486E+04	0.18297E+08	0.20330E+08	0.44863E+06	0.46587E-03	0.46587E-01
22	4.10---	5.20	0.35407E+04	0.78447E+07	0.71315E+07	0.23220E+06	0.41298E-03	0.41298E-01
23	5.20---	6.60	0.24972E+04	0.40670E+07	0.29050E+07	0.12919E+06	0.43735E-03	0.43735E-01
24	6.60---	8.20	0.10953E+04	0.25140E+07	0.15712E+07	0.79713E+05	0.53340E-03	0.53340E-01
25	8.20---	10.00	0.16706E+04	0.24486E+07	0.13603E+07	0.46413E+05	0.96612E-03	0.96612E-01
26	10.00---	12.50	0.44026E+03	0.32747E+06	0.13099E+06	0.17995E+05	0.24413E-03	0.24413E-01
27	12.50---	16.00	0.54691E+03	0.33063E+06	0.94467E+05	0.10216E+05	0.50094E-03	0.50094E-01
28	16.00---	20.00	0.49964E+03	0.26536E+06	0.66341E+05	0.68401E+04	0.81032E-03	0.81032E-01
29	20.00---	25.00	0.45247E+03	0.20720E+06	0.41440E+05	0.39685E+04	0.12357E-02	0.12357E+00
30	25.00---	32.00	0.40258E+03	0.14655E+06	0.20936E+05	0.19173E+04	0.17763E-02	0.17763E+00
31	32.00---	41.00	0.28474E+03	0.83270E+05	0.92522E+04	0.94904E+03	0.21201E-02	0.21201E+00
32	41.00---	52.00	0.17162E+03	0.41224E+05	0.37476E+04	0.47144E+03	0.21702E-02	0.21702E+00
33	52.00---	66.00	0.96094E+02	0.18531E+05	0.13236E+04	0.21562E+03	0.19927E-02	0.19927E+00
34	66.00---	82.00	0.45351E+02	0.73100E+04	0.45687E+03	0.10792E+03	0.15510E-02	0.15510E+00
35	82.00---	100.00	0.21031E+02	0.29205E+04	0.16225E+03	0.54001E+02	0.11523E-02	0.11523E+00
36	100.00---	125.00	0.10621E+02	0.11724E+04	0.46897E+02	0.20271E+02	0.87405E-03	0.87405E-01
37	125.00---	160.00	0.43175E+01	0.36532E+03	0.10438E+02	0.67521E+01	0.55349E-03	0.55349E-01
38	160.00---	200.00	0.12982E+01	0.10023E+03	0.25057E+01	0.23658E+01	0.30605E-03	0.30605E-01
(TOTAL)			0.53841E+08	0.27473E+13		0.57521E-01		0.57521E+01

***** THE VALUES WRITTEN BELOW ARE CALCULATED FROM PORES NUMBER IN EACH CELL *****

表-6

STEHLER AND H. ASSMAN'S MODEL

BURNUP MWDT	PORE DISAPPEAR	SWELLING	DENSIFY PERCENT
1000.00000	2.25427	0.10000	3.39785
2000.00000	1.71181	0.20000	3.84030
3000.00000	1.55036	0.30000	3.90175
4000.00000	1.45666	0.40000	3.89546
5000.00000	1.38274	0.50000	3.86938
6000.00000	1.31900	0.60000	3.83312
7000.00000	1.26201	0.70000	3.79010
8000.00000	1.21007	0.80000	3.74204
9000.00000	1.16224	0.90000	3.68988
10000.00000	1.11780	1.00000	3.63432
11000.00000	1.07631	1.10000	3.57580
12000.00000	1.03739	1.20000	3.51473
13000.00000	1.00073	1.30000	3.45139
14000.00000	0.96611	1.40000	3.38601
15000.00000	0.93329	1.50000	3.31863
16000.00000	0.90210	1.60000	3.25001
17000.00000	0.87241	1.70000	3.17971
18000.00000	0.84406	1.80000	3.10806
19000.00000	0.81693	1.90000	3.03519
20000.00000	0.79092	2.00000	2.96119
21000.00000	0.76595	2.10000	2.88616
22000.00000	0.74193	2.20000	2.81018
23000.00000	0.71879	2.30000	2.73333
24000.00000	0.69648	2.39999	2.65564
25000.00000	0.67498	2.49999	2.57714
26000.00000	0.65425	2.59999	2.49787
27000.00000	0.63425	2.69999	2.41787
28000.00000	0.61497	2.79999	2.33715
29000.00000	0.59637	2.89999	2.25575
30000.00000	0.57842	2.99999	2.17370

表-7

M. C. J. CARJSON, S MODEL

		DENSIFY PERCENT				
		1000.0(K)	1100.0(K)	1200.0(K)	1300.0(K)	1400.0(K)
1000.00	MWD/T	0.845E+00	0.844E+00	0.842E+00	0.841E+00	0.839E+00
2000.00	MWD/T	0.146E+01	0.146E+01	0.145E+01	0.145E+01	0.144E+01
3000.00	MWD/T	0.192E+01	0.191E+01	0.190E+01	0.189E+01	0.188E+01
4000.00	MWD/T	0.227E+01	0.226E+01	0.224E+01	0.223E+01	0.222E+01
5000.00	MWD/T	0.254E+01	0.252E+01	0.251E+01	0.249E+01	0.247E+01
6000.00	MWD/T	0.275E+01	0.273E+01	0.271E+01	0.269E+01	0.267E+01
7000.00	MWD/T	0.293E+01	0.290E+01	0.286E+01	0.285E+01	0.283E+01
8000.00	MWD/T	0.307E+01	0.304E+01	0.301E+01	0.298E+01	0.295E+01
9000.00	MWD/T	0.318E+01	0.315E+01	0.312E+01	0.309E+01	0.305E+01
10000.00	MWD/T	0.328E+01	0.324E+01	0.321E+01	0.317E+01	0.313E+01
11000.00	MWD/T	0.336E+01	0.332E+01	0.328E+01	0.324E+01	0.320E+01
12000.00	MWD/T	0.342E+01	0.338E+01	0.334E+01	0.329E+01	0.325E+01
13000.00	MWD/T	0.348E+01	0.343E+01	0.339E+01	0.334E+01	0.328E+01
14000.00	MWD/T	0.352E+01	0.348E+01	0.342E+01	0.337E+01	0.331E+01
15000.00	MWD/T	0.356E+01	0.351E+01	0.345E+01	0.339E+01	0.333E+01
16000.00	MWD/T	0.359E+01	0.354E+01	0.348E+01	0.341E+01	0.334E+01
17000.00	MWD/T	0.362E+01	0.356E+01	0.349E+01	0.342E+01	0.334E+01
18000.00	MWD/T	0.364E+01	0.358E+01	0.350E+01	0.342E+01	0.333E+01
19000.00	MWD/T	0.366E+01	0.359E+01	0.351E+01	0.342E+01	0.331E+01
20000.00	MWD/T	0.367E+01	0.360E+01	0.351E+01	0.340E+01	0.328E+01
21000.00	MWD/T	0.368E+01	0.360E+01	0.350E+01	0.338E+01	0.325E+01
22000.00	MWD/T	0.369E+01	0.360E+01	0.349E+01	0.336E+01	0.320E+01
23000.00	MWD/T	0.369E+01	0.359E+01	0.347E+01	0.332E+01	0.314E+01
24000.00	MWD/T	0.369E+01	0.358E+01	0.344E+01	0.327E+01	0.306E+01
25000.00	MWD/T	0.368E+01	0.356E+01	0.341E+01	0.321E+01	0.296E+01
26000.00	MWD/T	0.367E+01	0.354E+01	0.337E+01	0.314E+01	0.283E+01
27000.00	MWD/T	0.366E+01	0.351E+01	0.331E+01	0.305E+01	0.268E+01
28000.00	MWD/T	0.365E+01	0.348E+01	0.325E+01	0.293E+01	0.248E+01
29000.00	MWD/T	0.363E+01	0.343E+01	0.317E+01	0.279E+01	0.223E+01
30000.00	MWD/T	0.360E+01	0.338E+01	0.307E+01	0.261E+01	0.190E+01

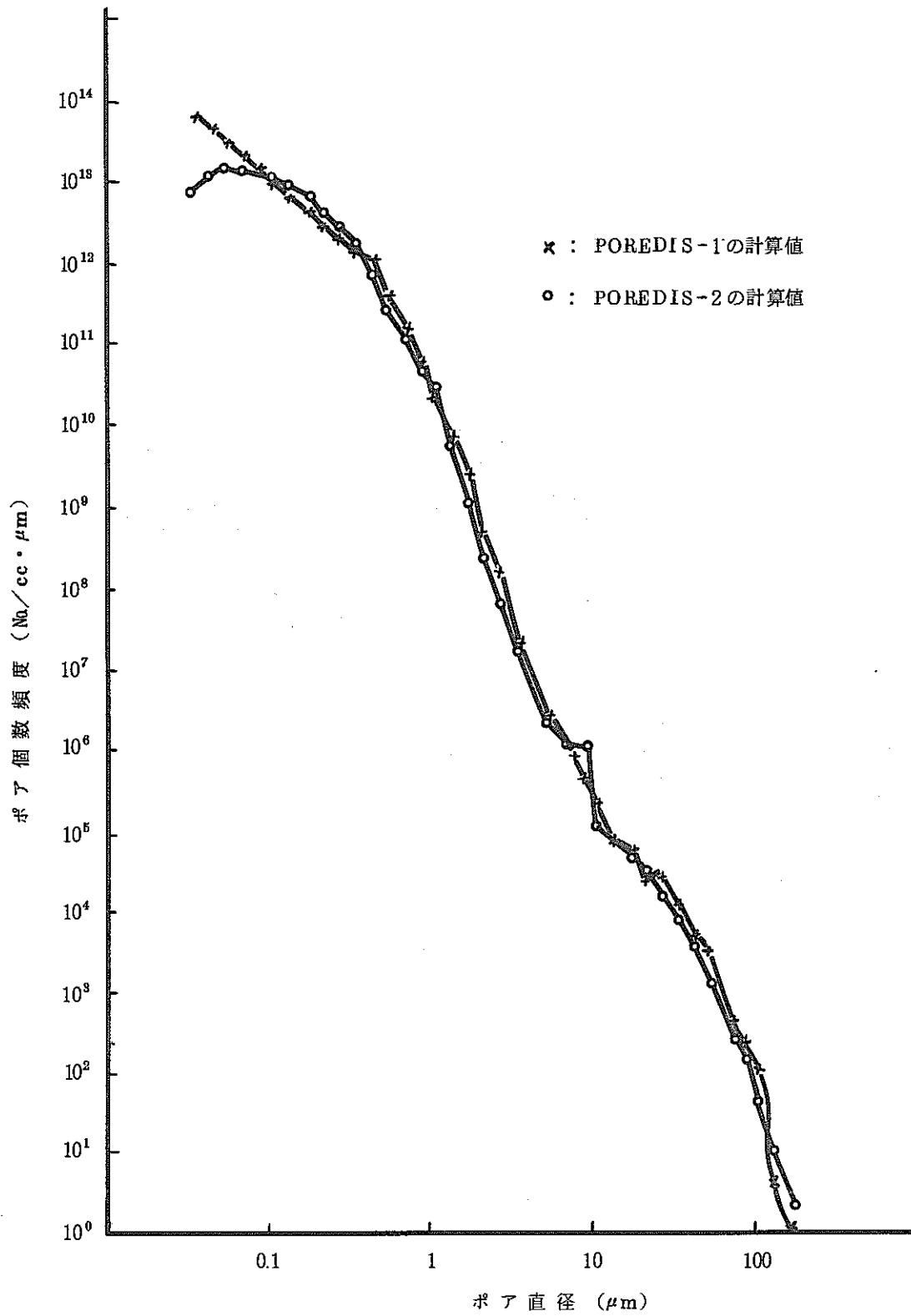


図 14 ポア径个数頻度分布

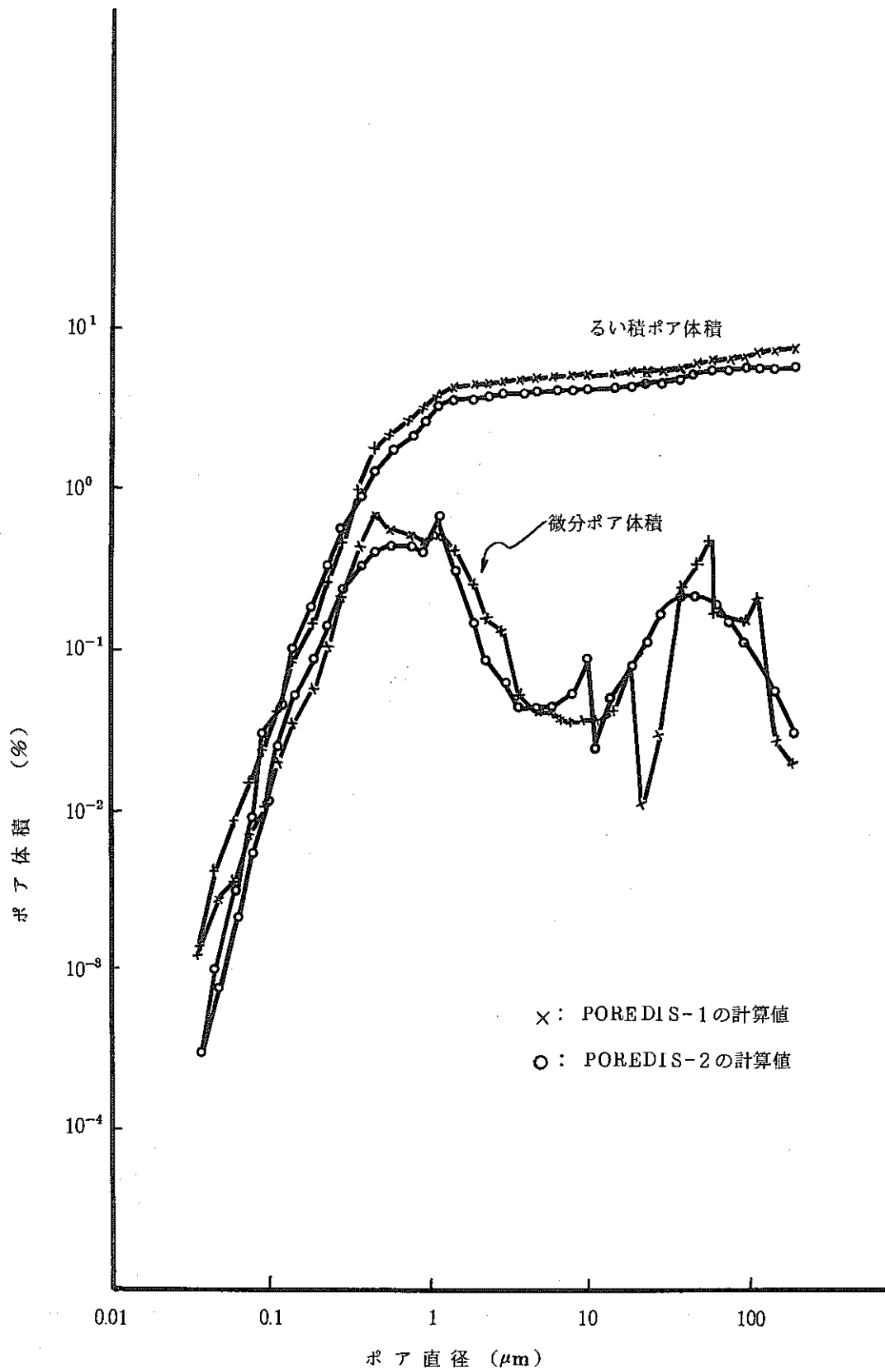


図 15 ポア体積分布

VI. テスト評価および考察

1. 実測密度と計算密度の比較

製造条件、密度の異なる12種類のペレットについて、その金相写真から画像解析装置およびマニュアル測定によって断面径個数分布を測定した後、この計算コードを使ってポア分布を計算した。表-8に、ペレットの実測密度と計算密度との比較を示した。

数多くのポアはペレット中にランダムに分散しているので、ある任意の断面上でのポア断面比率はペレット空孔率と等しいはずである。そこで金相面上に占めるポア面積比率から求めたペレット密度（面積密度）も合わせて表中に示した。

表-8

試料名	実測密度（%TD）		計算密度（%TD）			面積密度 （%TD）
	寸法密度	水浸密度	POREDIS-1	POREDIS-2		
				A*	B**	
FG00101	94.16	94.44	92.99	94.25	92.09	92.09
FG00301	95.34	96.17	96.33	95.10	92.77	95.01
FG00501	95.38	96.41	96.47	95.72	93.60	95.35
EP00401	94.36	-	94.35	94.21	91.84	92.52
JY00101	92.78	93.75	95.18	94.19	93.11	93.77
JY00501	93.63	93.89	95.03	96.77	95.63	93.59
GT00101	82.55	84.37	80.24	81.54	76.04	75.03
GT00501	83.52	84.68	82.69	83.01	78.04	76.22
HD12601	91.81	-	91.35	-	-	93.97
HD12602	91.41	-	91.08	-	-	93.30
HD12603	92.42	-	91.24	-	-	94.22
HD11601	92.59	-	91.35	-	-	94.38

* Sheil の式を使って計算した各級間のポア個数から計算した値

** Nicholson の式を使って計算した値

POREDIS-1 および POREDIS-2 の Sheil の式から計算した密度の値は実測値とよく一致している。しかし、POREDIS-2 の Nicholson の式から計算した値は、実測密度よりも若干低めの値が計算される。

2. Sheil の式と Saltykov — Schwartz の式の計算結果

単位面積当りのポア断面個数から単位体積当りのポア個数を計算するのに POREDIS-1 では(5)

式の Saltykov-Schwartz の式を用いており、POREDIS-2 では(7)式の Sheil の式を用いている。計算式がちがうことによって、どの程度計算結果がちがうかを表 9 に示した。

級間隔、級間数、各級間での断面数頻度は同じ値を用いた。表 9 の結果からわかるように各級間のポア個数、ポア体積ともにほぼよく一致しているが、Sheil の式の方がポア数をやや少なめに計算し、ポア総数で約 4 %ポア総体積でも約 4 %程度少なめに計算される。

3. 級間数の影響

ポア断面個数分布から、ポア個数分布を推定する解析は、実験的に決定される断面径分布を不連続な大きさの級間に分け、各級間のポアは同じ大きさの直径を持つものとみなして計算を行なうので、ポア径級間が多い程より正確でなめらかな分布が得られる。そこで Cell 数をパラメータにとって POREDISE-2 を使い計算を行ない結果を図 16、および表 10 に示した。

表 10

級間数	ポア総個数	ポア平均径	ポア総体積	ペレット密度
6	2.127×10^{12} 個	0.145 μm	2.91×10^{-2} cc	97.09%
12	2.541×10^{12} "	0.154 "	4.02×10^{-2} "	95.98 "
24	2.712×10^{12} "	0.167 "	5.63×10^{-2} "	94.37 "
38	2.747×10^{12} "	0.172 "	5.75×10^{-2} "	94.25 "
48	2.774×10^{12} "	0.174 "	5.97×10^{-2} "	94.03 "

図 16 のように級間数が 6 程度でもポア個数頻度の値は級間数 48 に比べ大きく変わらないが、級間数が多くなるにつれて各級間のポア数から計算されるポア平均径、ポア総体積はだんだん収束してくる。

表-9

NO	DIAMETER RANGE		OBSERVED PORE SECTIONS <NO./CM**2>	Sheil の式による計算結果		Saltykov - Shwartyの式による計算結果	
	<MICROMETER>			NO OF PORE <NO./CC>	PORE VOLUME < CC >	NO OF VOIDS <PER 1 CM**3>	VOID VOLUME <CM**3>
1	0.03---	0.04	0.94712E+06	0.80921E+11	0.20603E-05	0.63358E+11	0.16123E-05
2	0.04---	0.05	0.15389E+07	0.15168E+12	0.79852E-05	0.13704E+12	0.72108E-05
3	0.05---	0.07	0.23873E+07	0.21950E+12	0.23604E-04	0.21616E+12	0.23233E-04
4	0.07---	0.08	0.36543E+07	0.26226E+12	0.55645E-04	0.26745E+12	0.56717E-04
5	0.08---	0.10	0.35717E+07	0.30094E+12	0.11874E-03	0.36332E+12	0.11962E-03
6	0.10---	0.12	0.48428E+07	0.35131E+12	0.26190E-03	0.35900E+12	0.26750E-03
7	0.12---	0.16	0.61174E+07	0.35198E+12	0.53328E-03	0.36943E+12	0.55944E-03
8	0.16---	0.20	0.58372E+07	0.29321E+12	0.89533E-03	0.30854E+12	0.94167E-03
9	0.20---	0.25	0.57085E+07	0.24630E+12	0.14690E-02	0.25905E+12	0.15442E-02
10	0.25---	0.32	0.57002E+07	0.19481E+12	0.23612E-02	0.20610E+12	0.24968E-02
11	0.32---	0.41	0.47221E+07	0.12931E+12	0.32925E-02	0.13748E+12	0.34985E-02
12	0.41---	0.52	0.34476E+07	0.77493E+11	0.40798E-02	0.82469E+11	0.43394E-02
13	0.52---	0.66	0.24357E+07	0.43420E+11	0.46692E-02	0.46427E+11	0.49900E-02
14	0.66---	0.82	0.14743E+07	0.21685E+11	0.46010E-02	0.23269E+11	0.49345E-02
15	0.82---	1.00	0.87665E+06	0.10490E+11	0.41391E-02	0.11244E+11	0.44341E-02
16	1.00---	1.25	0.81689E+06	0.93058E+10	0.69376E-02	0.10016E+11	0.74633E-02
17	1.25---	1.60	0.24083E+06	0.20266E+10	0.30706E-02	0.21775E+10	0.32974E-02
18	1.60---	2.00	0.69196E+05	0.46976E+09	0.14345E-02	0.50535E+09	0.15424E-02
19	2.00---	2.50	0.26612E+05	0.14385E+09	0.85791E-03	0.15421E+09	0.91922E-03
20	2.50---	3.20	0.12703E+05	0.50115E+08	0.60743E-03	0.53549E+08	0.64873E-03
21	3.20---	4.10	0.62486E+04	0.18297E+08	0.46587E-03	0.19502E+08	0.49630E-03
22	4.10---	5.20	0.35407E+04	0.78447E+07	0.41298E-03	0.83198E+07	0.43777E-03
23	5.20---	6.60	0.24972E+04	0.40670E+07	0.43735E-03	0.43214E+07	0.46447E-03
24	6.60---	8.20	0.16953E+04	0.25140E+07	0.53340E-03	0.27070E+07	0.57407E-03
25	8.20---	10.00	0.16706E+04	0.24486E+07	0.96612E-03	0.26319E+07	0.10379E-02
26	10.00---	12.50	0.44026E+03	0.32747E+06	0.24413E-03	0.33675E+06	0.25092E-03
27	12.50---	16.00	0.54891E+03	0.33063E+06	0.50094E-03	0.34868E+06	0.52801E-03
28	16.00---	20.00	0.49964E+03	0.26536E+06	0.81032E-03	0.28114E+06	0.85804E-03
29	20.00---	25.00	0.45247E+03	0.20720E+06	0.12357E-02	0.21949E+06	0.13084E-02
30	25.00---	32.00	0.40258E+03	0.14655E+06	0.17763E-02	0.15596E+06	0.18894E-02
31	32.00---	41.00	0.26474E+03	0.83270E+05	0.21201E-02	0.86962E+05	0.22639E-02
32	41.00---	52.00	0.17162E+03	0.41224E+05	0.21702E-02	0.44097E+05	0.23203E-02
33	52.00---	66.00	0.96094E+02	0.18531E+05	0.19927E-02	0.19887E+05	0.21375E-02
34	66.00---	82.00	0.45851E+02	0.73100E+04	0.15510E-02	0.78798E+04	0.16710E-02
35	82.00---	100.00	0.21031E+02	0.29205E+04	0.11523E-02	0.31439E+04	0.12399E-02
36	100.00---	125.00	0.10621E+02	0.11724E+04	0.87405E-03	0.12665E+04	0.93921E-03
37	125.00---	160.00	0.43175E+01	0.36532E+03	0.55349E-03	0.39331E+03	0.59559E-03
38	160.00---	200.00	0.12982E+01	0.10023E+03	0.30605E-03	0.10820E+03	0.33023E-03
<TOTAL>			0.53841E+08	0.27473E+13	0.27521E-01	0.28033E+13	0.61428E-01

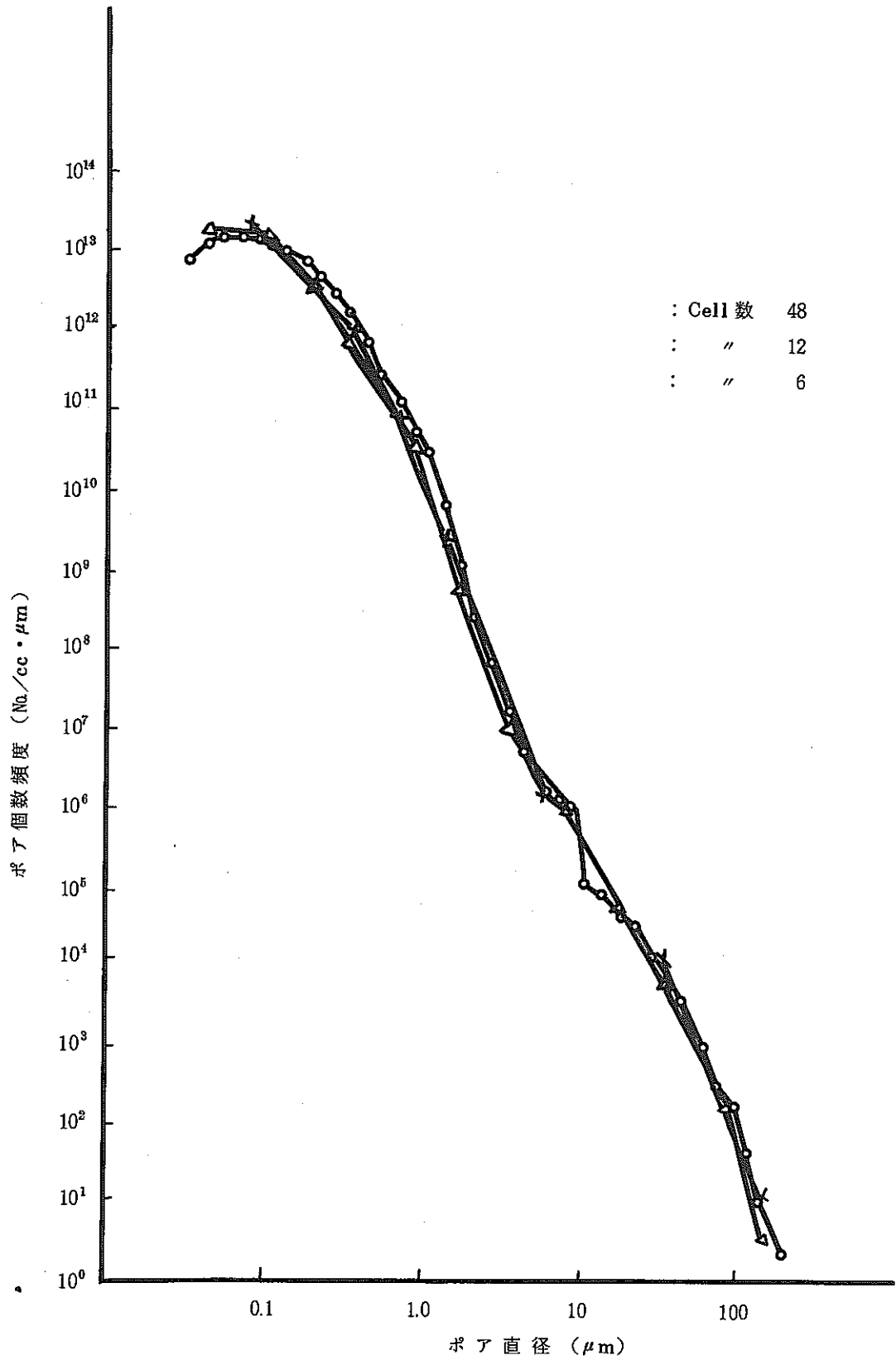


图 16

4. ペレットの製造条件とポア分布の関係

(1) ポア形成剤（密度降下剤）とポア体積分布

図16にポア形成剤を入れないペレット(A)とポア形成剤（直径 $100\mu\text{m}$ ）を 0.35w/o 入れたペレット(B)のポア体積分布を示した。

ポア形成剤が入っているとポア体積分布曲線に2つの山ができるので、ポア体積分布曲線から製造時にポア形成剤を加えたかどうかがわかる。

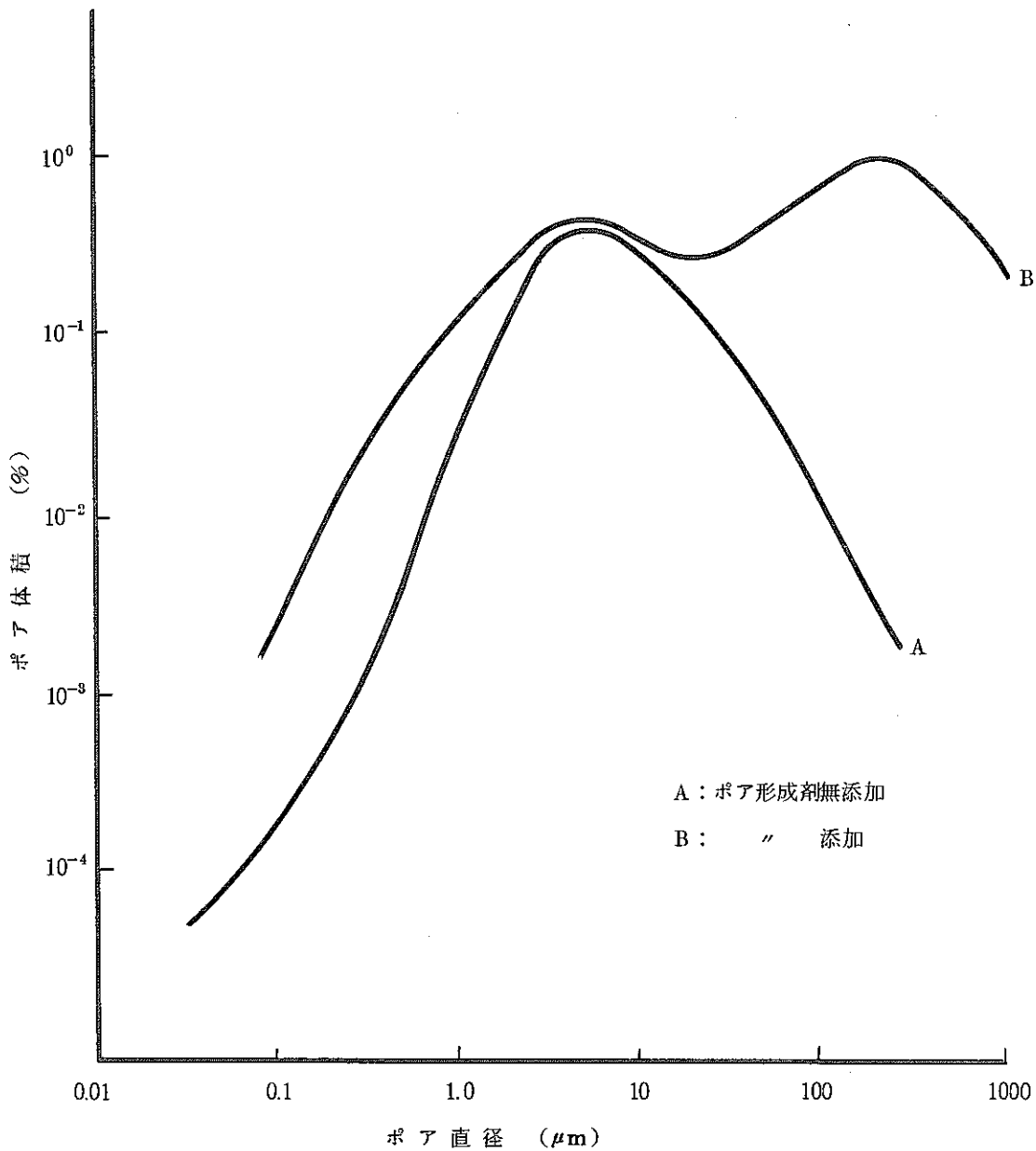
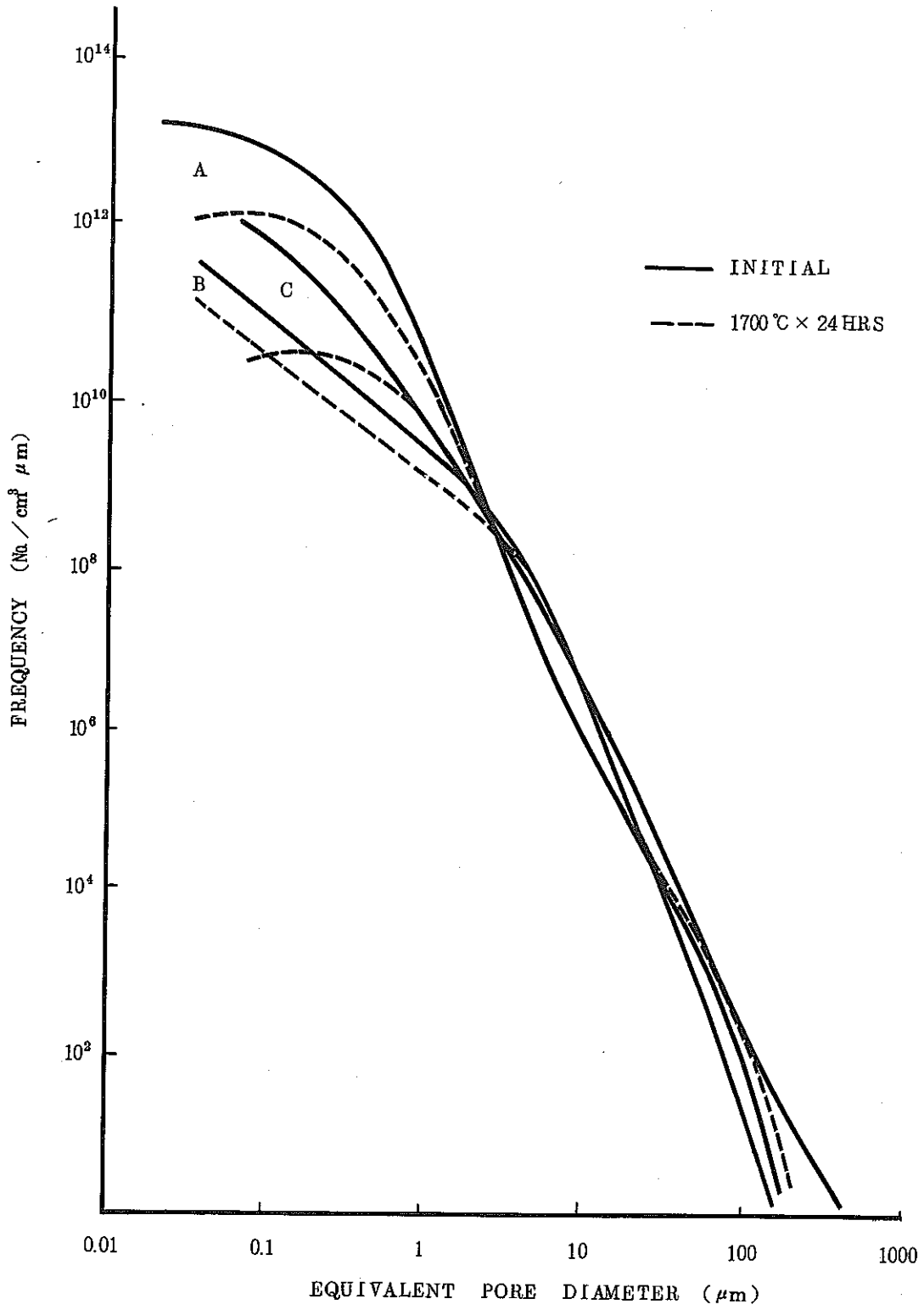


図16 ポア体積分布

(ロ) 焼結温度、焼結時間とポア個数分布

図17には、1650℃×2時間焼結したペレット(A)、1730℃×3時間焼結したペレット(B)、1600℃×2時間焼結したペレット(C)のポア個数頻度分布を実線で示し、それらのペレットを1700℃で24時間再焼結した場合のポア個数頻度分布を点線で示した。

焼結温度が高く、焼結時間も長いBの焼結ペレットではA、Cの焼結ペレットに比べ焼結が進んでおり微少ポアの個数頻度が少なくなっている。しかし、1650℃で焼結したAと1600℃で焼結したCとを比較すると焼結温度が低いCの方が微少ポアの個数頻度が少なくなっており、予想とは反対の結果になっている。これは、Pu高化度、原料粉特性がAとCとで異なりCの方がPu富化度が多く、焼結性の良い粉を使っている為である。1700℃で24時間再焼結すると微少ポアは個数が減少するが大きなポアはほとんど変わらずポア個数頻度分布の形状は最初の分布形状と似ている。



☒-17 PORE SIZE FREQUENCY DISTRIBUTION

VII. 参 考 文 献

- 1) "Quantitative Microscopy" by Robert T. Dehoff, Frederik N. Rhines, p162-168
- 2) H. A. Treibs : "Linest. A Fortran V Program for the Estimation of Linear Properties of Particle Size Distribution" HEDL-TME-71-188.
- 3) E. Sheil : "Die Prerechnung der Anzahl und Grossenverteilung Kugelformiger Kristalle in undeurchsichtigen Körpern mit Hilfe der durch einen ebenen Schnitt erhaltenen Statistische", Z. Anorg. Allgen. Chem. 201, P259 (1931).
- 4) E. Sheil : "Statistische Gefügeuntersuchungen", I. Z. Metallk 27 p199 (1935).
- 5) W. L. Nicholson, D. R. Merckx, "Unfolding Particle Size Distributions", Technometrics Vol. 11 No.4., p707 (1969).
- 6) W. L. Nicholson, "Estimation of Linear Properties of Particle Size Distributions", Biometrika Vol. 57, No.2 p273 (1970).
- 7) M. C. J. Carlson, "Densification in Maxed Oxide Fuel during Fast Reactor Irradiation", Vol.22 p335 (1974).
- 8) H. Stehle, H. Assman, "The Dependence of In-reactor UO_2 Densification on Temperature and Microstructure" vol.52 p303 (1974).

付 録

POREDIS-1 の計算コードリスト

POREDIS-2 の計算コードリスト

PPPPP	00000	RRRRRR	EEEEEEE	DDDDD	IIII	SSSSS	11
PP P	00 O	RR R	EE	DD D	II	SS S	111
PP P	00 O	RR R	EE	DD D	II	SS S	1111
PP P	00 O	RR R	EE	DD D	II	SS	11
PPPPP	00 O	RRRRRR	EEEEEE	DD D	II	SSSSS	11
PP	00 O	RRR	EE	DD D	II	SS	11
PP	00 O	RR R	EE	DD D	II	S SS	11
PP	00 O	RR R	EE	DD D	II	S SS	11
PPP	0000	RR RR	EEEEEE	DDDD	IIII	SSSS	1111

(000	22222	2222)
((0 0	22 22	2 22))
((00 0	22 22	22 22))
((00 0	22 22	22 22))
((00 0	2222	2222))
((00 0	22	22))
((00 0	22	22))
((0 0	22	22))
(000	2222222	2222222)

SOURCE LIST

```

C THIS PROGRAM ESTIMATES A DISTRIBUTION OF VOID SIZES FROM A
C 1DISTRIBUTION OF SECTION DIAMETERS
C THE THEORY USED TO DEVELOP THE PROGRAM IS BASED ON SCHWARTZ-
C 1SALTYKOF METHOD
C
C *****NOMENCLATURE*****
C L =INPUT CASE NUMBER
C N =GROUP NUMBER OF MAXIMUM VOID DIAMETER
C D(I) =LOWER VOID DIAMETER OF I GROUP *****MICROMETER
C D(1) =DIAMETER RESOLUTION LIMIT
C C(I,J)=SALTYKOV,S COEFFICIENTS
C F(I) =VOID FREQUENCY OF I GROUP
C TITLE =SAMPLE NAME
C ANA(I)=NO SECTIONS PER 1 CM**2 OF I GROUP
C VV(I) =VOID VOLUME PER 1 CM**3 OF I GROUP *****CM**3
C VN(I) =VOID NUMBER PER 1 CM**3 OF I GROUP
C ANASUM=ANA(I) TOTAL
C VNSUM =TOTAL VOID NUMBER PER 1 MM**3
C DM(I) =MEAN DIAMETER OF I GROUP *****MM
C VMD =MEAN VOID DIAMETER *****CM-
C DS =STANDARD DEVIATION OF VOID DIAMETER *****CM
C CNF(I)=CUMULATIVE VOID NUMBER FRACTION
C CVF(I)=CUMULATIVE VOID VOLUME FRACTION
C RNF(I)=RELATIVE VOID NUMBER FRACTION
C RVF(I)=RELATIVE VOID VOLUME FRACTION
C VF =VOID FRACTION *****PERCENT
C PD =PELLET DENSITY *****PERCENT
C *****INPUT DATA*****
C L ,TITLE ,N ,D(I) ,D(1) ,F(I) ,
C EXECUTION
0001 DIMENSION TITLE(20),D(50),ANA(50),C(50,50),VN(50),VV(50),DM(50),
1RNF(50),CNF(50),RVF(50),CVF(50),F(50),FR(50),AF(50)
0002 3000 READ(5,100)L
0003 100 FORMAT(I10)
0004 IF(L.EQ.0) GO TO 1000
0005 READ(5,1)(TITLE(M),M=1,20)
0006 1 FORMAT(20A4)
0007 READ(5,50)N,D(1)
0008 50 FORMAT(I10,F10,5)
0009 READ(5,2)(D(I+1),F(I),I=1,N)
0010 2 FORMAT(F10,5,E10,3)
0011 ANASUM=0,0
0012 DO 3 I=1,N
0013 ANA(I)=F(I)*(D(I+1)-D(I))
0014 ANASUM=ANASUM+ANA(I)
0015 3 CONTINUE
0016 DO 6 I=1,N
0017 DO 4 J=I,N
0018 C(I,J)=(SQRT(D(J+1)**2-D(I)**2)-SQRT(D(J+1)**2-D(I+1)**2))*10,0**
1-4)
0019 4 CONTINUE
0020 IF(1.EQ.1) GO TO 6
0021 II=I-1
0022 DO 5 J=1,II
0023 C(I,J)=0,0

```

SOURCE LIST

```

0024      5 CONTINUE
0025      6 CONTINUE
          C      CALCULATION OF VN(I)
0026      DO 7 I=1,N
0027      C(I,N+1)=ANA(I)
0028      7 CONTINUE
0029      NN=N+1
0030      JN=N-1
0031      VN(N)=C(N,NN)/C(N,N)
0032      DO 9 I=1,JN
0033      SUM=0,0
0034      DO 8 J=1,I
0035      JJ=J-1
0036      NI=N-I
0037      NJ=N-JJ
0038      SUM=SUM+C(NI,NJ)*VN(NJ)
0039      8 CONTINUE
0040      VN(NI)=(C(NI,NN)-SUM)/C(NI,NI)
0041      9 CONTINUE
          C      CALCULATION OF MEAN DIAMETER, STANDARD DEVIATION, VOID VOLUME AND
          C      1 PELLETT DENSITY
0042      DO 10 I=1,N
0043      DM(I)=(D(I+1)+D(I))*10.0**(4)/2.0
0044      10 CONTINUE
0045      VNSUM=0,0
0046      VNDSUM=0,0
0047      VVSUM=0,0
0048      DO 11 I=1,N
0049      VV(I)=VN(I)*3.14*DM(I)**3/6.0
0050      VNSUM=VNSUM+VN(I)
0051      VNDSUM=VNDSUM+VN(I)*DM(I)
0052      VVSUM=VVSUM+VV(I)
0053      FR(I)=VN(I)/(D(I+1)-D(I))
0054      11 CONTINUE
0055      VMD=VNDSUM/VNSUM
0056      AFSUM=0,0
0057      S=0,0
0058      DO 12 I=1,N
0059      S=S+(DM(I)-VMD)**2*VN(I)
0060      AF(I)=DM(I)**2*3.1415*ANA(I)*100,0/4,0
0061      AFSUM=AFSUM+AF(I)
0062      12 CONTINUE
0063      DENSA=100,0-AFSUM
0064      DS=SQRT(S/VNSUM)
0065      VF=VVSUM*100,0
0066      PD=100,0-VF
0067      13 DO 15 I=1,N
0068      RNF(I)=VN(I)*100,0/VNSUM
0069      RVF(I)=VV(I)*100,0
0070      IF(I,GT,1) GO TO 14
0071      CNF(I)=RNF(I)
0072      CVF(I)=RVF(I)
0073      GO TO 15
0074      14 CNF(I)=CNF(I-1)+RNF(I)
0075      CVF(I)=CVF(I-1)+RVF(I)

```

SOURCE LIST

```

0076      15 CONTINUE
          C DATA PRINT
0077      WRITE(6,20)
0078      20 FORMAT(1H1,/,20X,55H*** VOID DISTRIBUTION D
          1 A T A *** )
0079      WRITE(6,16)(TITLE(M),M=1,20)
0080      16 FORMAT(1H0,20X,20A4)
0081      WRITE(6,21)
0082      21 FORMAT(1H0,136H-----
          1-----
          2-----)
0083      WRITE(6,51)
0084      51 FORMAT(1H ,2X,134HNO DIAMETER RANGE NO OF SECTIONS NO OF V
          10IDS RELATIVE VOID VOID NO VOID VOLUME RELATIVE V
          20ID CUMULATIVE VOID)
0085      WRITE(6,52)
0086      52 FORMAT(1H ,58X,27HNO FRACTION FREQUENCY,20X,31HVOLUME FRACTI
          10N VOLUME FRACTION)
0087      WRITE(6,53)
0088      53 FORMAT(1H ,9X,123H<MICROMETER> <PER 1 CM**2> <PER 1 CM**3>
          1 <PERCENT> <NO/CC,MICRON> <CM**3> <PERCENT>
          2<PERCENT>)
0089      WRITE(6,21)
0090      WRITE(6,24)
0091      24 FORMAT(1H0)
0092      DO 26 I=1,N
0093      WRITE(6,25) I,D(I),D(I+1),ANA(I),VN(I),RNF(I),FR(I),VV(I),RVF(I),
          1CVF(I)
0094      25 FORMAT(1H ,1X I3,3X,F6,2,3H--,F6,2,7(4X,E12,5))
0095      26 CONTINUE
0096      WRITE(6,21)
0097      WRITE(6,28)ANASUM,VNSUM,VVSUM
0098      28 FORMAT(1H ,2X,7H<TOTAL>,17X,E12,5,4X,E12,5,36X,E12,5)
0099      WRITE(6,29)VMD
0100      29 FORMAT(1H0,/,6X,25H***** MEAN VOID DIAMETER ,25X,E10,3,5X,4H<CM>)
0101      WRITE(6,30)DS
0102      30 FORMAT(1H0,5X,38H***** VOID DIAMETER STANDARD DEVIATION,12X,E10,3,
          15X,4H<CM>)
0103      WRITE(6,31)VNSUM
0104      31 FORMAT(1H0,5X,35H***** TOTAL VOID NUMBER PER 1 CM**3,10X,E15,8,5X,
          14H<KO>)
0105      WRITE(6,32)VVSUM
0106      32 FORMAT(1H0,5X,35H***** TOTAL VOID VOLUME PER 1 CM**3,10X,E15,8,5X
          17H<CM**3>)
0107      WRITE(6,33)VF
0108      33 FORMAT(1H0,5X,19H***** VOID FRACTION,26X,F15,6,5X,9H<PERCENT>)
0109      WRITE(6,34)PD
0110      34 FORMAT(1H0,5X,20H***** PELLET DENSITY,25X,F15,6,5X,9H<PERCENT>)
0111      WRITE(6,79)DENSEA
0112      79 FORMAT(1H0,15X,30HDENSITY FROM PORE SECTION AREA,E15,8,9H<PERCENT>
          1)
0113      GO TO 3000
0114      1000 STOP
0115      END

```

SN841-76-33

*****1*****2*****3*****4*****5*****6*****7*****8*****9*****A*****B*****C*****D*****

FACOM 230 OS2/VS

SYSTEM OUTPUT

V-07 L-07 DATE 76.07.13 TIME 13.29

PPPPP	0000	RRRRR	EEEEEE	DDDD	IIII	SSSS	2222
PP P	00 0	RR R	EE	DD D	II	SS S	2 22
PP P	00 0	RR R	EE	DD D	II	SS S	22
PP P	00 0	RR R	EE	DD D	II	SS	22
PPPPP	00 0	RRRRR	EEEEEE	DD D	II	SSSS	2222
PP	00 0	RRR	EE	DD D	II	SS	22
PP	00 0	RR R	EE	DD D	II	S SS	22
PP	00 0	RR R	EE	DD D	II	S SS	22
PPP	0000	RR RR	EEEEEE	DDDD	IIII	SSSS	222222

```

(
(( 000 444 11 ))
(( 0 0 44 4 111 ))
(( 00 0 44 4 111 ))
(( 00 0 44 4 11 ))
(( 00 0 44 4 11 ))
(( 00 0 44 4 11 ))
(( 00 0 444444 11 ))
(( 0 0 4 11 ))
( 000 4 111 )

```

SOURCE LIST

```

C    THIS PROGRAM ESTIMATES A THREE-DIMENSIONAL SPACE DISTRIBUTION FROM
C    CORRESPONDING TWO-DIMENSIONAL SECTION DISTRIBUTION                   *
C    MEAN PARTICLE SIZE,PARTICLE COUNT,SPECIFIC SURFACE AREA,VOID FRACT   *
C    ION AND DENSITY ARE CALCULATED FROM ZERO TH THROUGH THIRD MOMENTS   *
C    OF THE DISTRIBUTION                                                   *
C    THE THEORY USED TO DEVELOP THIS PROGRAM IS BASED ON W,L,NICHOLSON   *
C    'S MATHEMATICAL THEORY.                                               *
C                                                                           *
C    ***** NOMENCLATURE *****                                       *
C    A    =AREA OF PICTURE                                                 *
C    L    =INPUT CASE NUMBER                                               *
C    TITLE =TITLE OR SAMPLE NAME                                         *
C    N    =CELL NUMBER                                                     *
C    MM   =OBSERVED CELL NUMBER                                           *
C    D(I) =PARTICLE RESOLUTION LIMIT                                       *
C    D(I) =LOWER CELL BOUNDARY SIZE OF NO I CELL                       *
C    DC   =CELL CENTER                                                     *
C    AN(I) =NUMBER OF PARTICLE SECTIONS PER 1 CM**2 IN NO I CELL       *
C    CW(I) =CELL WIDTH OF EACH CELL                                       *
C    H    =DIMENSIONLESS PORTION OF H FACTORS                             *
C    HUF =DIMENSIONLESS COEFFICENTS FOR UNFOLDING                       *
C    TH- =ESTIMATE OF SPECIFIC MOMENT (-)=2,1,2,3,                       *
C    VTH- =ESTIMATE OF VARIANCE OF SPECIFIC MOMENT (-)                   *
C    S-   =ESTIMATE OF STANDARD DEVIATION OF SPECIFIC MOMENT (-)       *
C    CPD(I) =CUMULATIVE PARTICLE DENSITY GEATER THAN I CELL             *
C    VCPD(I) =VARIANCE OF CPD(I)                                         *
C    SDVF =STANDARD DEVIATION OF VF1                                     *
C    VPD(I) =VARIANCE OF PD(I)                                             *
C    SPD(I) =SMOOTHED PARTICLE DENSITY                                     *
C    VSPD(I) =STANDARD DEVIATION OF SPD(I)                               *
C    SCPD(I) =STANDARD DEVIATION OF CPD(I)                               *
C    PDSUM =SUMATION OF PD(I)                                             *
C    RNF   =RELATIVE PARTICLE NUMBER FRACTION                             *
C    PSM1 =MEAN PARTICLE SIZE CALCULATED FROM SPECIFIC MOMENT           *
C    PSM2 =MEAN PARTICLE SIZE CALCULATED FROM PD                         *
C    PDS   =STANDARD DEVIATION OF PSM2                                     *
C    SSA   =SPECIFIC SURFACE AREA                                         *
C    SDSSA =STANDARD DEVIATION OF SSA                                     *
C    VF1   =PARTICLE FRACTION CALCULATED FROM SPECIFIC MOMENTS           *
C    VF2   =PARTICLE FRACTION CALCULATED FROM PD                         *
C    DENS- =MATRIX DENSITY CALCULATED FROM VF-                           *
C    PD(I) =ESTIMATED PARTICLES NUMBER PER 1 CM**3 IN NO I CELL         *
C    ANSUM =SUMATION OF AN(I)                                             *
C    PV(I) =PARTICLE VOLUME OF NO I CELL                                 *
C    PVSUM =SUMATION OF PV(I)                                             *
C    RVF   =RELATIVE PARTICLE VOLUME FRACTION                             *
C    CNF   =CUMULATIVE PARTICLE NUMBER FRACTION                           *
C    CVF   =CUMULATIVE PARTICLE VOLUME FRACTION                           *
C    DIVID1 =FIRST FITTING CURVE,S UPPER DIN LIMIT                       *
C    DIVID2 =SECOND FITTING CURVE,S UPPER DIN LIMIT                      *
C    ***** INPUT DATA *****                                       *
C    L,TITLE,N,                                                             *
C    D(I),D(I)----MICROMETER                                               *
C    DIN(I)    ----OBSERVED CELL CENTER -MICROMETER-                   *
C    FI(I)     ----KO/CM**2/MICROMETER                                   *

```

SOURCE LIST

```

C      DIVID1,DIVID2---MICROMETER
C      MM      ---DIN AND F1 CASE NUMBER
C      A      ---CM**2
C      V      ---CM**3
C      ***** EXECUTION *****
0001  DIMENSION TITLE(20),D(50),AN(50),H(6,50),HUF(50,50),OC(50),
      1CPD(50),VCPD(50),PD(50),VPD(50),PV(50),RNF(50),RVF(50),CNF(50),
      2CVF(50),CW(50),SPD(50),VSPD(50),SCPD(50),
      3DIN(100),F1(100),YY(50),F2(50),YYY(50),F3(50),
      4DD1(100),FF1(100),DD2(100),FF2(100),DD3(100),FF3(100),
      5PVOL(50),BU(50),DISAP(50),SWELL(50),ASS(50),DELTD(50),VDISF(50)
      6,TEMP(10),SUMPV(30,10),CARLSN(30,10),SHRIK1(30,10),AF(50)
0002  READ(5,104)N,D(1)
0003  104  FORMAT(110,F15,5)
0004  READ(5,105)(D(I+1),I=1,N)
0005  105  FORMAT(F15,5)
0006  1  READ(5,100)L
0007  100  FORMAT(I10)
0008  IF(L,EQ,0) GO TO 5000
0009  READ(5,101)(TITLE(M),M=1,20)
0010  101  FORMAT(20A4)
0011  READ(5,102)MM
0012  102  FORMAT(I10)
0013  READ(5,103)(DIN(I),F1(I),I=1,MM)
0014  103  FORMAT(F15,5,E10,3)
0015  READ(5,109)DIVID1,DIVID2
0016  109  FORMAT(2F10,5)
0017  READ(5,106)A,V
0018  106  FORMAT(F15,5,F15,5)
0019  READ(5,111)LLL
0020  111  FORMAT(I10)
0021  MM1=0
0022  MM2=0
0023  MM3=0
0024  DO 81 I=1,MM
0025  IF(DIN(I),GT,DIVID1) GO TO 82
0026  MM1=MM1+1
0027  DD1(MM1)=DIN(I)
0028  FF1(MM1)=F1(I)
0029  GO TO 81
0030  82  IF(DIN(I),GT,DIVID2) GO TO 83
0031  MM2=MM2+1
0032  DD2(MM2)=DIN(I)
0033  FF2(MM2)=F1(I)
0034  GO TO 81
0035  83  MM3=MM3+1
0036  DD3(MM3)=DIN(I)
0037  FF3(MM3)=F1(I)
0038  81  CONTINUE
0039  WRITE(6,4000)MM1,MM2,MM3
0040  4000  FORMAT(10X,I10,10X,I10,10X,I10)
0041  WRITE(6,2010)
0042  WRITE(6,4001)(DD1(I),FF1(I),I=1,MM1)
0043  4001  FORMAT(10X,F15,5,10X,E10,3)
0044  WRITE(6,2010)

```

SOURCE LIST

```

0045 WRITE(6,4001)(DD2(I),FF2(I),I=1,MM2) *
0046 WRITE(6,2010) *
0047 WRITE(6,4001)(DD3(I),FF3(I),I=1,MM3) *
0048 CALL CALABC(MM1,DD1,FF1,AA1,BB1,CC1,SS1) *
0049 CALL CALABC(MM2,DD2,FF2,AA2,BB2,CC2,SS2) *
0050 CALL CALABC(MM3,DD3,FF3,AA3,BB3,CC3,SS3) *
0051 DO 84 J=1,N *
0052 DC(J)=(D(J+1)+D(J))/2.0 *
0053 IF(DC(J).GT,DIVID1) GO TO 85 *
0054 YY(J)=AA1+BB1*ALOG10(DC(J))+CC1*(ALOG10(DC(J)))**2 *
0055 F2(J)=10.0**YY(J) *
0056 AN(J)=(D(J+1)-D(J))*F2(J) *
0057 GO TO 84 *
0058 85 IF(DC(J).GT,DIVID2) GO TO 86 *
0059 YY(J)=AA2+BB2*ALOG10(DC(J))+CC2*(ALOG10(DC(J)))**2 *
0060 F2(J)=10.0**YY(J) *
0061 AN(J)=(D(J+1)-D(J))*F2(J) *
0062 GO TO 84 *
0063 86 YY(J)=AA3+BB3*ALOG10(DC(J))+CC3*(ALOG10(DC(J)))**2 *
0064 F2(J)=10.0**YY(J) *
0065 AN(J)=(D(J+1)-D(J))*F2(J) *
0066 84 CONTINUE *
0067 WRITE(6,107) AA1,AA2,AA3,BB1,BB2,BB3,CC1,CC2,CC3,SS1,SS2,SS3 *
0068 107 FORMAT(1H1,/,10X,4HAA1=,F10,5,10X,4HAA2=,F10,5,10X,4HAA3=,F10,5, *
1/,10X,4HBB1=,F10,5,10X,4HBB2=,F10,5,10X,4HBB3=,F10,5,/,10X,4HCC1=, *
2F10,5,10X,4HCC2=,F10,5,10X,4HCC3=,F10,5,/,10X,4HSS1=,F10,5,10X, *
34HSS2=,F10,5,10X,4HSS3=,F10,5) *
0069 WRITE(6,2010) *
0070 2010 FORMAT(1H0,/) *
0071 WRITE(6,108)(DC(I),F2(I),AN(I),I=1,N) *
0072 108 FORMAT(10X,E13.6,3X,E13.6,3X,E13.6) *
0073 NN=N+1 *
0074 WRITE(6,2010) *
0075 WRITE(6,2003)(D(I),I=1,NN) *
0076 2003 FORMAT(10E13,6) *
0077 WRITE(6,2010) *
0078 DO 90 I=1,NN *
0079 D(I)=D(I)*10.0**(-4) *
0080 90 CONTINUE *
C ***** CALCULATE H AND HUF FACTORS ***** *
0081 DO 3 I=1,N *
0082 DC(I)=0.5*(D(I)+D(I+1)) *
0083 XY=D(I)/DC(I) *
0084 RAT=1.0-XY**2 *
0085 SRT=SQRT(RAT) *
0086 ASXY=ARSIN(XY) *
0087 RPI=0.6366199 *
0088 H(1,I)=RPI/SRT *
0089 H(2,I)=1.0+RPI*(-ASXY+XY/SRT) *
0090 H(3,I)=RPI*(2.0+SRT+XY**2/SRT) *
0091 H(4,I)=1.5+RPI*(1.5*(-ASXY+XY*SRT)+XY**3/SRT) *
0092 H(5,I)=RPI*(4.0+SRT*(1.0-RAT/3.0)+XY**4/SRT) *
0093 H(6,I)=RPI*(SRT*(6.0-4.0*RAT+1.2*RAT**2)+XY**6/SRT) *
0094 3 CONTINUE *
0095 DO 51 K=1,N *

```

```

SOURCE LIST
-----
0096      DO 50 J=K,N
0097      HUF(K,J)=RPI/SQRT(DC(J)**2-D(K)**2)
0098      50 CONTINUE
0099      51 CONTINUE
0100      DO 5 I=2,N
0101      JJ=I-1
0102      DO 4 M=1,JJ
0103      HUF(I,M)=0,0
0104      4 CONTINUE
0105      5 CONTINUE
0106      WRITE(6,2010)
C        ***** CALCULATION OF PARTICLE SIZE DISTRIBUTION *****
0107      FNV=0,0
0108      THZ=0,
0109      TH1=0,
0110      TH2=0,
0111      TH3=0,
0112      VTHZ=0,
0113      VTH1=0,
0114      VTH2=0,
0115      VTH3=0,
0116      DO 6 I=1,NN
0117      CPD(I)=0,
0118      VCPD(I)=0,
0119      6 CONTINUE
0120      WRITE(6,999)(TITLE(M),M=1,20)
0121      999 FORMAT(1H1,/,10X,25H***** INPUT DATA NAME ---,20A4)
0122      WRITE(6,1000)
0123      1000 FORMAT(1H0,/,20X,37HINCREMENTAL CONTRIBUTIONS TO MOMENTS ,/
10X,8HCELL NO.,7X,4HD**0,16X,4HD**1,16X,4HD**2,16X,4HD**3,/)
0124      DO 8 I=1,N
0125      THPZ=THZ
0126      THP1=TH1
0127      THP2=TH2
0128      THP3=TH3
0129      THZ=THZ+AN(I)*H(1,I)/DC(I)
0130      VTHZ=VTHZ+((H(1,I)/DC(I))**2/A-H(1,I)*FNV/(V*DC(I)))*AN(I)
0131      TH1=TH1+AN(I)*H(2,I)
0132      VTH1=VTH1+AN(I)*(H(2,I)**2/A-H(3,I)*DC(I)*FNV/V)
0133      TH2 =TH2+AN(I)*H(3,I)*DC(I)
0134      VTH2=VTH2+AN(I)*((H(3,I)*DC(I))**2/A-H(5,L)*DC(I)**3*FNV/V)
0135      TH3=TH3+AN(I)*H(4,I)*DC(I)**2
0136      VTH3=VTH3+AN(I)*((H(4,I)*DC(I)**2)**2/A-H(6,I)*DC(I)**5*FNV/V)
0137      THPZ=THZ-THPZ
0138      THP1=TH1-THP1
0139      THP2=TH2-THP2
0140      THP3=TH3-THP3
0141      WRITE(6,1001)I,THPZ,THP1,THP2,THP3,VTH1
0142      1001 FORMAT(1H ,14X,I3,3X,E15,8,3(5X,E15,8),10X,E15,8)
0143      DO 7 II=1,I
0144      CPD(II)=CPD(II)+AN(I)*HUF(II,I)
0145      VCPD(II)=VCPD(II)+AN(I)*(HUF(II,I)**2/A-HUF(II,I)*FNV/V)
0146      7 CONTINUE
0147      8 CONTINUE
0148      DO 30 J=1,N

```


SOURCE LIST

```

0195 PVSUM=PVSUM+PV(I)
0196 10 CONTINUE
0197 PSM2=PSMSUM/PDSUM
0198 AFSUM=0.0
0199 S=0.0
0200 DO 11 I=1,N
0201 AF(I)=DC(I)**2*3.1415*AN(I)*100.0/4.0
0202 AFSUM=AFSUM+AF(I)
0203 S=S+(DC(I)-PSM2)**2*PD(I)
0204 11 CONTINUE
0205 PDS=SQRT(S/PDSUM)
0206 VF2=PVSUM*100.0
0207 DENS2=100.0-VF2
0208 DENSA=100.0-AFSUM
0209 DO 13 I=1,N
0210 RNF(I)=PD(I)*100.0/PDSUM
0211 RVF(I)=PV(I)*100.0
0212 IF(I.GT.1) GO TO 12
0213 CNF(I)=RNF(I)
0214 CVF(I)=RVF(I)
0215 GO TO 13
0216 12 CNF(I)=CNF(I-1)+RNF(I)
0217 CVF(I)=CVF(I-1)+RVF(I)
0218 13 CONTINUE
0219 WRITE(6,1007)
0220 1007 FORMAT(1H1,/,40X,34H**** POROSITY CHARACTERISTICS ****)
0221 WRITE(6,998)(TITLE(M),M=1,20)
0222 998 FORMAT(1H0,/,10X,25H***** INPUT DATA NAME ---,20A4)
0223 WRITE(6,1008)
0224 1008 FORMAT(1H0,136(1H-))
0225 WRITE(6,1009)
0226 1009 FORMAT(1H ,2X,134HNO DIAMETER RANGE OBSERVED PORE NO OF PO
1RE PORE FREQUENCY STANDARD PORE INCREMENTAL
2 CUMULATIVE )
0227 WRITE(6,1010)
0228 1010 FORMAT(1H ,30X,8HSECTIONS,40X,9HDEVIATION,7X,6HVOLUME,3X,15HVOLUME
1 FRACTION,2X,15HVOLUME FRACTION)
0229 WRITE(6,1011)
0230 1011 FORMAT(1H ,9X,126H<MICROMETER> <NO/CM**2> <NO/CC>
1 <NO/CC,MICRON> <NO/CC,MICRON> < CC > <PERCENT>
2<PERCENT> )
0231 WRITE(6,1008)
0232 WRITE(6,1012)
0233 1012 FORMAT(1H0)
0234 NN=N+1
0235 DO 20 II=1,NN
0236 D(II)=D(II)*10.0**4
0237 20 CONTINUE
0238 DO 14 I=1,N
0239 WRITE(6,1013)I,D(I),D(I+1),AN(I),PD(I),SPD(I),VSPD(I),PV(I),
1RVF(I),CVF(I)
0240 1013 FORMAT(1H ,1X,12,2X,F7.2,3H---,F7.2,7(4X,E12.5))
0241 14 CONTINUE
0242 WRITE(6,1014)ANSUM,PDSUM,PVSUM
0243 1014 FORMAT(1H ,1X,7H<TOTAL>,17X,E12.5,4X,E12.5,36X,E12.5)

```

SOURCE LIST

```

0244 WRITE(6,1015) *
0245 1015 FORMAT(1H0,/,5X,80H***** THE VALUES WRITEN BELOW ARE CALCULATED F *
FROM PORES NUMBER IN EACH CELL ****) *
0246 WRITE(6,1016)PSM2 *
0247 1016 FORMAT(1H0,15X,18HMEAN PORE DIAMETER,18X,E15,8,5X,4H<CM>) *
0248 WRITE(6,1017)PDS *
0249 1017 FORMAT(1H0,15X,32HPORE DIAMETER STANDARD DEVIATION,4X,E15,8,5X *
1,4H<CM>) *
0250 WRITE(6,1018)PDSUM *
0251 1018 FORMAT(1H0,15X,30HTOTAL PORES NUMBER PER 1 CM**3,6X,E15,8,5X, *
14H<KO>) *
0252 WRITE(6,1019)VF2 *
0253 1019 FORMAT(1H0,15X,20HPORE VOLUME FRACTION,10X,F15,6,5X,9H<PERCENT>) *
0254 WRITE(6,1020)DENS2 *
0255 1020 FORMAT(1H0,15X,14HPellet DENSITY,26X,F15,6,5X,9H<PERCENT>) *
0256 WRITE(6,79)Densa *
0257 79 FORMAT(1H0,15X,30HDENSITY FROM PORE SECTION AREA,E15,8,9H<PERCENT> *
1) *
0258 WRITE(6,3000) *
0259 3000 FORMAT(1H1,/,10X,51H ***** PARTICLE DISTRIBUTION OF EACH CELL *
1 *****) *
0260 WRITE(6,3001) *
0261 3001 FORMAT(1H0,2X,2HNO,4X,11HCELL CENTER,10X,5HKO/CC,14X,18HSTANDARD D *
1EVIATION,8X,16HKO/CC/MICROMETER,4X,18HSTANDARD DEVIATION) *
0262 WRITE(6,1012) *
0263 DO 15 I=1,N *
0264 WRITE(6,3002)I,DC(I),PD(I),VPD(I),SPD(I),VSPD(I) *
0265 3002 FORMAT(1H ,2X,I3,5X,E10,3,3(5X,E15,8),10X,E15,8) *
0266 15 CONTINUE *
0267 DO 91 II=1,N *
0268 DC(II)=DC(II)*10,0**(4) *
0269 91 CONTINUE *
0270 CALL CALABC(N,DC,SPD,A2,B2,C2,S2) *
0271 DO 40 I=1,N *
0272 YYY(I)=A2+B2*ALOG10(DC(I))+C2*(ALOG10(DC(I)))**2 *
0273 F3(I)=10,0**YYY(I) *
0274 40 CONTINUE *
0275 WRITE(6,2010) *
0276 WRITE(6,110)A2,B2,C2,S2 *
0277 110 FORMAT(1H1,/,10X,3HA2=,F10,5,/,10X,3HB2=,F10,5,/,10X,3HC2=,F10,5, *
1/,10X,3HS2=,F10,5) *
0278 WRITE(6,2010) *
0279 WRITE(6,119)(DC(I),F3(I),I=1,N) *
0280 119 FORMAT(10X,E13,6,3X,E13,6) *
0281 PMSUM1=0,0 *
0282 PMSUM2=0,0 *
0283 PDSUM1=0,0 *
0284 PDSUM2=0,0 *
0285 DO 4005 JK=1,13 *
0286 PDSUM1=PDSUM1+PD(JK) *
0287 PMSUM1=PMSUM1+PD(JK)*DC(JK) *
0288 4005 CONTINUE *
0289 DO 4002 JM=24,40 *
0290 PDSUM2=PDSUM2+PD(JM) *
0291 PMSUM2=PMSUM2+PD(JM)*DC(JM) *

```

SN841-76-33

SOURCE LIST

```

0292      4002 CONTINUE
0293      PDLT1=PMSUM1/PDSUM1
0294      PDGT10=PMSUM2/PDSUM2
0295      WRITE(6,4003)PDLT1,PDGT10
0296      4003 FORMAT(1H0,/,10X,38HMEAN PORE DIAMETER LESS THAN 1 MICRON ,10X,
1E15,8,5X,8H<MICRON>,/,10X,41HMEAN PORE DIAMETER GREATER THAN 10 M
2ICRON,7X,E15,8,5X,8H<MICRON>)
0297      IF(LLL.EQ.999) GO TO 1
C
0298      H,STEHLE AND H.ASSMAN,S MODEL
0299      WRITE(6,66)
66 FORMAT(1H0,/,29HH,STEHLE AND H.ASSMAN,S MODEL,/,13X,12HBURNUP MWD
1/T,7X,14HPORE DISAPPEAR,6X,8HSWELLING,6X,15HDENSIFY PERCENT)
0300      DO 62 J=1,30
0301      BU(J)=1000.0*J
0302      DISAP(J)=BU(J)*10.0**(-2)*0.75/18.0
0303      SWELL(J)=1.0*10.0**(-4)*BU(J)
0304      ASSMAN=0.0
0305      DO 63 K=1,N
0306      IF(DC(K).LT.DISAP(J)) GO TO 63
0307      VDISF(K)=PD(K)*(DC(K)-DISAP(J))*3*3,1416*10.0**(-10)/6.0
0308      ASSMAN=ASSMAN+VDISF(K)
0309      63 CONTINUE
0310      ASS(J)=ASSMAN
0311      DELTD(J)=PVSUM*100.0-SWELL(J)-ASS(J)
0312      WRITE(6,64)BU(J),ASS(J),SWELL(J),DELTD(J)
0313      64 FORMAT(10X,F15,5,5X,F10,5,5X,F10,5,5X,F10,5)
0314      62 CONTINUE
C
0315      CALSON,S MODEL
0316      WRITE(6,78)
0317      78 FORMAT(1H1,5X,21HM.C.J.CARJSON,S MODEL)
0318      WRITE(6,65)
0319      65 FORMAT(1H0)
0320      DO 71 JK=1,30
0321      BU(JK)=1000.0*JK
0322      DO 72 JT=1,5
0323      TEMP(JT)=JT*100.0+900.0
0324      SUMPV(JK,JT)=0.0
0325      CARLSN(JK,JT)=+4.37*10.0**(-5)*BU(JK)-9.45*10.0**(-13)*BU(JK)**2
0326      1*TEMP(JT)
0327      DO 73 K=1,N
0328      IF(DC(K).LE.CARLSN(JK,JT)) GO TO 73
0329      PVOL(K)=3.1415*(DC(K)-CARLSN(JK,JT))*3*10.0**(-12)*PD(K)/6.0
0330      SUMPV(JK,JT)=SUMPV(JK,JT)+PVOL(K)
0331      73 CONTINUE
0332      SHRIK1(JK,JT)=(PVSUM-SUMPV(JK,JT))*100.0
0333      72 CONTINUE
0334      71 CONTINUE
0335      WRITE(6,74)(TEMP(JT),JT=1,5)
0336      74 FORMAT(1H0,20X,15HDENSIFY PERCENT,/,20X,5(2X,F6,1,3H(K)))
0337      DO 76 JK=1,30
0338      WRITE(6,77)BU(JK),SHRIK1(JK,1),SHRIK1(JK,2),SHRIK1(JK,3),
0339      1SHRIK1(JK,4),SHRIK1(JK,5)
0340      77 FORMAT(F15,2,3X,5HMWD/T,5(2X,E10,3))
0341      76 CONTINUE
GO TO 1

```

SOURCE LIST

```

0340      5000 STOP
0341      END

```

- 71 -

SOURCE	LIST	
0001	SUBROUTINE CALABC(MS,DX,FY,A,B,C,SIGMA)	
0002	DIMENSION DX(100),FY(100),X(100),Y(100)	*
0003	DOUBLE PRECISION XSUM,YSUM,X2SUM,XYSUM,X2YSUM,X3SUM,X4SUM	*
0004	DOUBLE PRECISION D0,D1,D2,D3	*
0005	XSUM=0,	*
0006	YSUM=0,	*
0007	X2SUM=0,	*
0008	Y2SUM=0,	*
0009	XYSUM=0,	*
0010	X2YSUM=0,	*
0011	X3SUM=0,	*
0012	X4SUM=0,	*
0013	DO 1 I=1,MS	*
0014	X(I)=ALOG10(DX(I))	*
0015	Y(I)=ALOG10(FY(I))	*
0016	XSUM=XSUM+X(I)	*
0017	YSUM=YSUM+Y(I)	*
0018	X2SUM=X2SUM+X(I)**2	*
0019	Y2SUM=Y2SUM+Y(I)**2	*
0020	XYSUM=XYSUM+X(I)*Y(I)	*
0021	X2YSUM=X2YSUM+X(I)**2*Y(I)	*
0022	X3SUM=X3SUM+X(I)**3	*
0023	X4SUM=X4SUM+X(I)**4	*
0024	1 CONTINUE	*
0025	D0=MS*X2SUM*X4SUM+X2SUM*XSUM*X3SUM+X2SUM*XSUM*X3SUM-X2SUM**3-X4SUM	*
	1*XSUM**2-MS*X3SUM**2	*
0026	D1=YSUM*X2SUM*X4SUM+X2SUM*XYSUM*X3SUM+X2YSUM*XSUM*X3SUM-X2SUM*X2SU	*
	1M*X2YSUM-X4SUM*XSUM*XYSUM-YSUM*X3SUM**2	*
0027	D2=MS*XYSUM*X4SUM+X2SUM*XSUM*X2YSUM+X2SUM*YSUM*X3SUM-X2SUM*XYSUM*X	*
	12SUM-MS*X3SUM*X2YSUM-X4SUM*YSUM*XSUM	*
0028	D3=MS*X2SUM*X2YSUM+YSUM*XSUM*X3SUM+X2SUM*XSUM*XYSUM-YSUM*X2SUM**2-	*
	1MS*XYSUM*X3SUM-X2YSUM*XSUM**2	*
0029	A=D1/D0	*
0030	B=D2/D0	*
0031	C=D3/D0	*
0032	ZSUM=0,0	*
0033	DO 2 I=1,MS	*
0034	ZSUM=ZSUM+(Y(I)-(A+B*X(I)+C*X(I)**2))**2	*
0035	2 CONTINUE	*
0036	SIGMA=SQRT(ZSUM/MS)	*
0037	RETURN	*
0038	END	*